



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Escola de Engenharia de Lorena – EEL

“PPE6408 – Tópicos Especiais de Física”

Prof. Dr. Durval Rodrigues Junior

Departamento de Engenharia de Materiais (DEMAR)

Escola de Engenharia de Lorena (EEL)

Universidade de São Paulo (USP)

Polo Urbo-Industrial, Gleba AI-6 - Lorena, SP 12600-970

durval@demar.eel.usp.br

www.demar.eel.usp.br/docentes ou www.eel.usp.br (Página dos professores)

Área I

Rodovia Itajubá-Lorena, Km 74,5

CEP 12600-970 - Lorena - SP

Tel. (12) 3159-5007/3153-3209

USP Lorena

www.eel.usp.br

Área II

Polo Urbo-Industrial Gleba AI-6

CEP 12600-970 - Lorena - SP

Tel. (12) 3159-9900

UNIDADE 9 -

**Mais Ondas de
Matéria**

O átomo na “Antiga” Mecânica Quântica

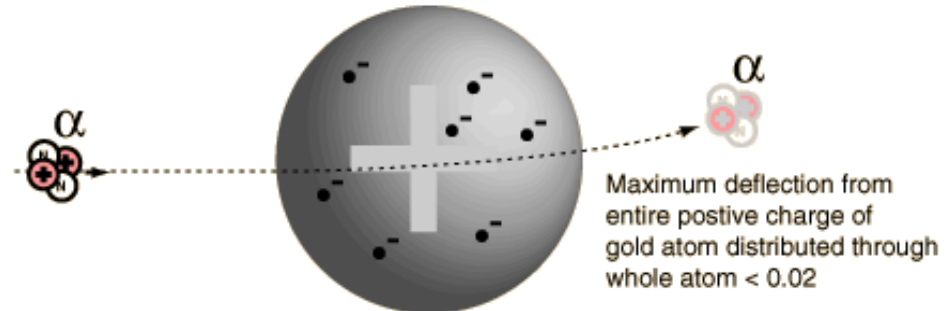
- Por volta de 1910 acumularam-se inúmeras evidências experimentais de que os átomos continham elétrons (aquelas partículas que compunham os raios catódicos e conduziam a eletricidade).

Mas os átomos eram neutros. Portanto, deviam possuir uma quantidade igual de carga positiva.

Modelo de Thomson (1910)

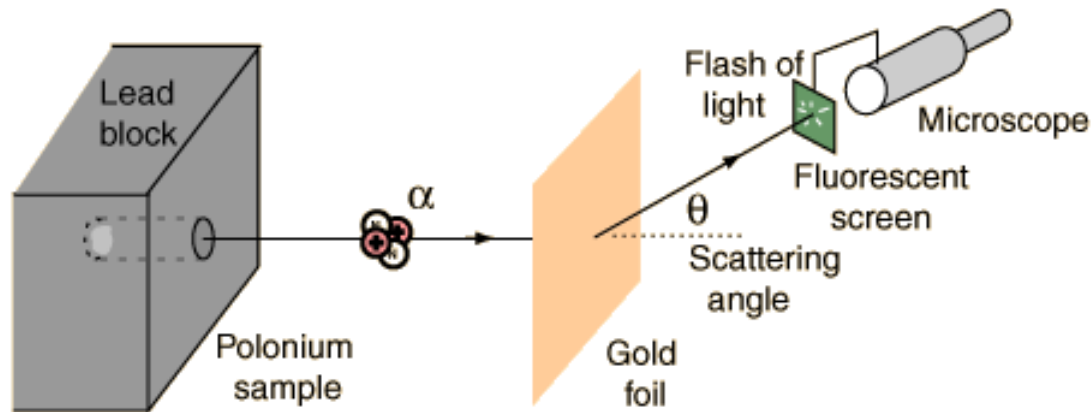
Os átomos seriam compostos por elétrons pontuais, distribuídos numa massa de carga positiva uniforme: Modelo do “*pudim de passas*”.

