

Investigando o mundo quântico: de átomos a líquidos

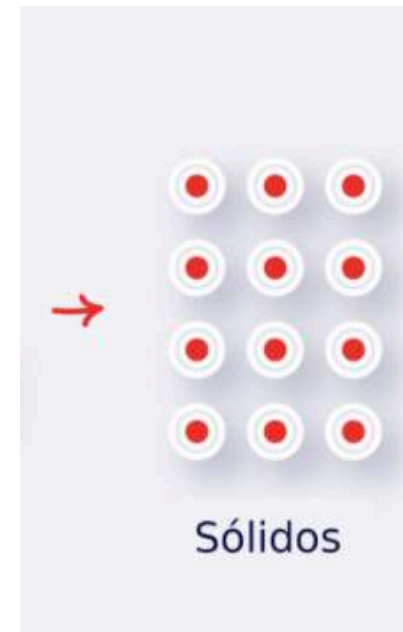
Luana S. Pedroza

UFABC - Brazil

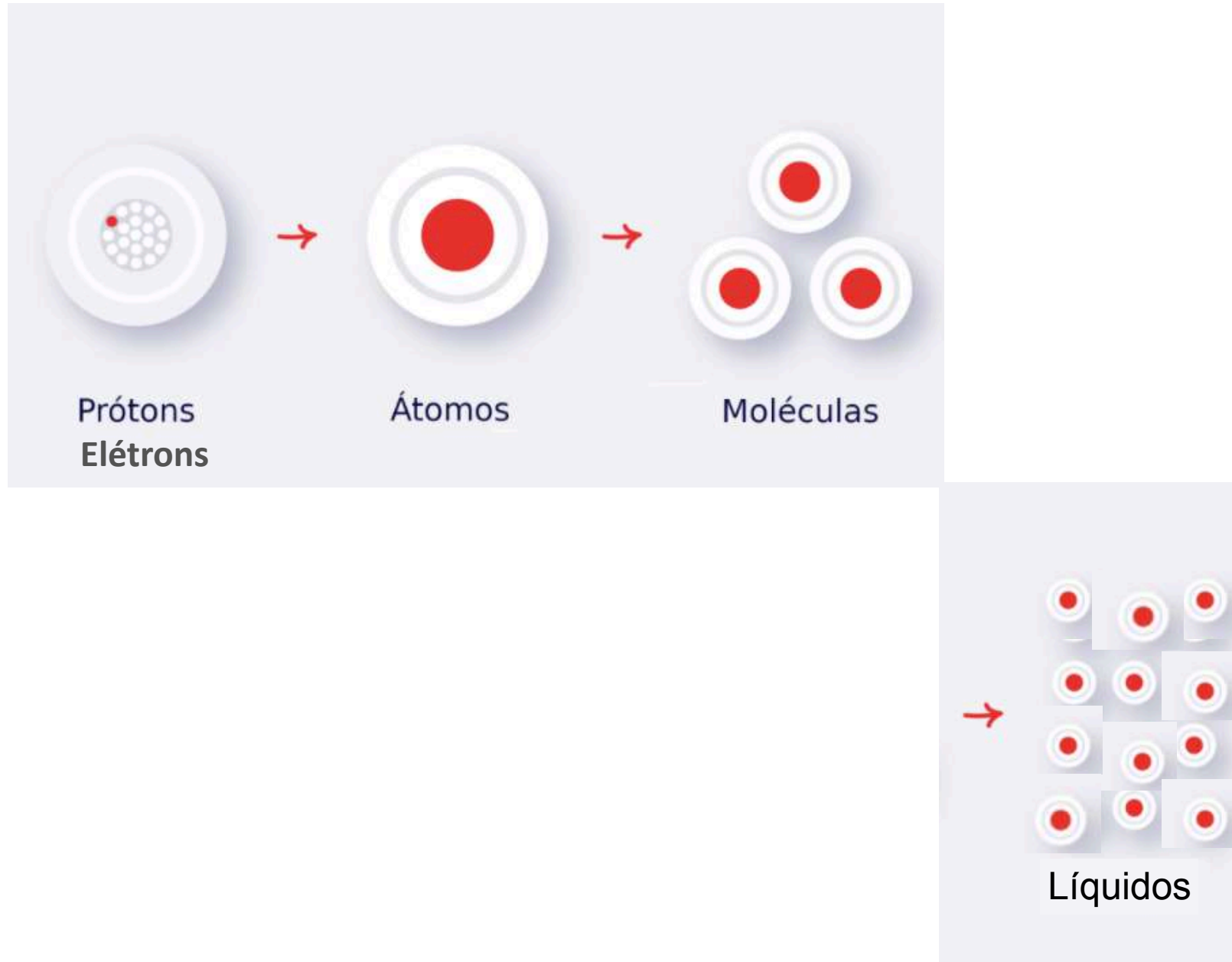
Max Planck Tandem Group

l.pedroza@ufabc.edu.br

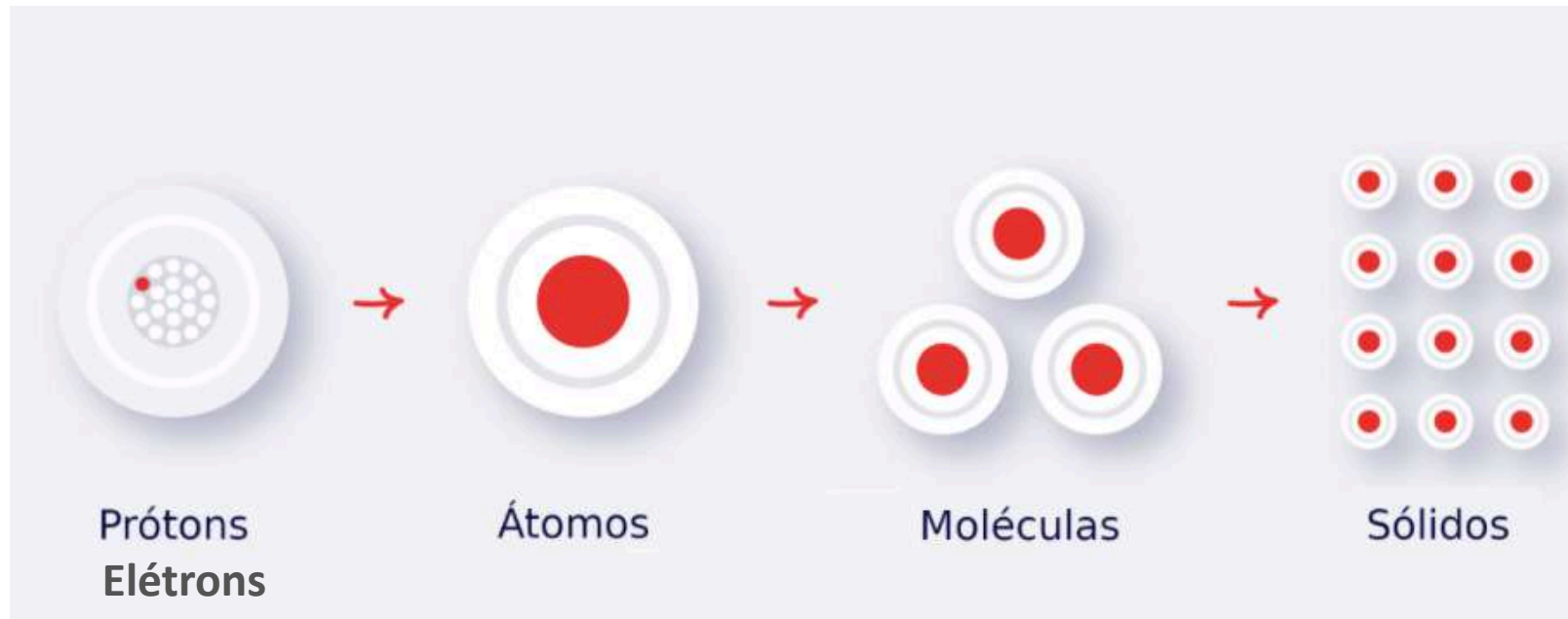
Objetivo



Objetivo



Objetivo



