

Disciplina: NMA-103



Prof. Dr. Jose Antonio Souza

02/2015



Física Clássica

Tudo resolvido no final do século XIX

- Maxwell (1865)
 - Formulação elegante e concisa
 - Fundamentos da Eletricidade e Magnetismo
 - Matematização sofisticada

Eletrodinâmica Clássica
Mecânica Clássica
Mecânica Estatística
Termodinâmica

THE
LONDON, EDINBURGH AND DUBLIN
PHILOSOPHICAL MAGAZINE
AND
JOURNAL OF SCIENCE.

[FOURTH SERIES.]

MARCH 1861.

XXV. *On Physical Lines of Force.* By J. C. MAXWELL, Professor of Natural Philosophy in King's College, London*.

A primeira contribuição de Maxwell: *On Physical Lines of Force* (1861)

Philosophical Transactions of the Royal Society of London **155**, 459-512 (1865).

Mecânica Quântica

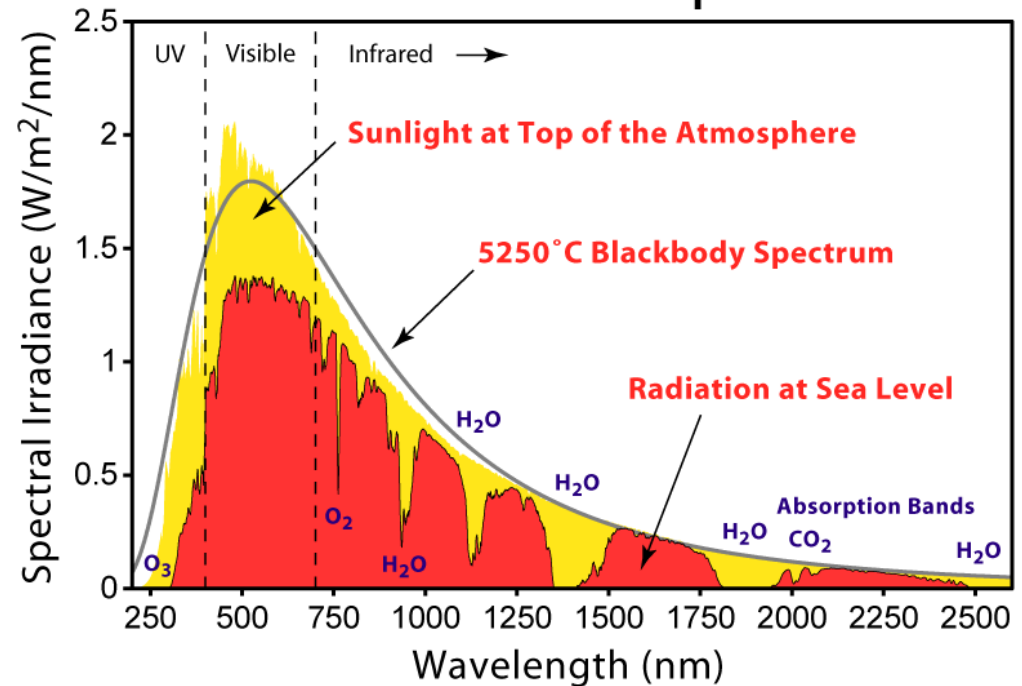
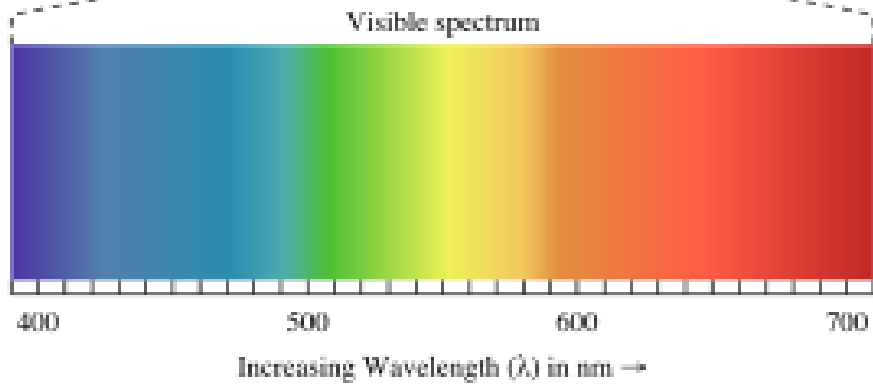
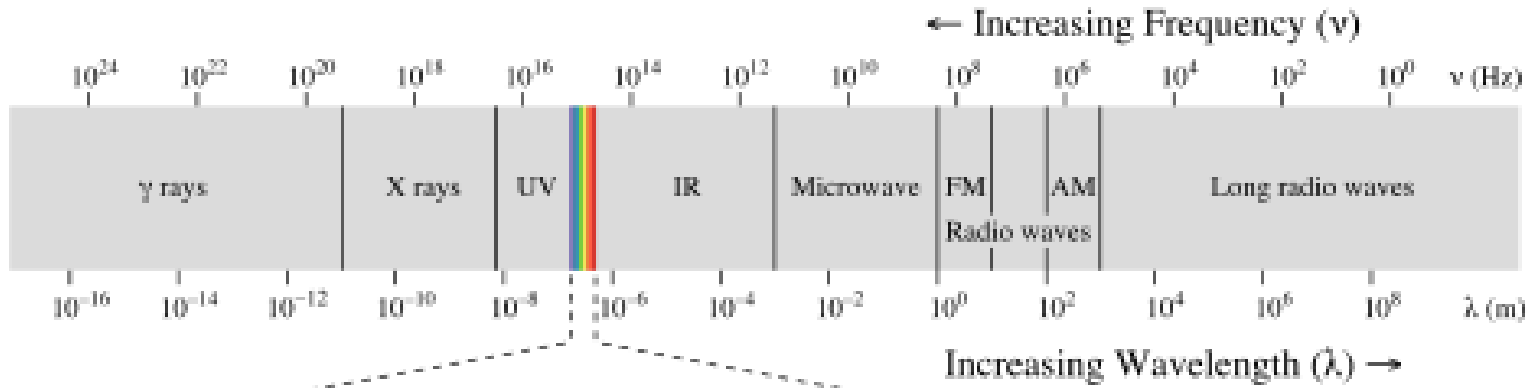
Corpo negro: Espectro de corpo negro, catástrofe do ultravioleta, Leis de Rayleigh e Jeans, Hipótese de Planck

...numa reunião em 14/12/1900, Max Planck apresentou seu artigo “Sobre a teoria da lei de distribuição de energia do espectro normal”. Isso foi o início de uma revolução na física – a física quântica! Assim como a teoria da relatividade, a física quântica representa uma generalização da física clássica (velocidade da luz, constante universal). A relatividade estende as leis físicas para a região de grandes velocidades. A física quântica estende esse campo à regiões de pequenas dimensões (constante de Planck caracteriza a física quântica)...