Modelo de Thomson: previa uma deflexão pequena das partículas α

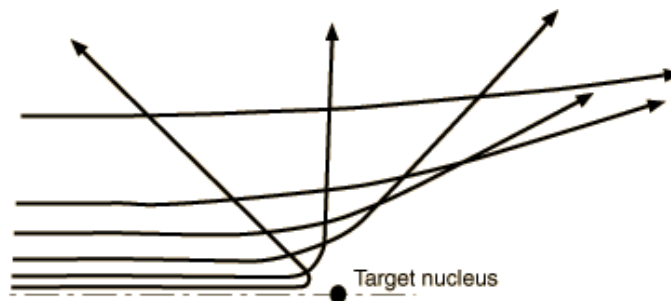


Exemplo histórico: estrutura do átomo

- **Ernest Rutherford (1911)**: descobriu a **estrutura nuclear** do átomo. Primeiro experimento de colisão de partículas sub-atômicas.



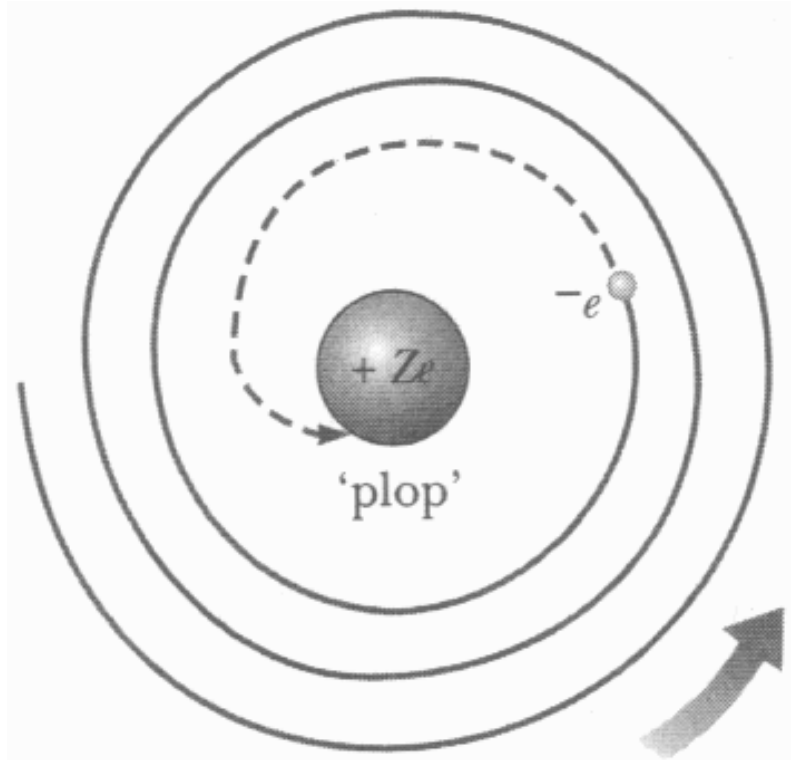
Rutherford observou grandes deflexões, sugerindo um núcleo duro e pequeno



O átomo na “Antiga” Mecânica Quântica

- Rutherford então propôs um modelo no qual toda a carga positiva dos átomos, que comportaria praticamente toda a sua massa, estaria concentrada numa pequena região do seu centro: *o núcleo*. Os elétrons, então, ficariam orbitando em torno deste núcleo: Modelo “*planetário*”.

Entretanto, estes elétrons em órbita estariam acelerados (aceleração centrípeta). Assim, *segundo o eletromagnetismo*, deveriam **emitir energia** na forma de radiação eletromagnética, até **colapsarem para o núcleo**!



O modelo atômico de Bohr (1913)

Motivação experimental:

Experimentos de espectroscopia de átomos de H apresentavam raias espectrais discretas :

Série de Balmer

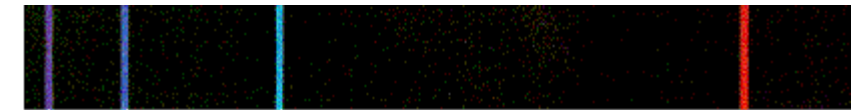
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n=3, 4, 5, \dots$$