$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$



Objetivo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \quad +$$

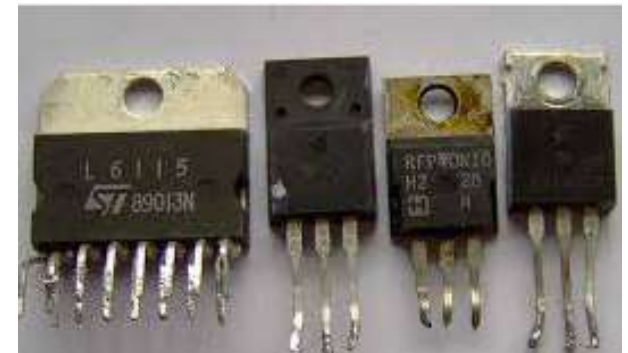
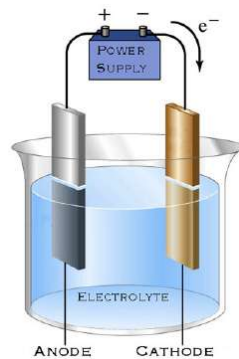
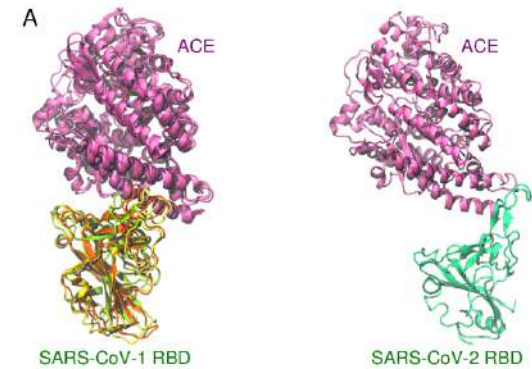
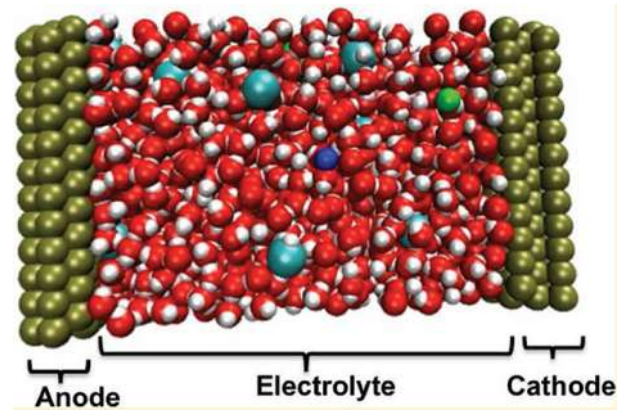