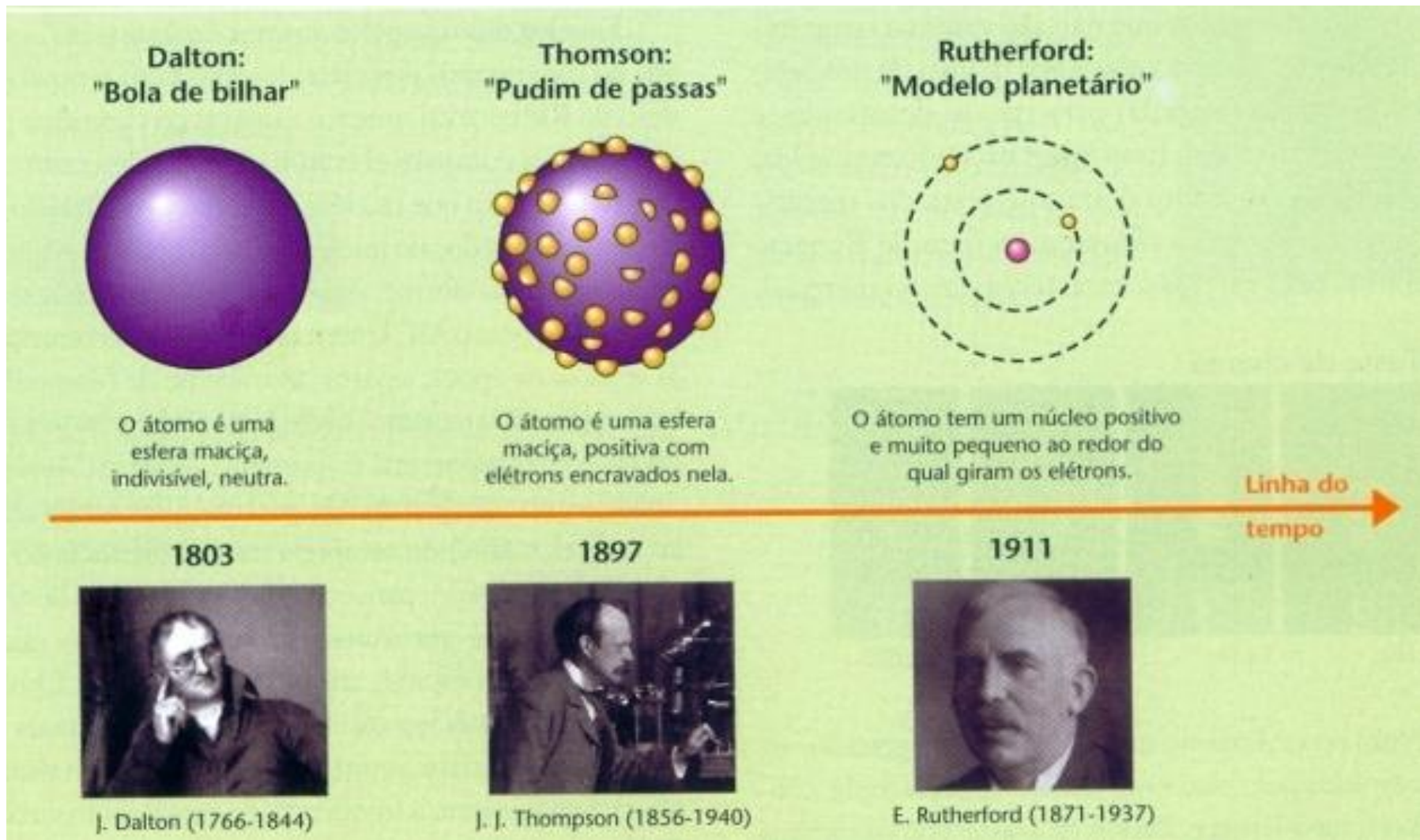
O corpo negro e a história da Física

- Alguns dos principais intervenientes: Joseph Stephan, Ludwig Boltzmann, Wilhelm Wein, Lord Rayleigh, James Jeans, Max Planck
- Fatos que a Física Clássica não podia explicar
 - O espectro do corpo negro
 - Os espectros atômicos de linhas
 - A estabilidade do átomo

Espectro eletromagnético



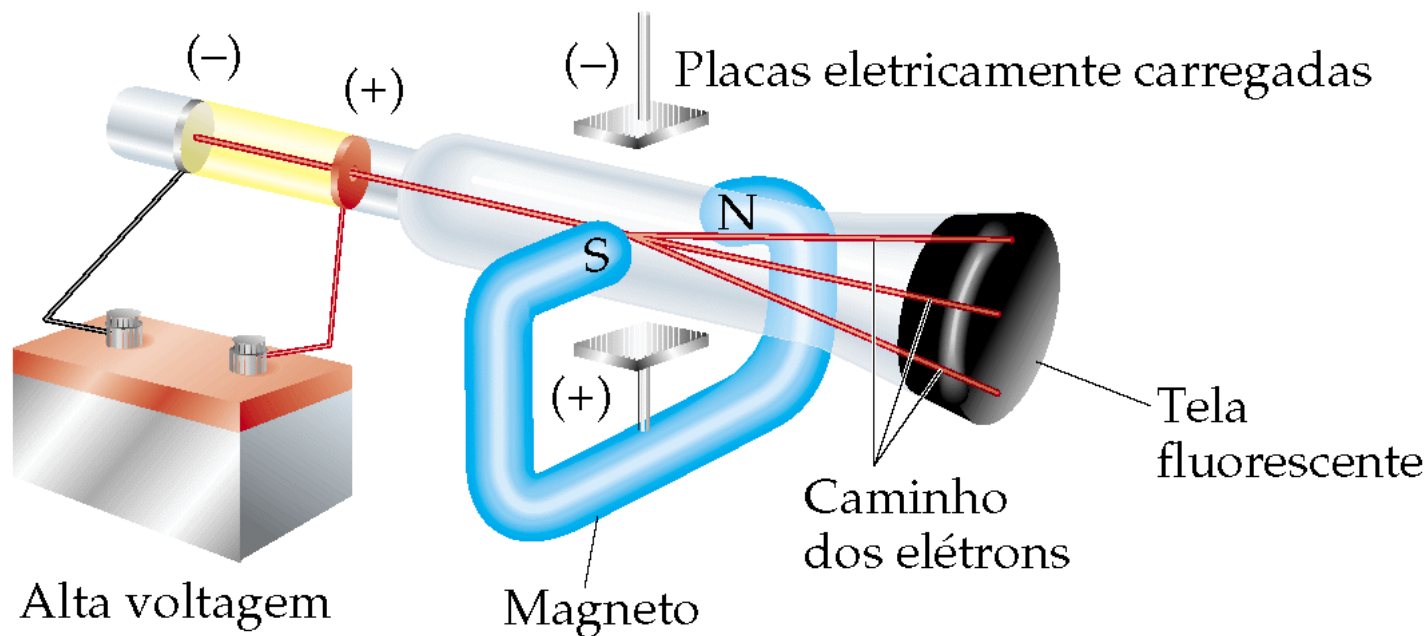
Das “bolas de bilhar” de Dalton ao modelo nucleado de Rutherford



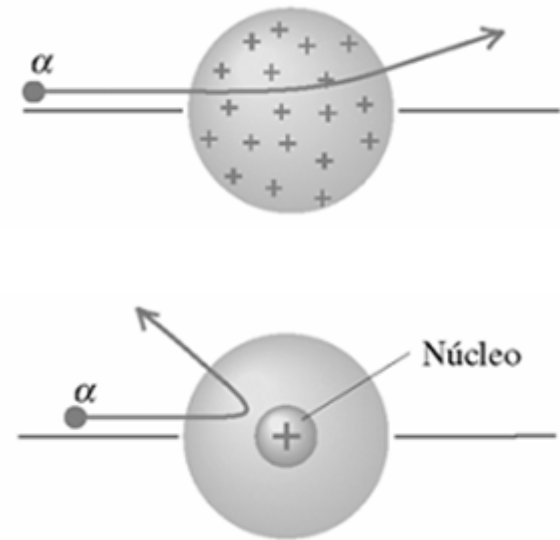
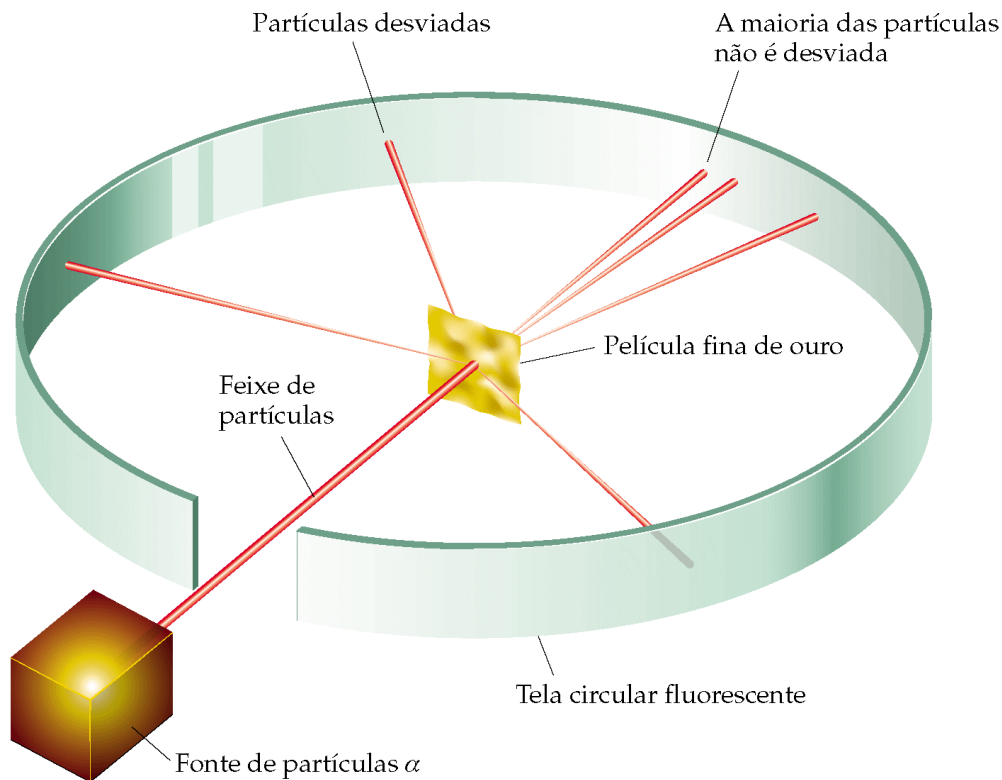
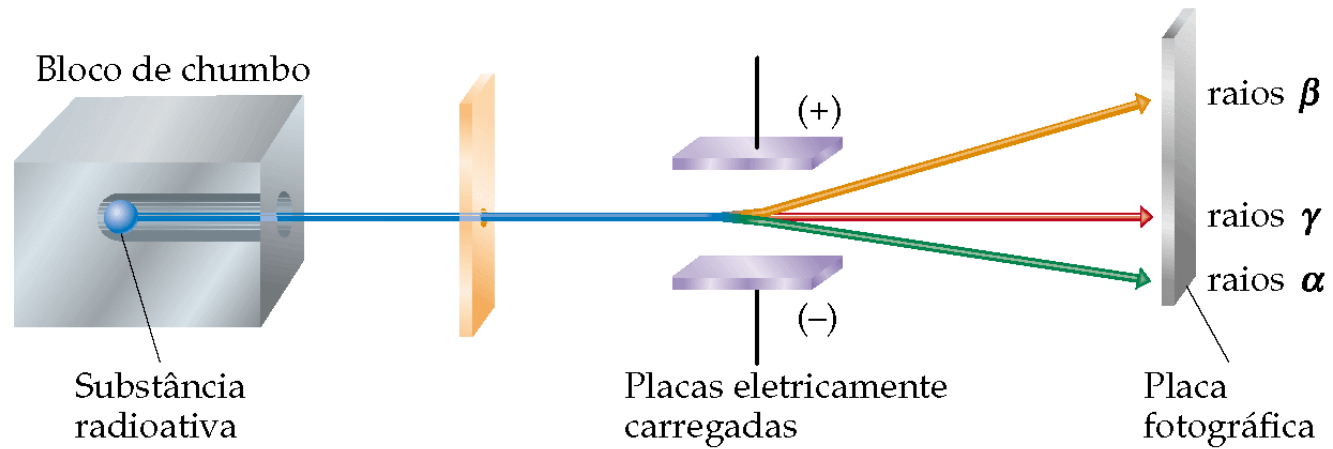
Henri Becquerel (1896) - Descoberta das partículas alfa
Proposição de experimentos – testar o modelo!