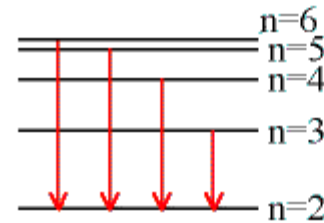
$$R_H = 109,677 \text{ cm}^{-1}$$



410 434 486 656 $\lambda(\text{\AA})$



6→2 5→2 4→2 n=3→2



————— n=1 (Ground State)

O modelo atômico de Bohr (1913)

Baseado na idéia da “quantização” e da existência dos fótons, Bohr introduziu o seu modelo para o **átomo de hidrogênio**, baseado em 4 postulados:

- 1) Um elétron se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana do núcleo, (mecânica clássica).
- 2) O elétron só pode se mover em órbitas que apresentem **momentos angulares L “quantizados”**:

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\hbar = h/2\pi)$$

O modelo atômico de Bohr (1913)

- 3) O elétron fica em *órbitas “estacionárias”* e *não emite radiação eletromagnética*. Portanto, a sua energia total *E* permanece constante.
- 4) *Radiação é emitida* se um elétron, que se move inicialmente numa órbita de energia E_i , muda para uma órbita de energia E_f menor que E_i . A frequência da radiação emitida é dada por:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

Em outras palavras, o átomo emite um *fóton*.

O modelo atômico de Bohr (1913)

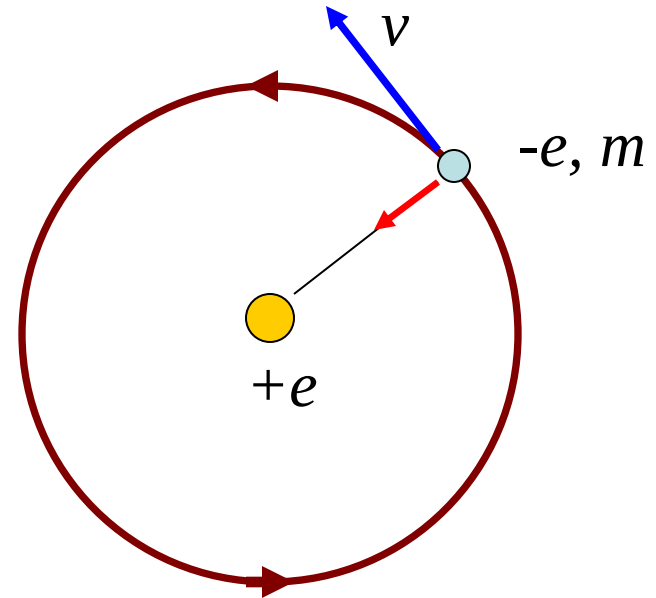
Considerando o núcleo em repouso, a força elétrica no elétron é dada por

$$F = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2}$$

Para uma órbita circular:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Se } L = rmv \\ \text{e } L = n\hbar \end{array} \right\} \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{rm}$$



$$\Rightarrow r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2$$

Quantização das órbitas!

O modelo atômico de Bohr (1913)

Portanto, Bohr prevê que as órbitas têm raios:

$$r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2 \quad \text{ou} \quad r_n = r_0 n^2$$

com $r_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}$ ou $r_0 = 0,5291 \text{ \AA}$

Mas:
$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Assim, a energia das diferentes órbitas serão dadas por:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} eV$$

O modelo atômico de Bohr (1913)

As frequências emitidas nas transições seriam:

$$\nu_{n \rightarrow n'} = \frac{E_{n'} - E_n}{h} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{n \rightarrow n'}} = \frac{\nu_{n \rightarrow n'}}{c} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

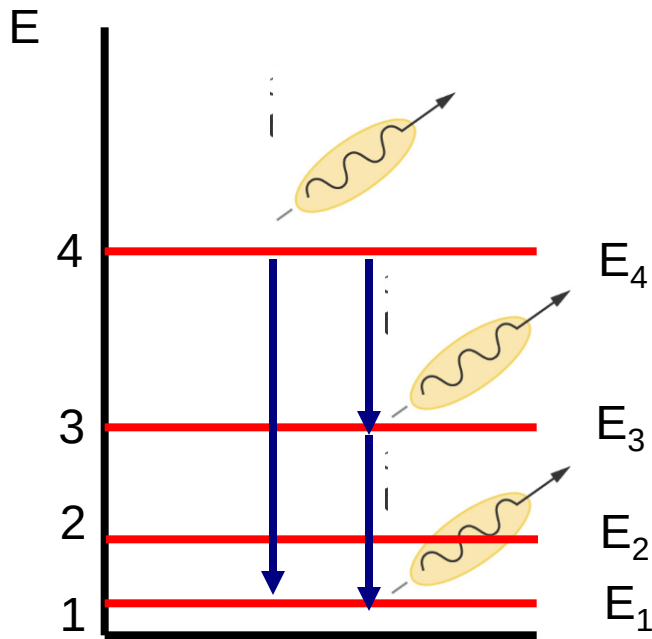
Portanto, Bohr prevê que:

$$R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 109,74 \text{ cm}^{-1}$$

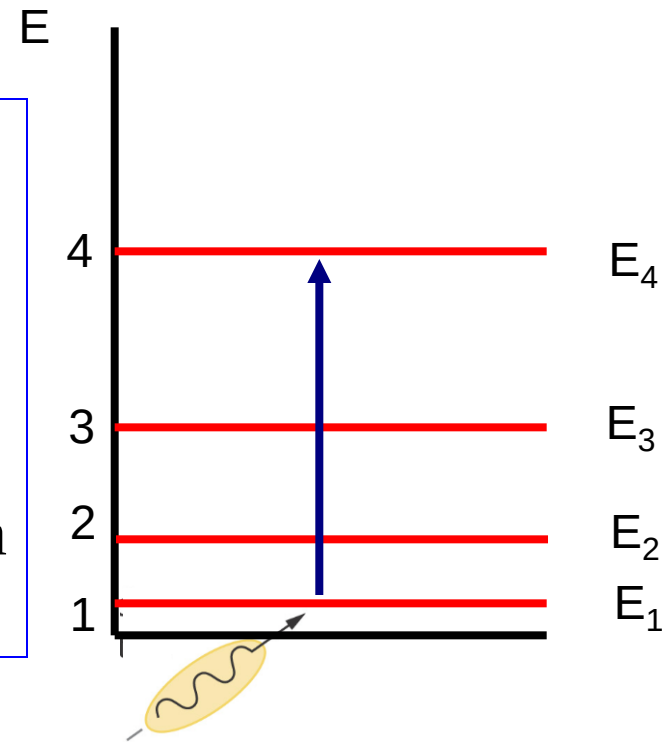
sendo um êxito para a sua teoria!

O sistema pode passar de um estado n para um n' , de energia menor, emitindo um fóton de frequência:

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$

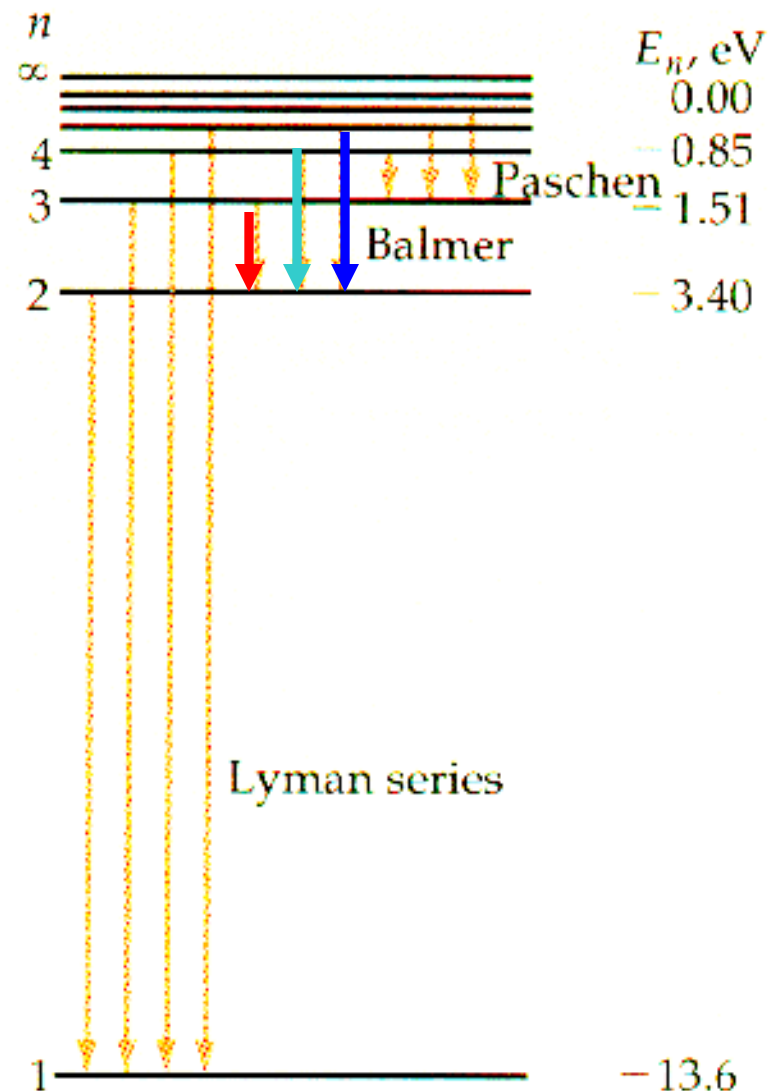
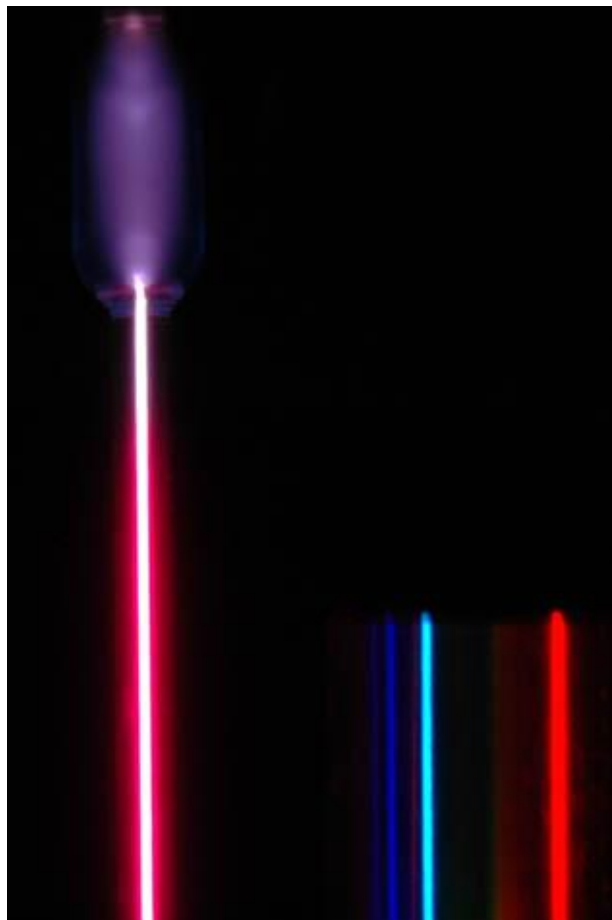


Pode também transicionar para um estado de energia maior absorvendo um fóton.



O estado de energia mais baixa é chamado de *estado fundamental*.

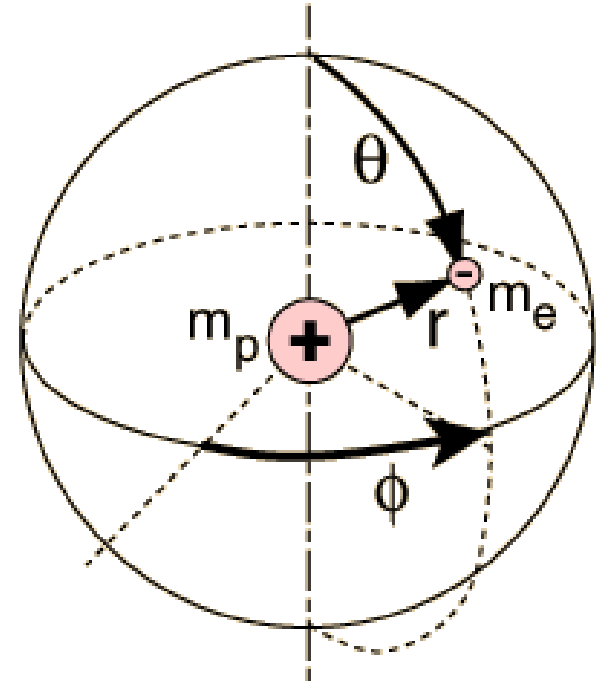
O modelo de Bohr explicou as *raias espectrais*, conhecidas para o *átomo de hidrogênio*, e mostrou que deveriam existir outras, fora do espectro visível.