Tabela periódica

1																	18														
1.00794 1 H Hidrogênio	2											13	14	15	16	17	2 He Hélio														
3 Li Lítio	4 Be Berílio											5 B Boro	6 C Carbono	7 N Nitrogênio	8 O Oxigênio	9 F Fluor	10 Ne Neônio														
11 Na Sódio	12 Mg Magnésio	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al Alumínio	14 Si Silício	15 P Fósforo	16 S Enxofre	17 Cl Cloro	18 Ar Argônio														
19 K Potássio	20 Ca Cálcio	21 Sc Escândio	22 Ti Titânio	23 V Vanádio	24 Cr Cromo	25 Mn Manganês	26 Fe Ferro	27 Co Cobalto	28 Ni Níquel	29 Cu Cobre	30 Zn Zinco	31 Ga Gálio	32 Ge Germano	33 As Arsênio	34 Se Selênio	35 Br Bromo	36 Kr Criptônio														
37 Rb Rubídio	38 Sr Estrôncio	39 Y Ítrio	40 Zr Zircônio	41 Nb Níobio	42 Mo Molibdênio	43 Tc Técnetio	44 Ru Ródio	45 Rh Ródio	46 Pd Paládio	47 Ag Prata	48 Cd Cádmio	49 In Índio	50 Sn Estanho	51 Sb Antimônio	52 Te Telúrio	53 I Iodo	54 Xe Xenônio														
55 Cs Césio	56 Ba Bário	57 La Lantânio	58 Ce Cério	59 Pr Praseodímio	60 Nd Néodímio	61 Pm Promécio	62 Sm Samaritelo	63 Eu Európio	64 Gd Gadolínio	65 Tb Terbólio	66 Dy Dísmio	67 Ho Hólio	68 Er Erbólio	69 Tm Tulio	70 Yb Ítrio	71 Lu Lutécio	72 Hf Háfio	73 Ta Tântalo	74 W Tungstênio	75 Re Rênio	76 Os Ósmio	77 Ir Írrio	78 Pt Platina	79 Au Ouro	80 Hg Mercúrio	81 Tl Telúrio	82 Pb Chumbo	83 Bi Bismuto	84 Po Polônio	85 At Ástato	86 Rn Radônio
87 Fr Francium	88 Ra Rádio	89 Ac Actínio	90 Th Tório	91 Pa Protactínio	92 U Urânio	93 Np Neptúlio	94 Pu Plutônio	95 Am Americônio	96 Cm Cúrio	97 Bk Berkelônio	98 Cf Califórnia	99 Es Einsteinônio	100 Fm Fermônio	101 Md Mendelevônio	102 No Nobelônio	103 Lr Lawrencônio	104 Rf Rutherfordônio	105 Db Dubnônio	106 Sg Seabórgio	107 Bh Bohrônio	108 Hs Hassium	109 Mt Meitnerônio	110 Ds Darmstadtônio	111 Rg Roentgênio	112 Cn Copernício	113 Nh Nihônio	114 Fl Fleróvio	115 Mc Moscóvio	116 Lv Livermório	117 Ts Tenessônio	118 Og Oganessônio



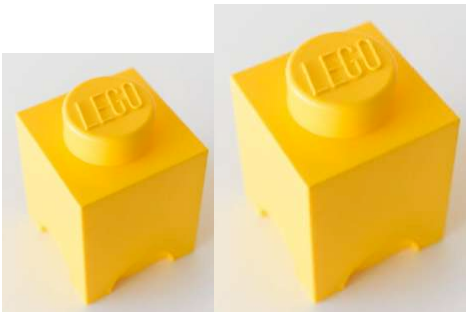
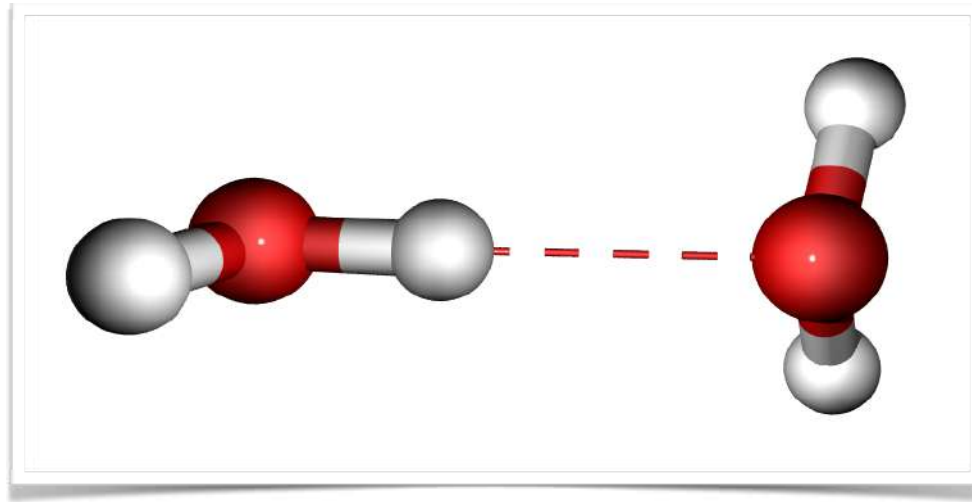
Tabela periódica