Raios catódicos e elétrons (Razão Carga/massa)

- A voltagem faz com que partículas negativas se desloquem do eletrodo negativo para o eletrodo positivo.
- A trajetória dos elétrons pode ser alterada pela presença de um campo magnético.
- Considere os raios catódicos saindo do eletrodo positivo através de um pequeno orifício.
- Se eles interagirem com um campo magnético perpendicular a um campo elétrico aplicado, os raios catódicos podem sofrer diferentes desvios.



Experimento de Rutherford (1911): Espalhamento de partículas α

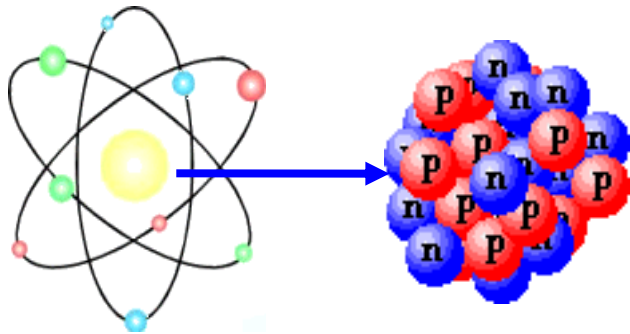


A descoberta do Núcleo

- Espalhamento de partículas alpha
 - Thomson: espera-se ângulos muito pequenos de espalhamento. Em seu modelo as partículas alpha seriam espalhadas por elétrons.
 - Observou-se algumas partículas alpha com espalhamento para trás
 - Nas palavras de Rutherford: *[esse resultado] foi tão incrível como se você disparasse uma bala de canhão de 15 polegadas sobre uma folha de papel e ela voltasse e atingisse você.*

Átomo

Núcleo



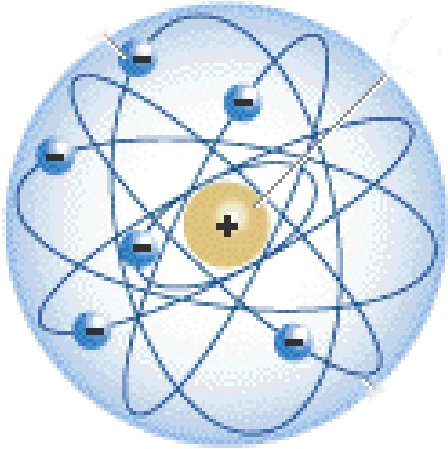
Prótons
Nêutrons

- Um núcleo central com carga Ze .
- O núcleo atômico teria um raio da ordem de 10^4 vezes menor do que o raio atômico.



Modelo Atômico de Rutherford (1911)

Modelo Atômico Planetário



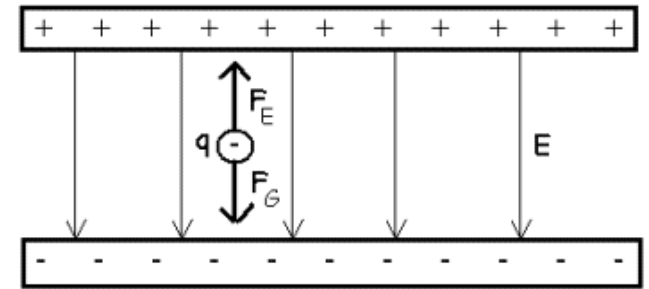
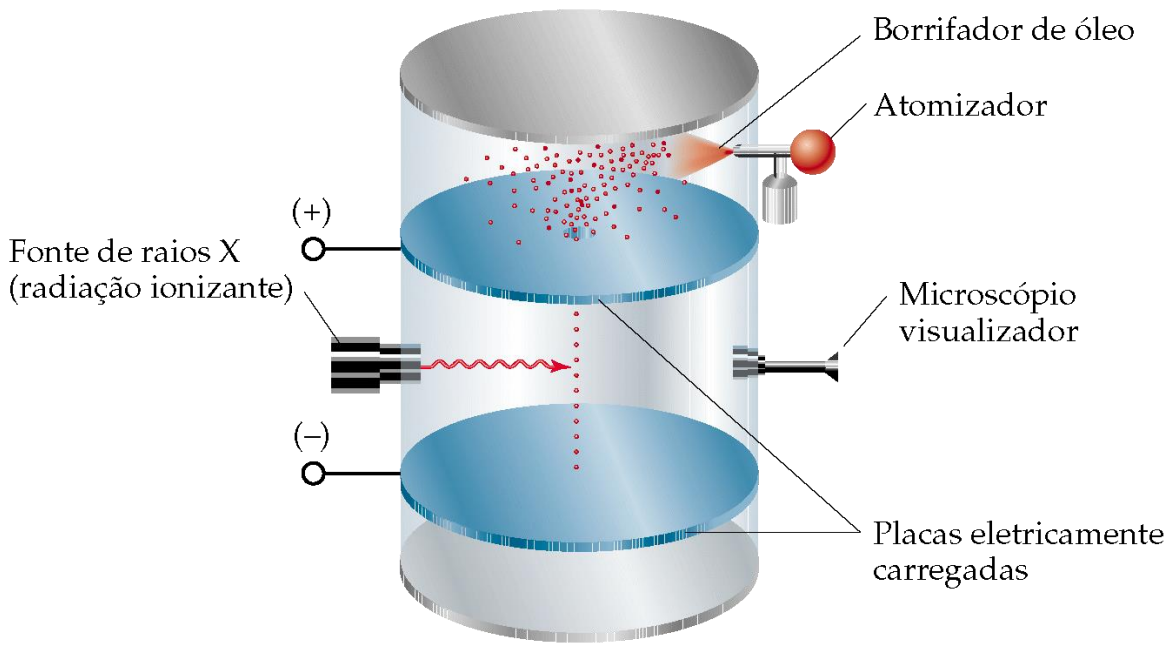
O átomo seria esférico com raio de aproximadamente 10^{-8} cm
O núcleo no centro com raio 10^{-12} cm (10.000 vezes menor)
Os elétrons estariam orbitando o núcleo

- Falhas do modelo de Rutherford



Eletromagnetismo: toda carga acelerada irradia liberando energia!