A equação de Schrödinger e o átomo de H

O poço de potencial onde o elétron está confinado tem a forma

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$



A equação de Schrödinger nesse potencial é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + U(r) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

A equação de Schrödinger e o átomo de H

Como o potencial só depende de r , a função de onda pode ser separada (em coordenadas esféricas)

Isto produz 3 equações separadas, para as coordenadas eletrônicas do átomo de H !

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \psi(r) P(\theta) F(\phi)$$

n l m

número
quântico
principal

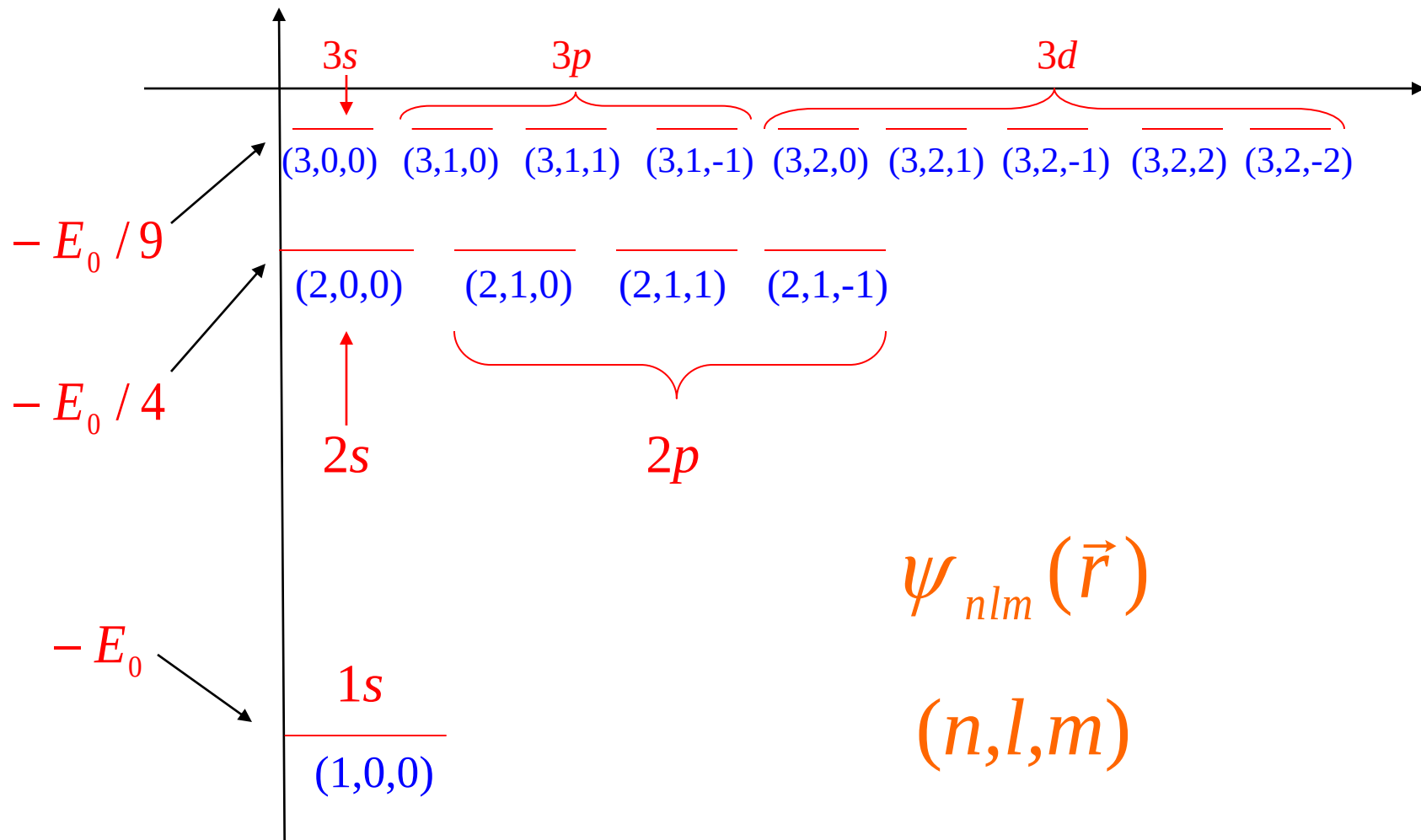
número
quântico
orbital

número
quântico
magnético

símbolo	valores
n	1,2,3,
l	0,..., $n-1$
m	$-l,...,l$

A equação de Schrödinger e o átomo de H

O número quântico orbital l corresponde aos estados: $l = 0, 1, 2, 3, 4$
 s, p, d, f, g



A equação de Schrödinger e o átomo de H

Para o estado fundamental ($n = 1, l = 0, m = 0$) temos a equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \psi(\vec{r})}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(\vec{r})}{dr} \right) + U(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

A função de onda radial do estado fundamental (1,0,0):

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} r_0^{3/2}} e^{-r/r_0} \quad ; \quad r_0 \text{ é o raio de Bohr}$$

A equação de Schrödinger e o átomo de H

A densidade de probabilidade associada à função de onda:

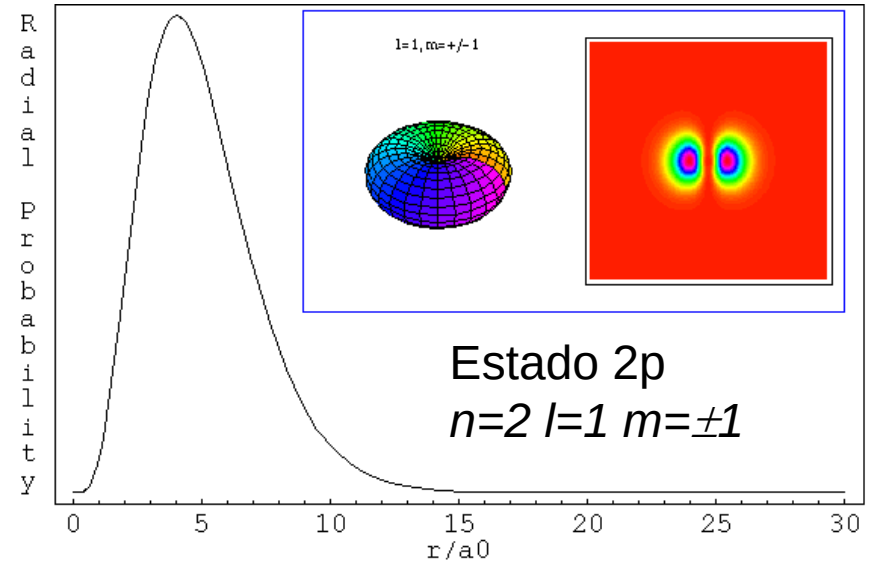
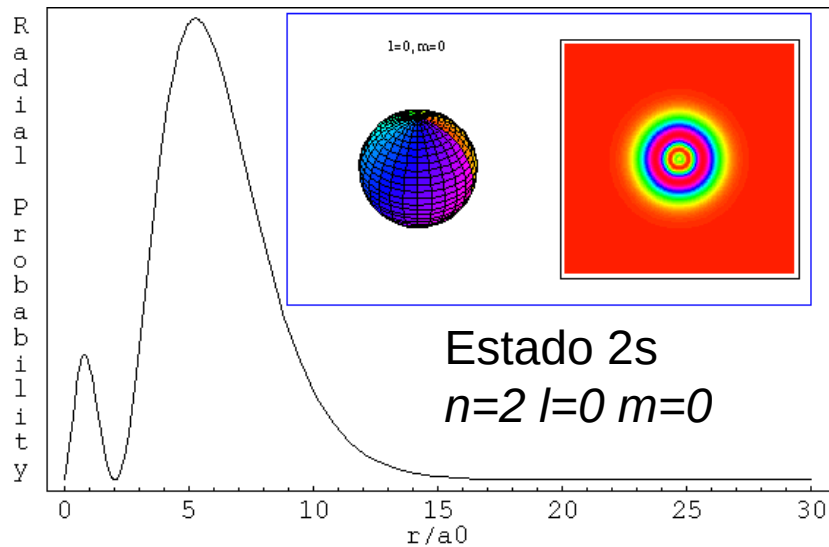
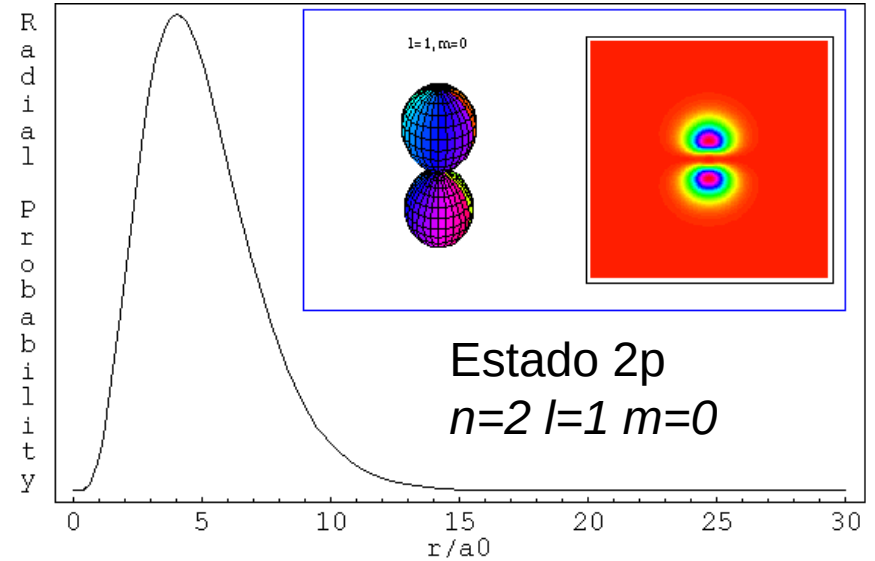
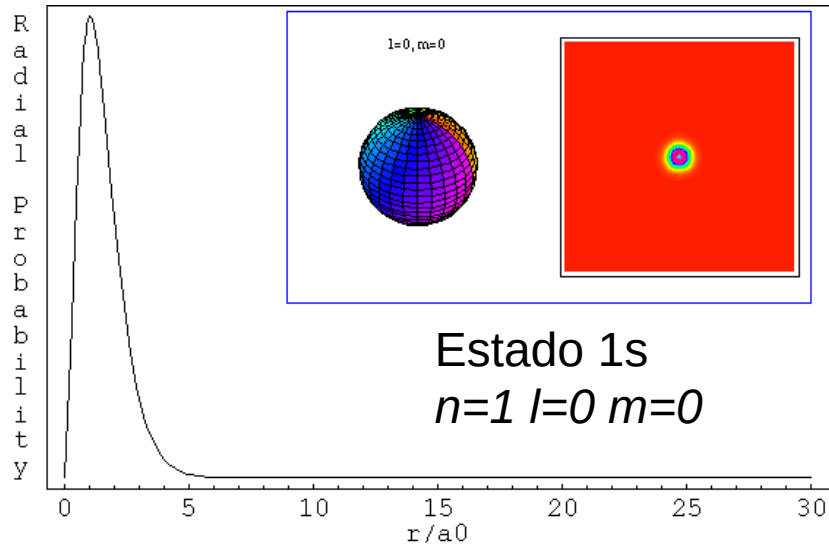
$$\left[\begin{array}{c} \text{Probabilidade de medir} \\ \text{no volume } dV \\ \text{à distância } r \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{densidade de probabilidade} \\ |\Psi(r)|^2 \\ \text{à distância } r \end{array} \right] \times dV$$

$$P(r)dr = |\psi(r)|^2 dV = |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr$$

onde

$$P(r) = \frac{4}{r_0^3} r^2 e^{-2r/r_0}$$

Densidade de probabilidade do H



Orbitais atômicos

[orbitais atômicos](#)