1																	18
1 H 1.00794	2 He 4.00260																
3 Li 6.941	4 Be 9.01218											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.630	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc 98.906	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.6	53 I 126.91	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57 La 138.905	58 Ce 140.12	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm 144.913	62 Sm 150.36	63 Eu 151.964	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.259	69 Tm 168.930	70 Yb 173.054	71 Lu 174.967	72 Hf 178.49
87 Fr [223]	88 Ra [226]	89 Ac [227]	90 Th [232]	91 Pa [231]	92 U [238]	93 Np [237]	94 Pu [244]	95 Am [243]	96 Cm [247]	97 Bk [247]	98 Cf [251]	99 Es [252]	100 Fm [257]	101 Md [258]	102 No [259]	103 Lr [262]	104 Rf [261]
105 Db [262]	106 Sg [266]	107 Bh [264]	108 Hs [277]	109 Mt [268]	110 Ds [271]	111 Rg [272]	112 Cn [285]	113 Nh [284]	114 Fl [289]	115 Mc [288]	116 Lv [293]	117 Ts [294]	118 Og [294]	119 [293]	120 [293]	121 [293]	122 [293]

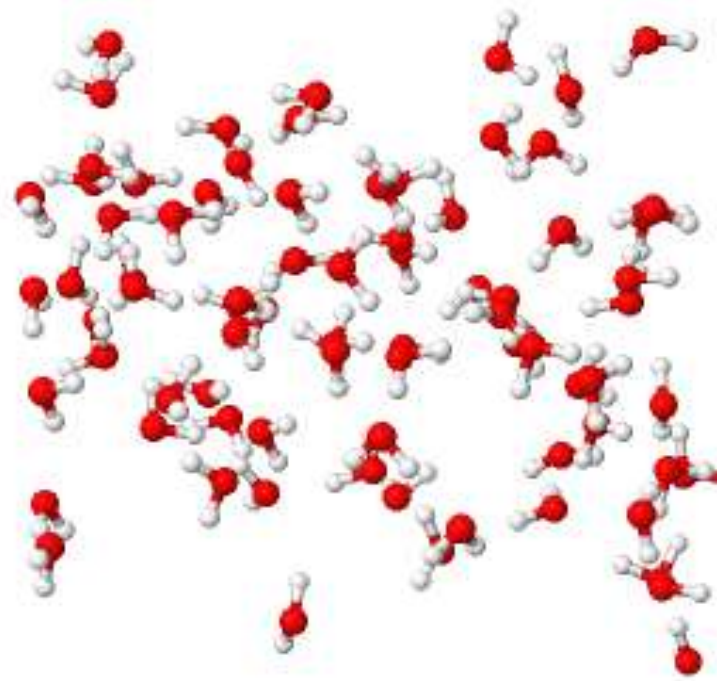
1s ¹																1s ²	
2s ¹	2s ²											2p ¹	2p ²	2p ³	2p ⁴	2p ⁵	2p ⁶
3s ¹	3s ²											3p ¹	3p ²	3p ³	3p ⁴	3p ⁵	3p ⁶
4s ¹	4s ²	3d ¹	3d ²	3d ³	3d ⁴	3d ⁵	3d ⁶	3d ⁷	3d ⁸	3d ⁹	3d ¹⁰	4p ¹	4p ²	4p ³	4p ⁴	4p ⁵	4p ⁶
5s ¹	5s ²	4d ¹	4d ²	4d ³	4d ⁴	4d ⁵	4d ⁶	4d ⁷	4d ⁸	4d ⁹	4d ¹⁰	5p ¹	5p ²	5p ³	5p ⁴	5p ⁵	5p ⁶
6s ¹	6s ²	4f	5d ²	5d ³	5d ⁴	5d ⁵	5d ⁶	5d ⁷	5d ⁸	5d ⁹	5d ¹⁰	6p ¹	6p ²	6p ³	6p ⁴	6p ⁵	6p ⁶
7s ¹	7s ²	5f	6d ²	6d ³	6d ⁴	6d ⁵	6d ⁶	6d ⁷	6d ⁸	6d ⁹	6d ¹⁰						

4f ¹	4f ²	4f ³	4f ⁴	4f ⁵	4f ⁶	4f ⁷	4f ⁸	4f ⁹	4f ¹⁰	4f ¹¹	4f ¹²	4f ¹³	4f ¹⁴	5d ¹
5f ¹	5f ²	5f ³	5f ⁴	5f ⁵	5f ⁶	5f ⁷	5f ⁸	5f ⁹	5f ¹⁰	5f ¹¹	5f ¹²	5f ¹³	5f ¹⁴	6d ¹