Experimento de Millikan



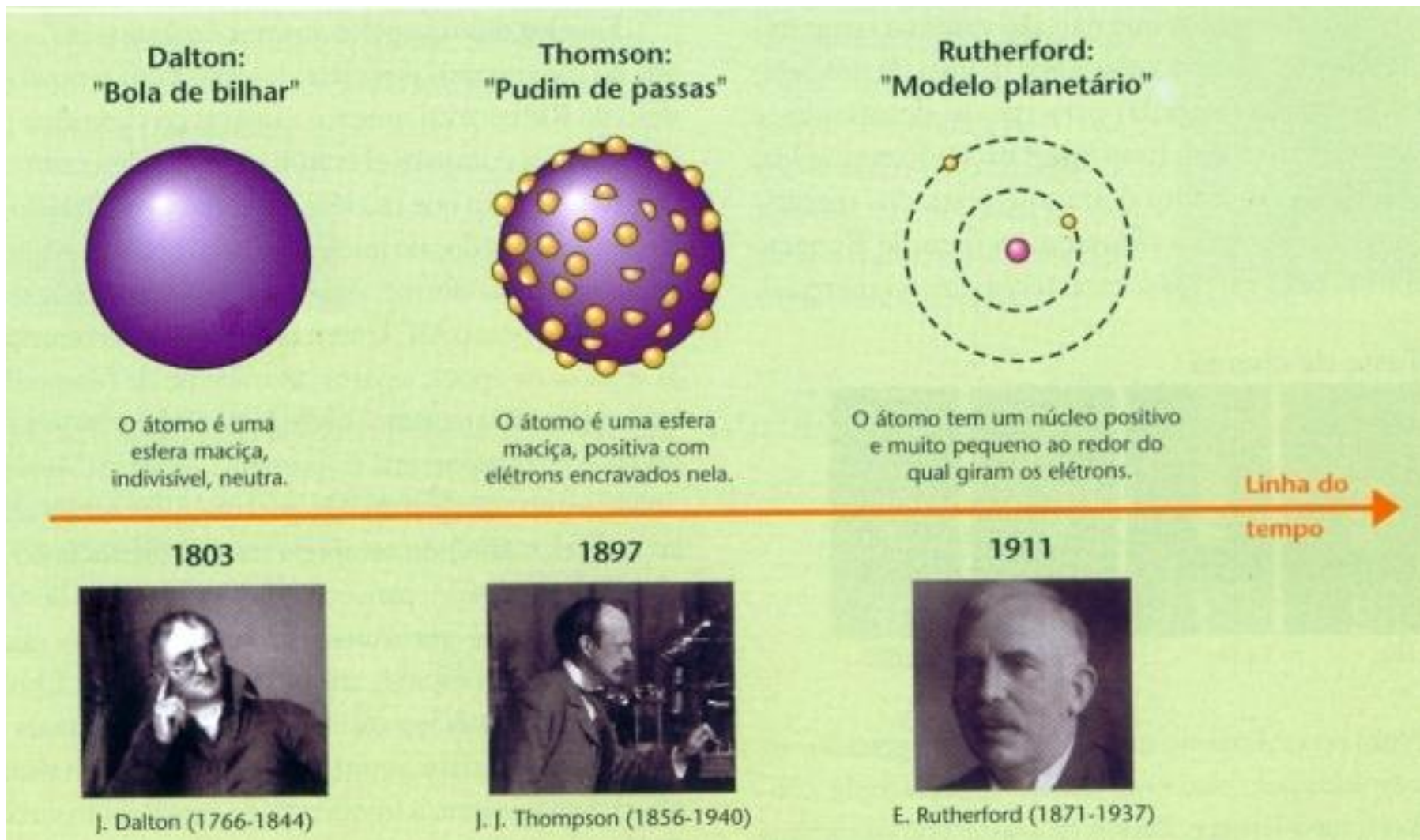
$$\|\vec{F}_e\| = \|\vec{F}_g\| \Leftrightarrow |q| \|\vec{E}\| = m \|\vec{g}\|$$

$$|q| = \frac{m \|\vec{g}\|}{\|\vec{E}\|} \quad |q| = \frac{\rho V \|\vec{g}\|}{\|\vec{E}\|} \Leftrightarrow |q| = \frac{4 \pi r^3 \rho \|\vec{g}\|}{3 \|\vec{E}\|}$$

$$|q| = \frac{4 \pi r^3 \rho \|\vec{g}\| d}{3 |\Delta V|}$$

- Utilizando este experimento, Millikan determinou que a carga no elétron é $1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$.
- Conhecendo a proporção carga-massa, $1,76 \times 10^8 \text{ C/g}$, Millikan calculou a massa do elétron: $9,10 \times 10^{-28} \text{ g}$.
- Com números mais exatos, concluímos que a massa do elétron é $9,10939 \times 10^{-28} \text{ g}$.
- A carga é quantizada.

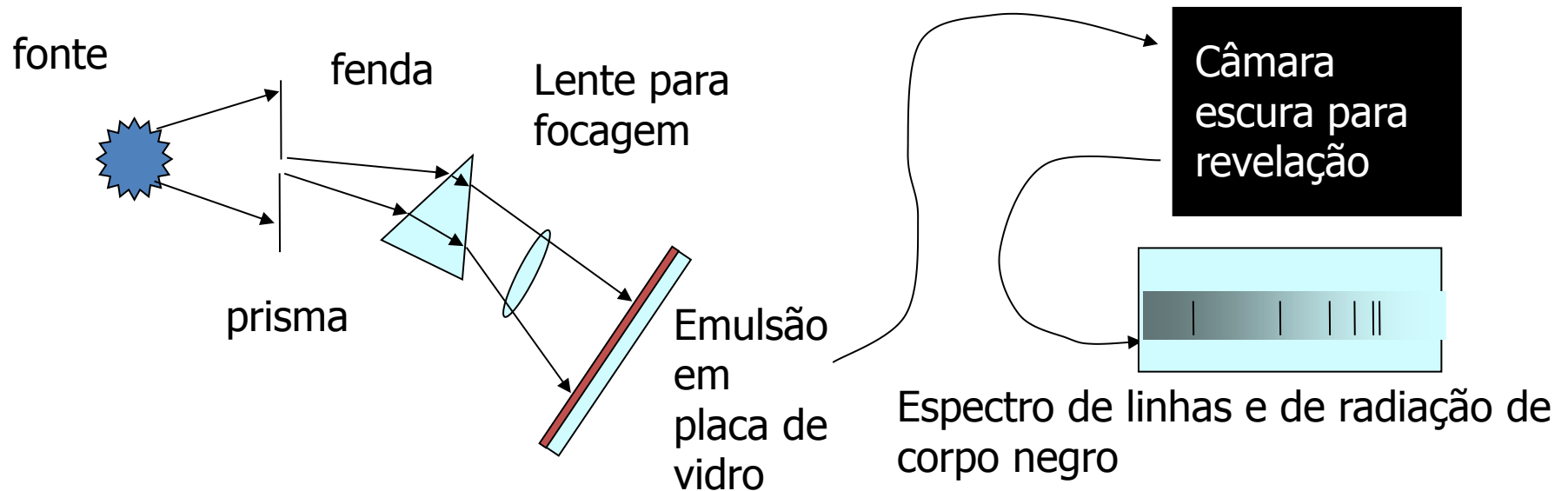
Das “bolas de bilhar” de Dalton ao modelo nucleado de Rutherford



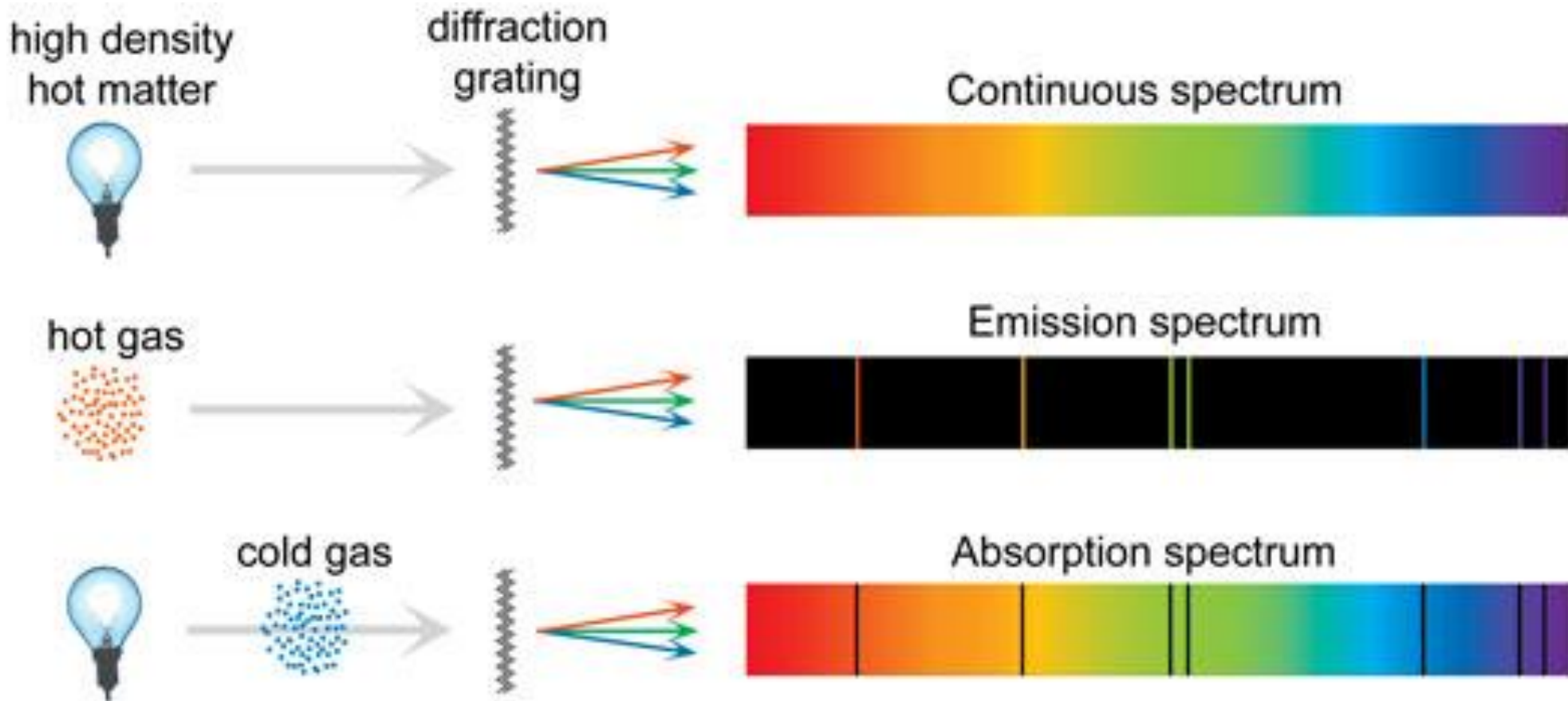
Henri Becquerel (1896) - Descoberta das partículas alfa
Proposição de experimentos – testar o modelo!

Avanços na Espectroscopia

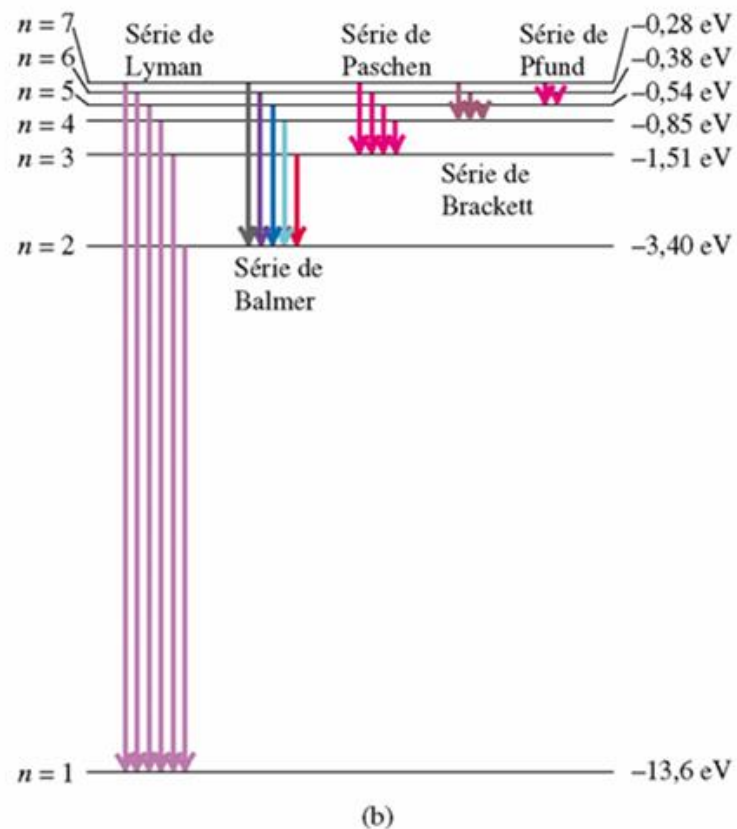
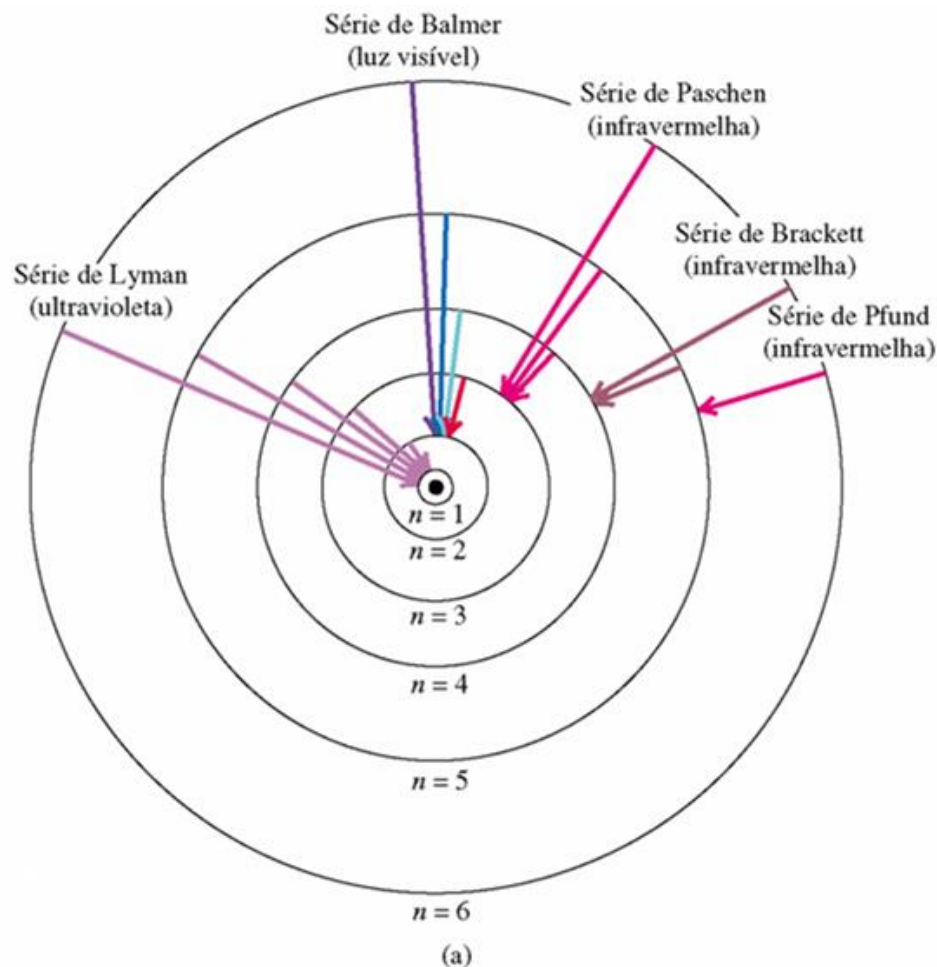
- Estudo da emissão ou absorção de luz pelos vários materiais (gases, líquidos, sólidos)
- No séc. XIX as técnicas foram sendo cada vez mais apuradas; material para dispersão (prismas) e emulsões fotográficas



Espectros de emissão e o espectro de absorção



Experiência de Frank-Hertz: Linhas espectrais, evidências a favor da existência de “subníveis”