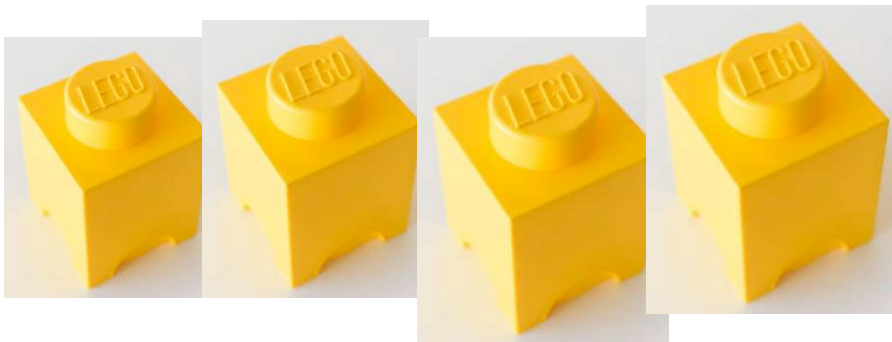
Ligação de hidrogênio



Líquidos



Dinâmica Molecular
Machine Learning



SÉCULO XIX



Newton

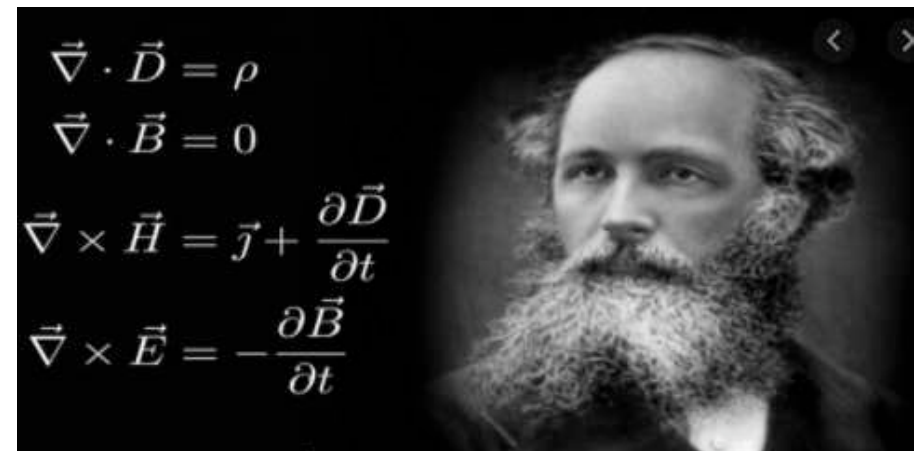
EXEMPLO

- A velocidade de um carro, que viaja com uma aceleração constante, muda de 6 m/s para 22 m/s em um intervalo de 5 minutos (300 s). Qual é a distância (em metros) que o carro percorre neste intervalo de tempo?

SÉCULO XIX



Newton

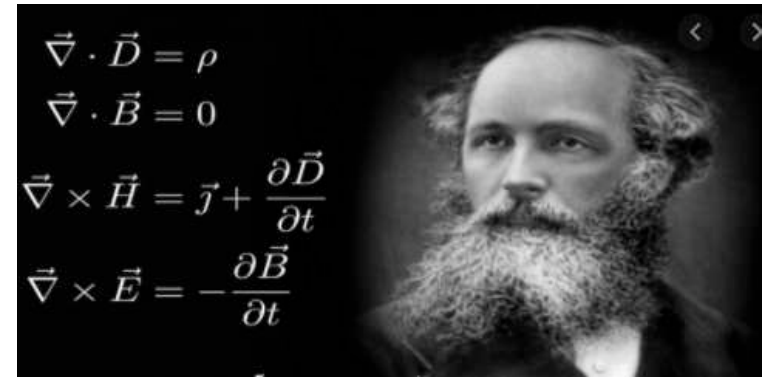


Maxwell

SÉCULO XIX



Newton



Maxwell

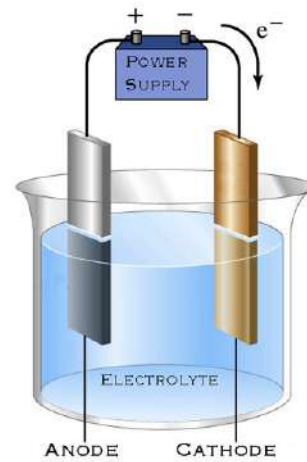
École Polytechnique	Glasgow school	Berlin school	Edinburgh school
			
<u>Sadi Carnot</u> (1796-1832)	<u>William Thomson</u> (1824-1907)	<u>Rudolf Clausius</u> (1822-1888)	<u>James Maxwell</u> (1831-1879)
Vienna school	Gibbsian school	Dresden school	Dutch school
			
<u>Ludwig Boltzmann</u> (1844-1906)	<u>Willard Gibbs</u> (1839-1903)	<u>Gustav Zeuner</u> (1828-1907)	<u>Johannes van der Waals</u> (1837-1923)

SÉCULO XIX

Mecânica clássica



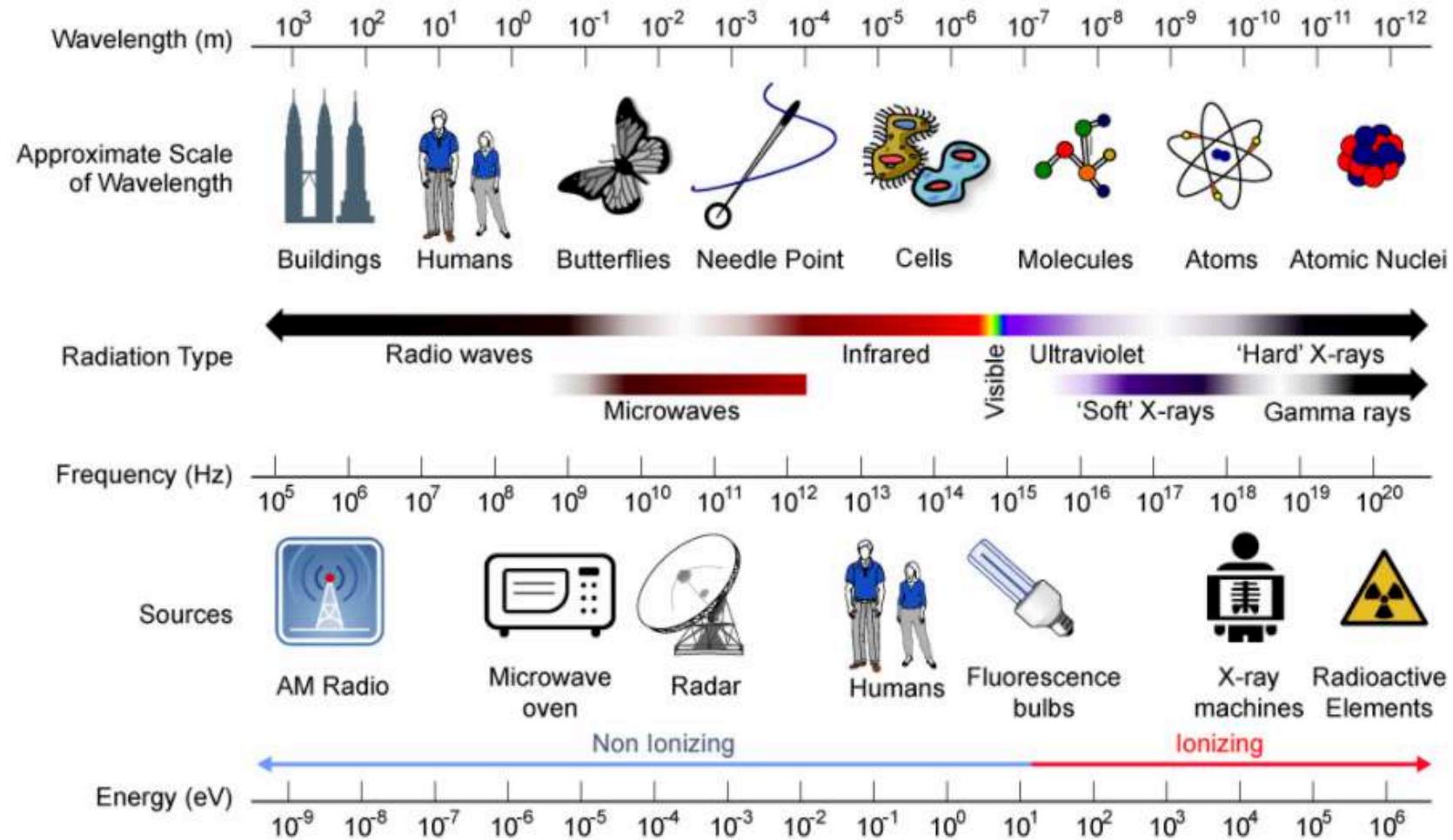
Eletromagnetismo



Termodinâmica

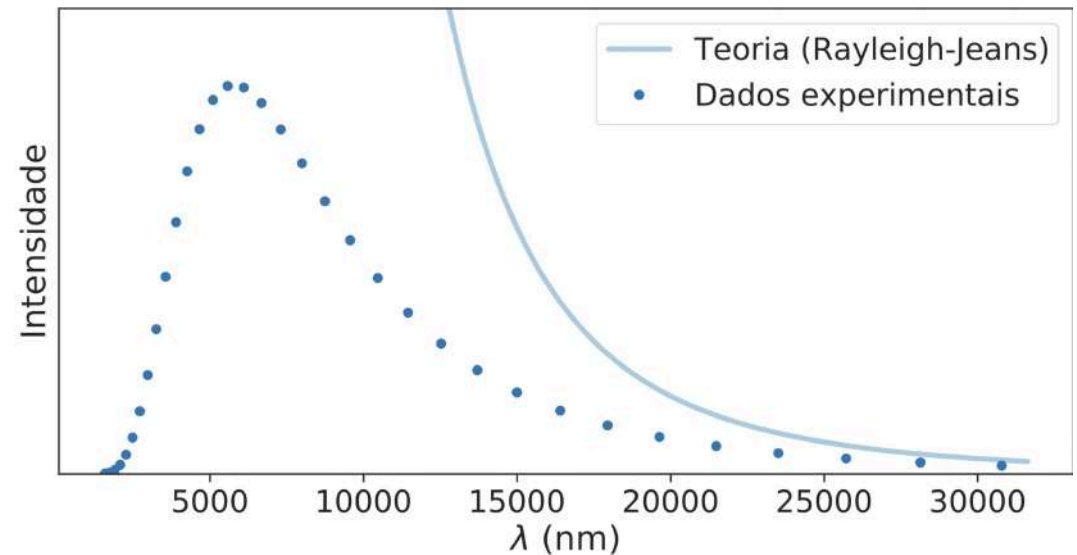
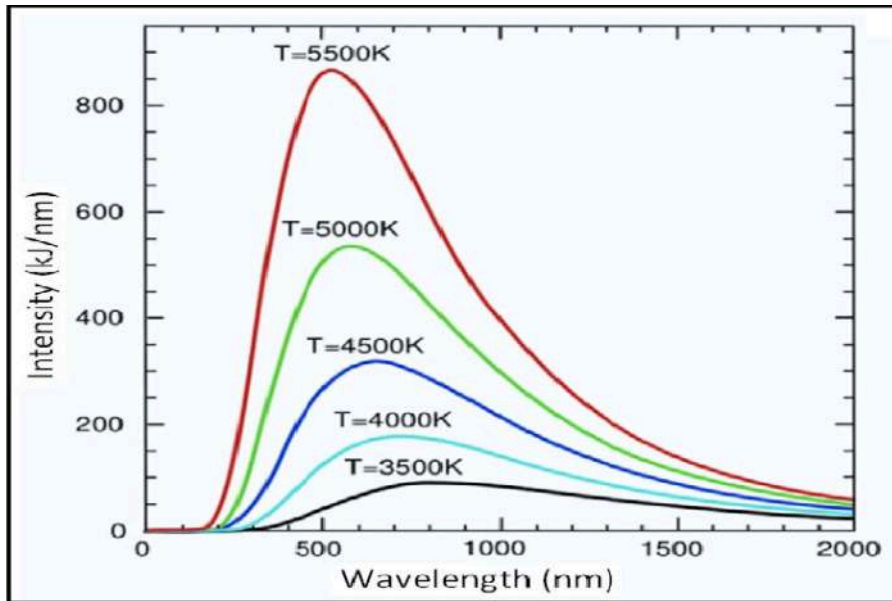