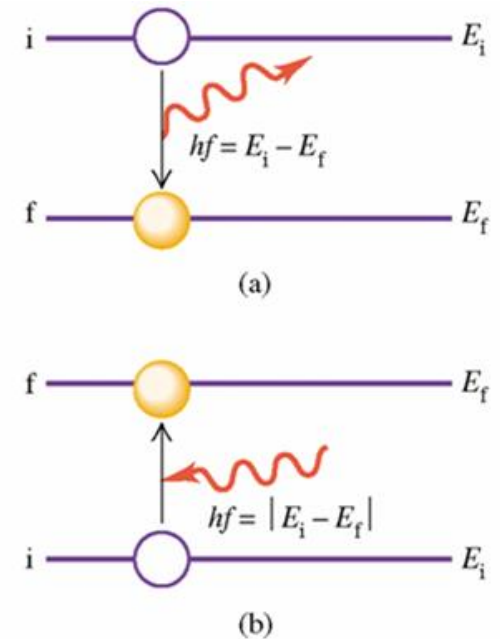
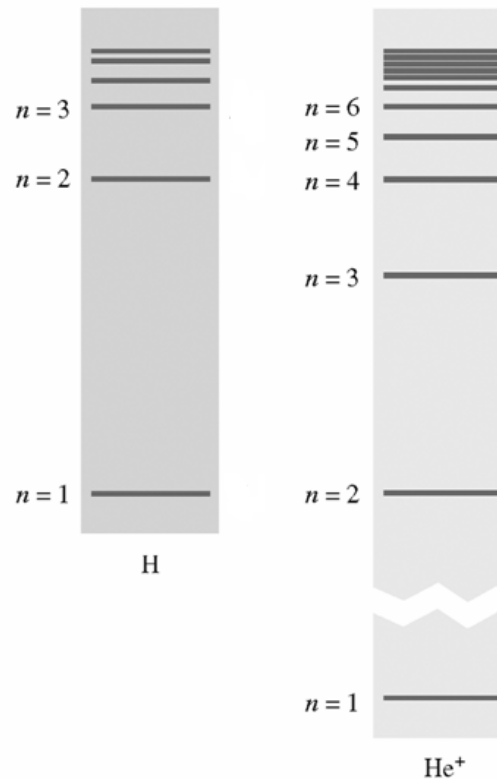
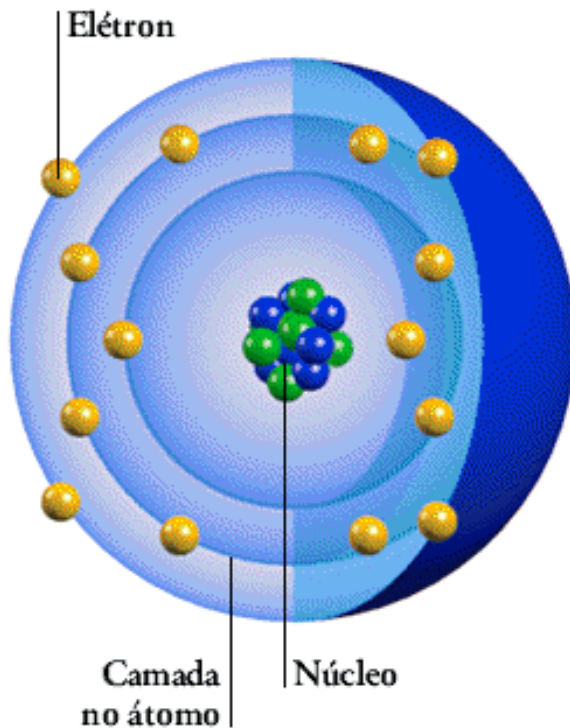


(a) Órbitas “permitidas” para um elétron no modelo de Bohr do átomo de hidrogênio (não em escala). As transições responsáveis por algumas das linhas das diversas séries são indicadas por setas. (b) Diagrama dos níveis de energia, mostrando algumas transições correspondentes a essas diferentes séries.

Modelo Atômico de Bohr

Postulados de Bohr

- A teoria clássica da radiação não vale para sistemas de dimensões atômicas.
- Os elétrons estariam confinados em órbitas estáveis, não radiantes, chamadas estados estacionários.
- Quando um elétron se transfere de um estado estacionário para outro ele emite ou absorve uma quantidade de energia (fóton).



(a) A energia do átomo cai de um nível inicial i até um nível final f emitindo um fóton com energia igual a $E_i - E_f$. (b) A energia do átomo se eleva de um nível inicial i até um nível final f , absorvendo um fóton com energia igual a $E_f - E_i$.

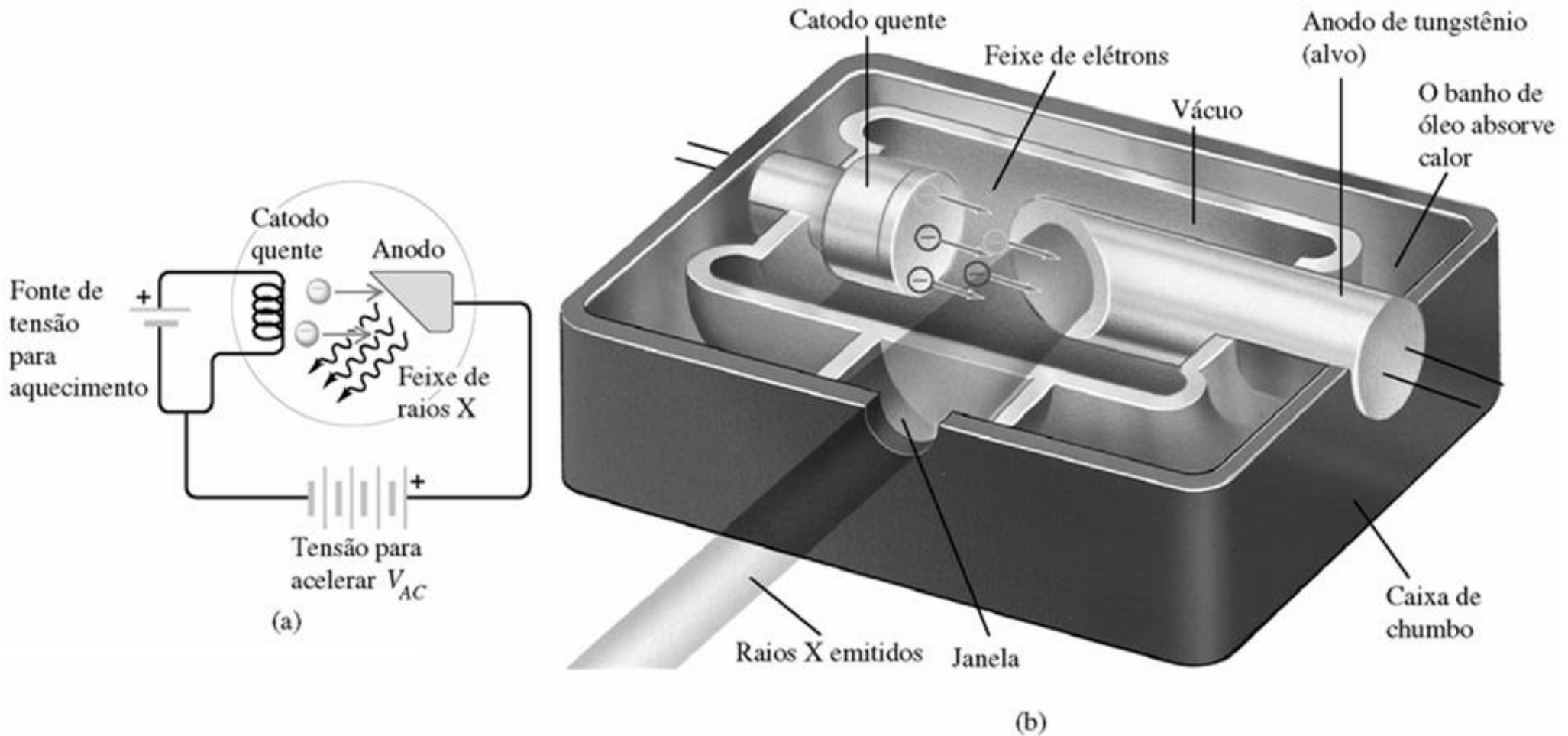
Raios-X

Descoberta dos raios-X



Primeira radiografia tirada por
Röntgen (1895)

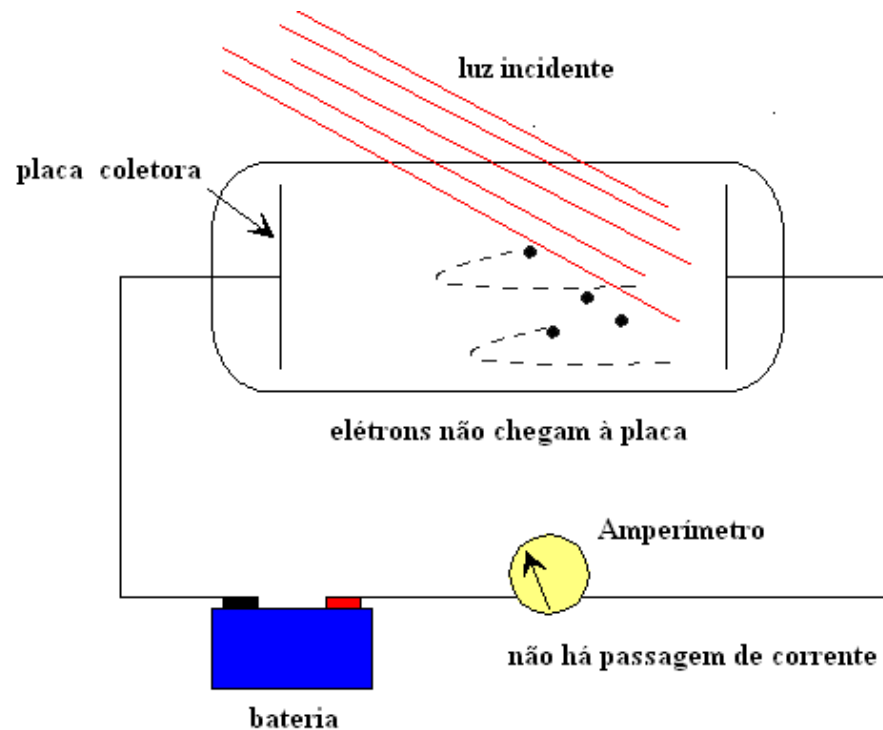
Tubo de Raios-X



(a) Dispositivo para produzir raios X, semelhante ao usado por Röntgen. Elétrons emitidos do catodo quente por emissão termoiônica são acelerados no sentido do anodo; ao colidirem com ele, ocorre a emissão de raios X. (b) Seção reta de um aparelho de raios X. O anodo é resfriado por um líquido para evitar superaquecimento.

Efeito fotoelétrico: observações experimentais

- Os elétrons são emitidos com uma velocidade inicial elevada.



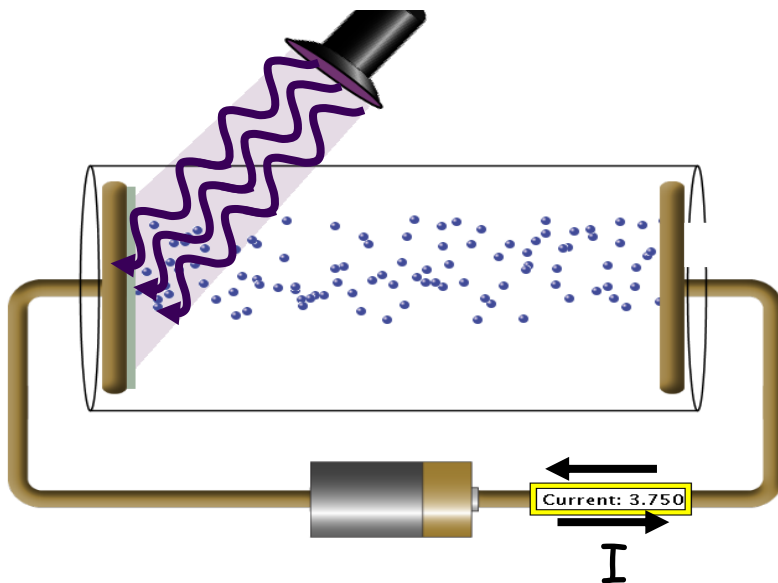
- Isso pode ser confirmado invertendo o potencial aplicado V_{AC} .
- Podemos determinar a energia cinética máxima dos elétrons emitidos ajustando o potencial do anodo em relação ao catodo, de modo que seu valor negativo V_0 seja suficiente para anular a corrente.
- Existe uma ddp (potencial de frenamento = V_0) para a qual nenhum elétron atinge o anodo

Efeito fotoelétrico: explicando as observações experimentais

- Aumentar a intensidade \neq aumentar energia

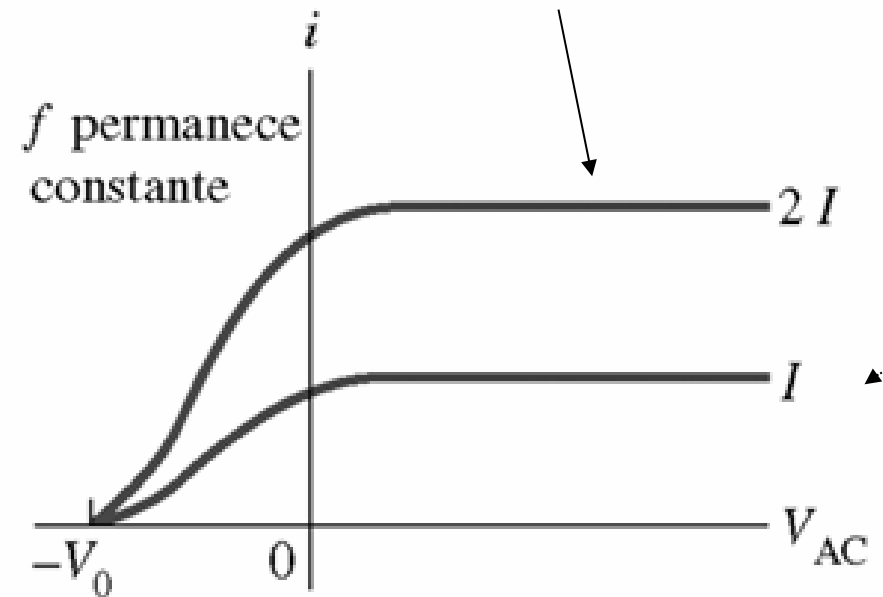
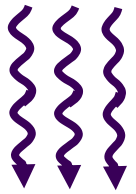
amplitude

freqüência



Intensidade alta

Intensidade baixa



Corrente fotoelétrica i em função do potencial V_{AC} do anodo em relação ao catodo para uma frequência da luz constante. O potencial de frenamento (de corte) independe da intensidade da luz I , contudo a corrente fotoelétrica é diretamente proporcional à intensidade.

**Mesma frequência!!!
Intensidade diferente!!!**

Efeito fotoelétrico: considerações de Einstein (Nobel 1921)

•Equação de Einstein

Potencial de frenamento

$$\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{\max} = eV_0 = h\nu - \phi$$

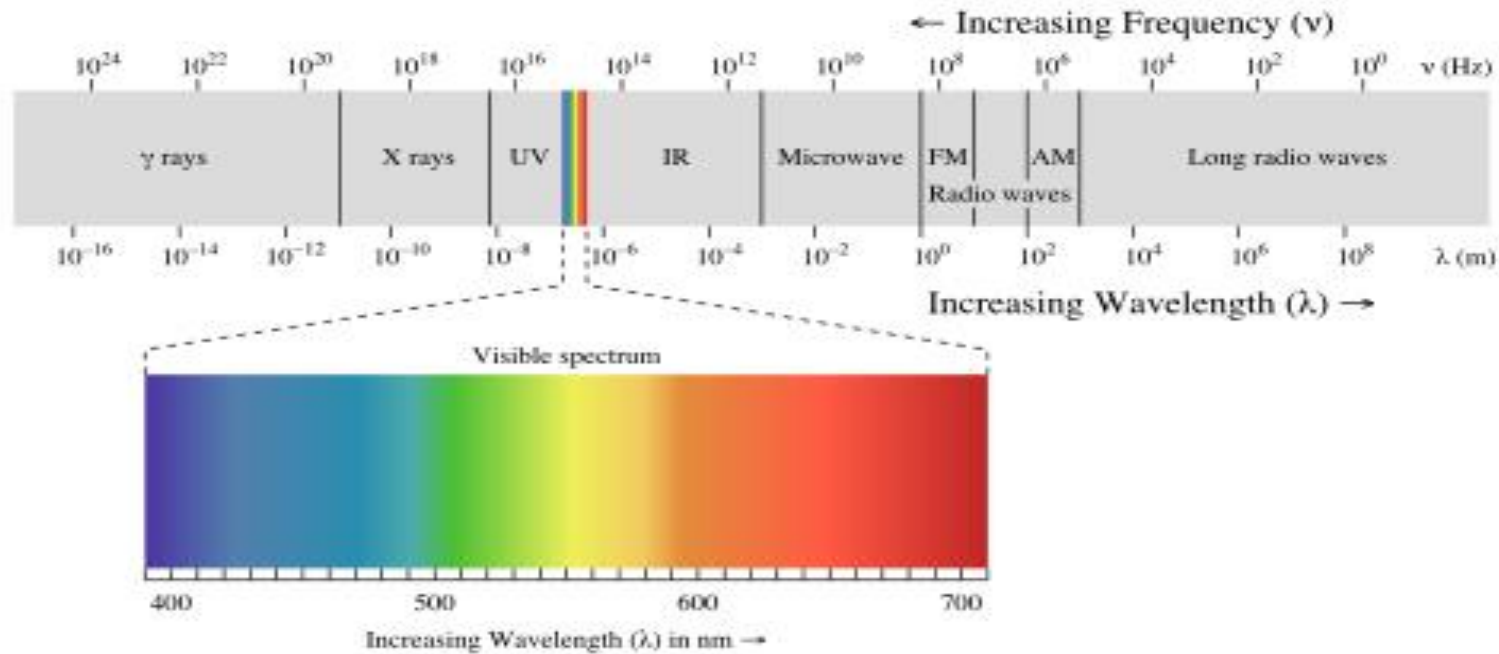
“chute”

Φ = função trabalho (energia necessária para “arrancar” o elétron) característica do material

Energia cinética do elétron

The diagram illustrates the Einstein photoelectric equation: $\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{\max} = eV_0 = h\nu - \phi$. Arrows point from descriptive text to each term: 'Energia cinética do elétron' points to the left term, 'Potencial de frenamento' points to eV_0 , '“chute”' points to $h\nu$, and ' Φ = função trabalho...' points to ϕ .