ESCALA



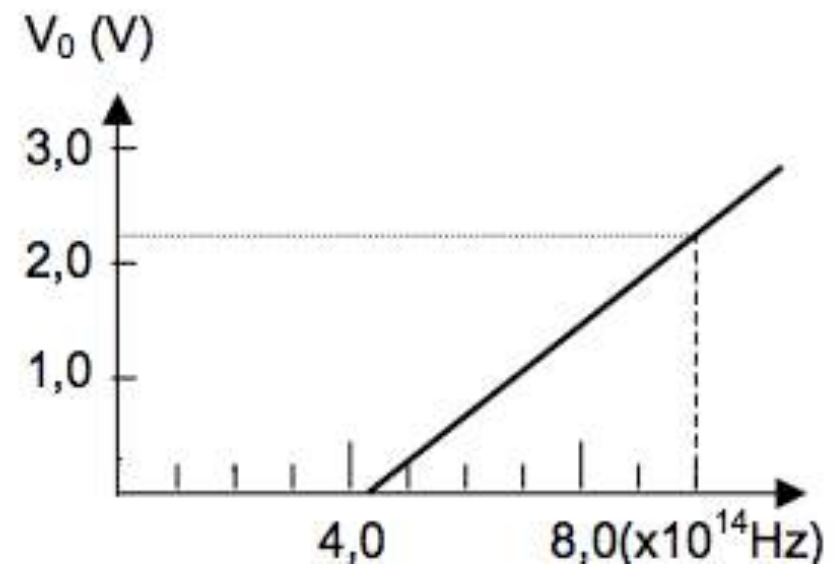
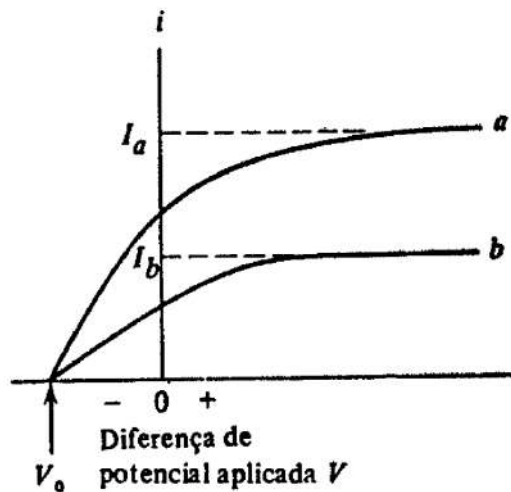
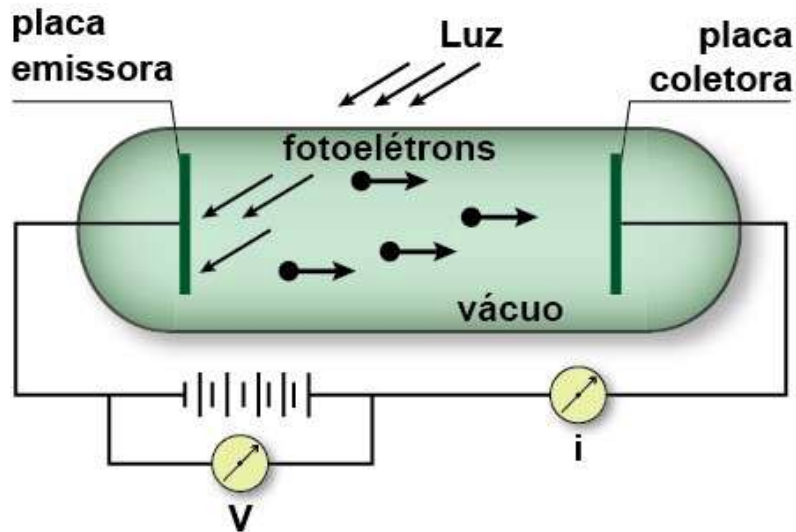
EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

- Radiação corpo negro



EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

- Efeito fotoelétrico



IDEIA ATÔMICA

- Proust (1801): lei das proporções definidas
- Dalton (1808): lei das proporções múltiplas
- Gay-Lussac (1808): lei dos volumes
- Avogadro (1811): número de Avogadro
- Mendeleev (1869): tabela periódica
- Faraday (1833): eletrólise
- Boltzmann (1870): teoria cinética dos gases e termodinâmica

MODELOS ATÔMICOS

Modelo de Rutherford (1911)