Natureza da Luz



- Onda eletromagnética
- Dualidade onda-partícula

$$E = h\nu \quad p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

O Comportamento ondulatório da matéria

O princípio da incerteza

- **O princípio da incerteza de Heisenberg:** na escala de massa de partículas atômicas, não podemos determinar *exatamente* a posição, a direção do movimento e a velocidade simultaneamente.
- Para os elétrons: não podemos determinar seu momento e sua posição simultaneamente.
- Se Δx é a incerteza da posição e Δmv é a incerteza do momento, então:

$$\Delta x \cdot \Delta mv \geq \frac{h}{4\pi}$$

Mecânica quântica

Estudo do comportamento e das leis do movimento para partículas microscópicas

ANTECEDENTES:

- Teoria da quantização da energia (M.Planck): $E = h \cdot \nu$
- Dualidade onda-partícula (L.de Broglie): $\lambda = h / p$
- Princípio de incerteza (Heisenberg): $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4 \cdot \pi}$

Estabelece um limite na precisão com que a posição e o momento de uma partícula podem ser determinados simultaneamente.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

- **Schrödinger** propôs uma equação que contém os termos onda e partícula.
- A resolução da equação leva às funções de onda.
- A função de onda fornece o contorno do orbital eletrônico (da casa do elétron).
- O quadrado da função de onda fornece a probabilidade de se encontrar o elétron, isto é, dá a densidade eletrônica para o átomo.

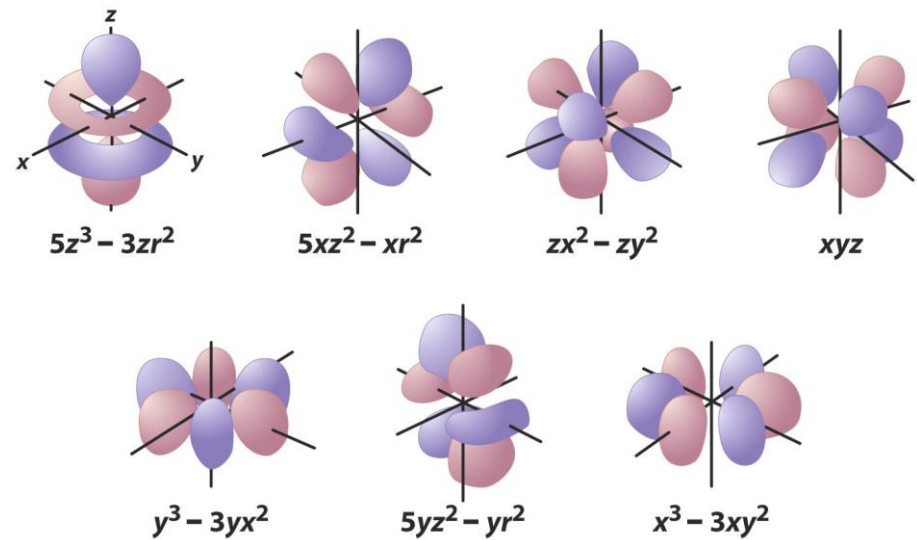
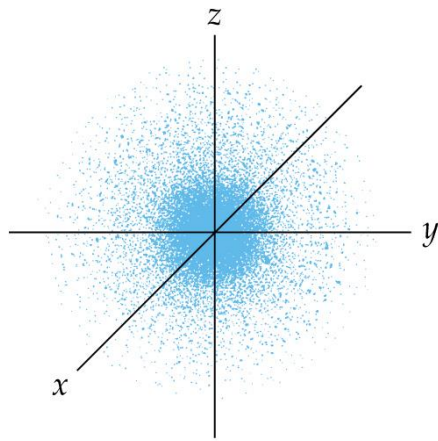
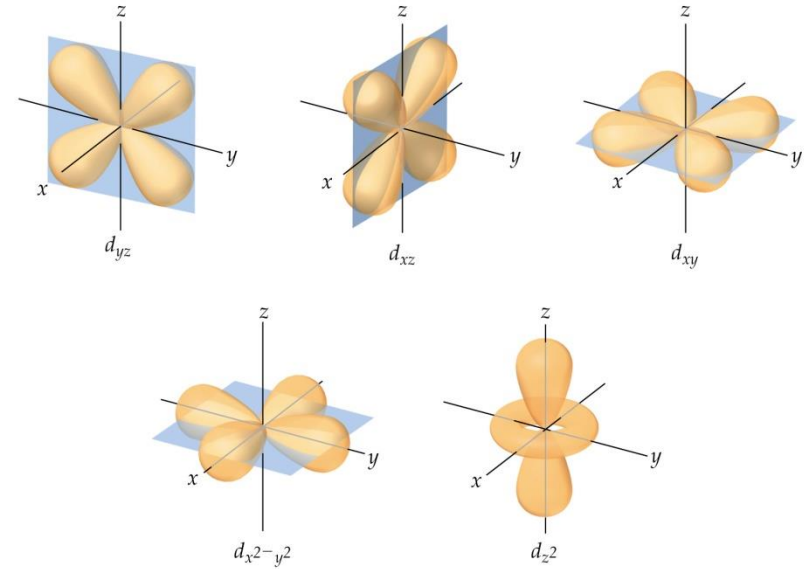
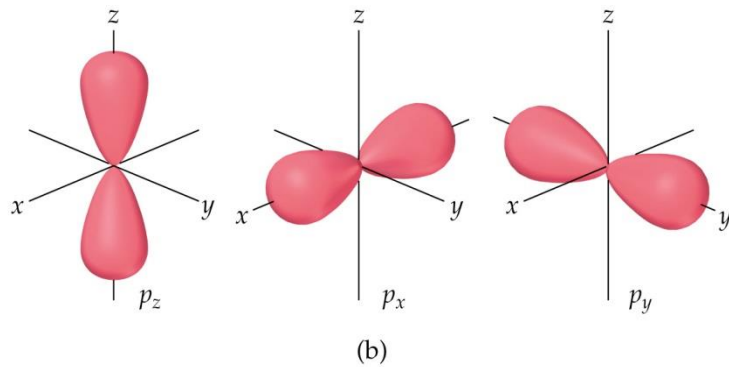
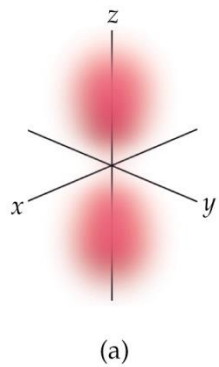
Postulados da mecânica quântica

- A energia do átomo está quantizada. Só alguns estados energéticos são permitidos (números quânticos).
- Mudança entre estados: $\Delta E = h \cdot \nu$
- Aproximação estatística à posição do e⁻: **ORBITAL**
- Descrição de estado e movimento do e⁻ mediante uma **função de onda**: $\Psi_{n,l,m} = \Psi(x,y,z)$

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (E - V) \cdot \psi = 0$$

Mecânica quântica e orbitais atômicos



Mecânica quântica e orbitais atômicos

Orbitais e números quânticos

- Se resolvermos a equação de Schrödinger, teremos as funções de onda e as energias para as funções de onda.
- Chamamos as funções de onda de *orbitais*.
- A equação de Schrödinger necessita de três números quânticos:
 1. **Número quântico principal, n .** Este é o mesmo n de Bohr. À medida que n aumenta, o orbital torna-se maior e o elétron passa mais tempo mais distante do núcleo.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

Orbitais e números quânticos

- 2. O número quântico azimuthal, l .** Esse número quântico depende do valor de n . Os valores de l começam de 0 e aumentam até $n - 1$. Normalmente utilizamos letras para l (s , p , d e f para $l = 0, 1, 2$, e 3). Geralmente nos referimos aos orbitais s , p , d e f . Fornecem a forma do orbital no espaço
- 3. O número quântico magnético, m_l .** Esse número quântico depende de l . O número quântico magnético tem valores inteiros entre $-l$ e $+l$. Fornecem a orientação do orbital no espaço.

Mecânica quântica e orbitais atômicos

Orbitais e números quânticos

TABELA 6.2 Relação entre os valores de n , l e m_l até $n = 4$

n	Valores possíveis de l	Designação do subnível	Valores possíveis de m_l	Número de orbitais no subnível	Número total de orbitais no nível
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	

Átomos polieletrônicos

Spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli

- Já que o spin eletrônico é quantizado, definimos m_s = número quântico de rotação = $\pm \frac{1}{2}$.
- **O princípio da exclusão de Pauli:** dois elétrons não podem ter a mesma série de 4 números quânticos. Portanto, dois elétrons no mesmo orbital devem ter spins opostos.
- Na presença de um campo magnético, podemos elevar a degeneração dos elétrons.

TABLE 1.3 Quantum Numbers for Electrons in Atoms

Name	Symbol	Values	Specifies	Indicates
principal	n	$1, 2, \dots$	shell	size
orbital angular momentum*	l	$0, 1, \dots, n - 1$	subshell: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ s, p, d, f, g, \dots	shape
magnetic	m_l	$l, l - 1, \dots, -l$	orbitals of subshell	orientation
spin magnetic	m_s	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	spin state	spin direction

*Also called the *azimuthal quantum number*.

Estrutura da Matéria