MODELOS DE RUTHERFORD

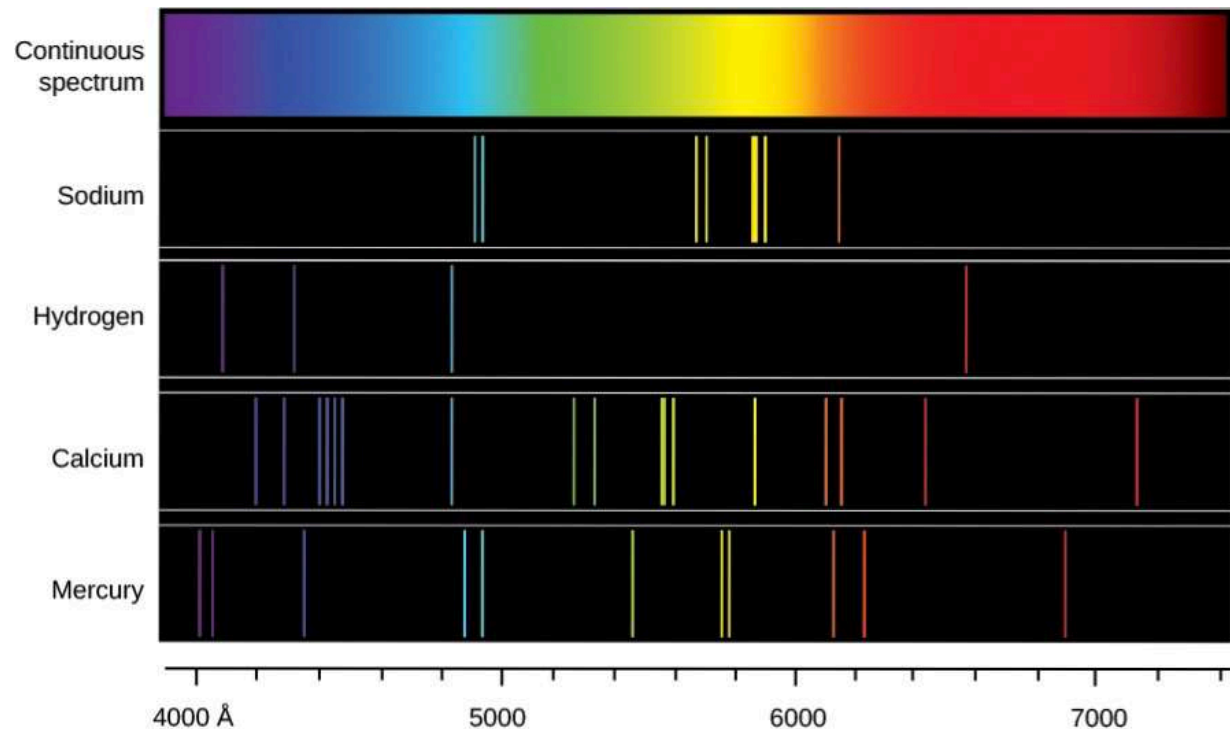
Consequências do modelo de Rutherford:

- espectro contínuo da radiação
- instabilidade do átomo

MODELOS ATÔMICOS

Evidências experimentais:

- átomo é estável
- átomos emitem e absorvem radiação em frequências específicas



ÁTOMO DE HIDROGÊNIO



MODELO DE BOHR (1913)

Postulados:

- 1 - Os elétrons de um átomo só podem existir em estados estacionários, onde os valores de energia são bem definidos e discretos; não há emissão ou absorção enquanto estão nesses estados
- 2 - Ocorre emissão ou absorção quando o sistema efetua transição de um estado para outro
- 3 - Existe uma relação quantitativa entre a frequência da radiação absorvida/emitida e a diferença de energia dos dois estados estacionários

MODELO DE BOHR (1913)

Problemas:

- previa as linhas espectrais, mas não suas intensidades
- falhava para átomos mais pesados
- era incapaz de explicar a interação com o campo magnético
- não se aplicava a fenômenos que dependiam do tempo

EXEMPLO

Considere que o momento angular da Terra devido ao seu movimento ao redor do Sol é quantizado de acordo com o postulado de Bohr ($L = n\hbar$). Nesse caso, qual seria o valor de n ? Esta quantização poderia ser detectada? Justifique sua resposta. Considere que a órbita terrestre é circular, a massa da Terra é $M = 6 \times 10^{24}$ kg, o raio da órbita terrestre é $R = 1,5 \times 10^{11}$ m e a velocidade orbital terrestre é 30 km/s.

EXEMPLO

Ex: Um elétron com 3,0 eV de energia é capturado por um núcleo do átomo de Hélio. No processo, um fóton de 2,4 Å é emitido. Considerando o modelo de Bohr, para qual nível de energia o elétron foi capturado?

EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

- Espectros
- Radiação corpo negro
- Efeito fotoelétrico
- Efeito compton

O QUE FAZER?

O QUE FAZER?

**NOVA TEORIA: MECÂNICA
QUÂNTICA**

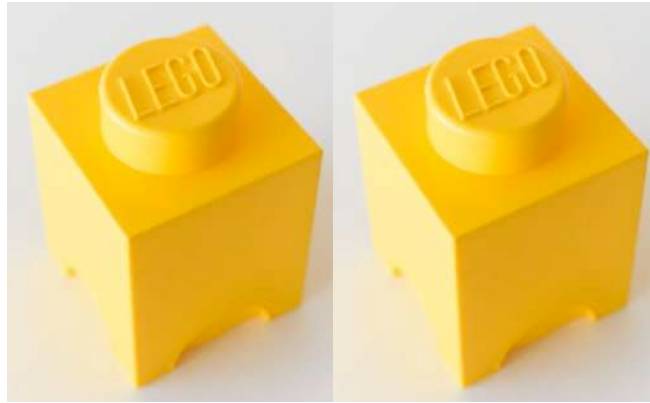
MECÂNICA QUÂNTICA - POSTULADOS

- O estado físico de um sistema é descrito pela função de onda, que contém toda a informação sobre o sistema.

MECÂNICA QUÂNTICA - POSTULADOS

- A evolução temporal de um sistema é dada pela solução da equação de Schrödinger dependente do tempo:

próxima semana



links

https://phet.colorado.edu/sims/html/blackbody-spectrum/latest/blackbody-spectrum_pt_BR.html

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/photoelectric>

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/hydrogen-atom>