

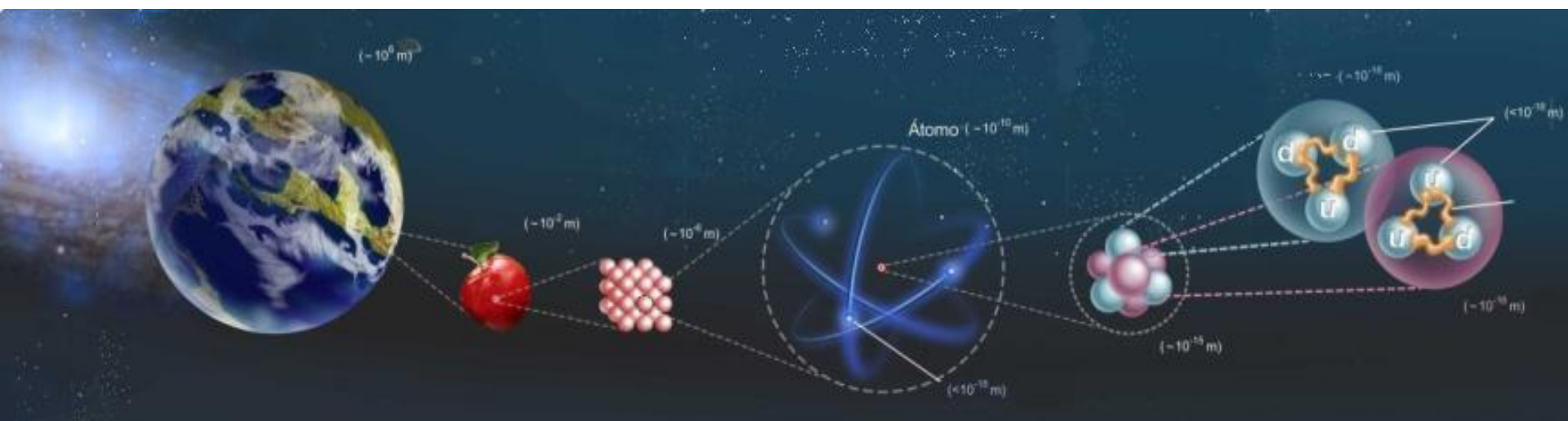


Universidade Federal do ABC

## NMA101 - Ciência dos Materiais

<https://meet.google.com/lookup/b75dcqejz2>

Wendel Andrade Alves



Crédito: Sprace

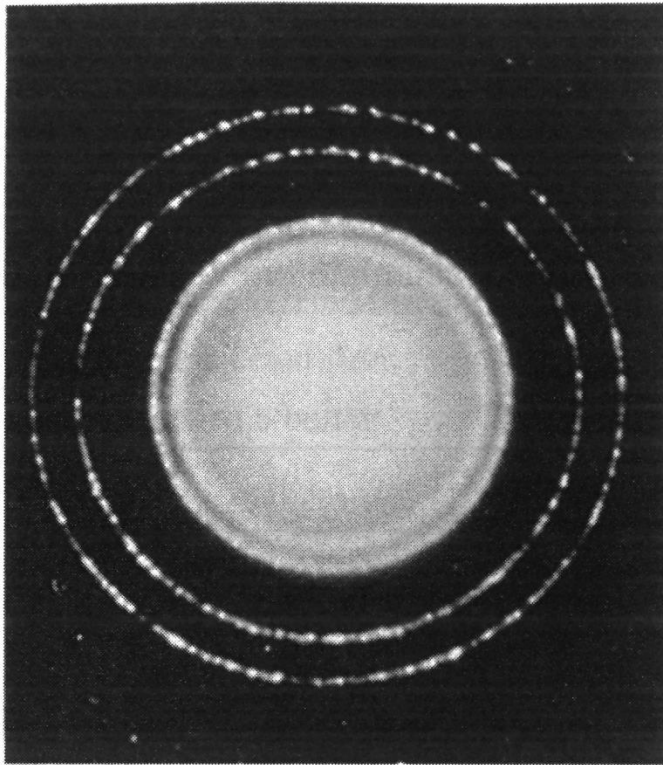
E-mail: [wendel.alves@ufabc.edu.br](mailto:wendel.alves@ufabc.edu.br)

**Horários:** terças-feiras 16-18h  
quintas-feiras 15-17h

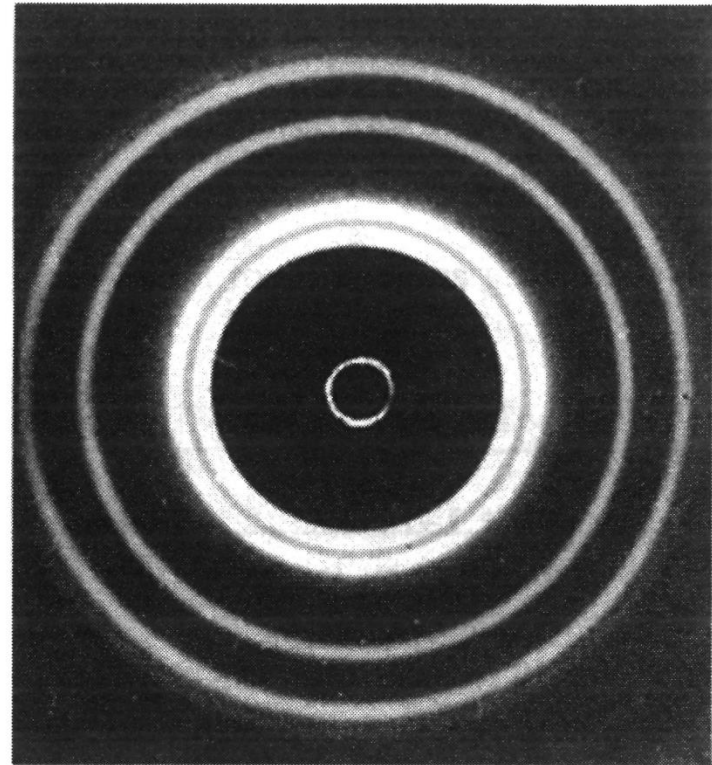
# Comportamento Ondulatório da Matéria: Comprovação Experimental

---

Experimentos de difração usando folhas de alumínio:



raios-X



elétrons

# Mecânica Quântica

---



Estudo do comportamento e das leis do movimento para partículas microscópicas.

## ANTECEDENTES:

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

# Modelo Mecânico-Quântico do Átomo

---

- Bohr contribuiu significativamente para nossa compreensão dos átomos, e sua proposta de que energia de um elétron em um átomo é quantizada permanece válida. Entretanto, não fornece uma descrição completa do comportamento eletrônico nos átomos.
- Devido ao Princípio da Incerteza, não é apropriado imaginar o elétron movendo-se ao redor do núcleo numa órbita bem definida, do modo como propunha o modelo de Bohr.
- O trabalho de Schrödinger forneceu uma descrição mais apropriada do átomo em termos da mecânica quântica. É o modelo atômico atualmente aceito e que veremos a seguir!

# Equação de Schrödinger

---

Schrödinger propõe uma equação que incorpora tanto o comportamento **ondulatório** como o **corpuscular** para o elétron. A equação de Schrödinger é a base da Mecânica Quântica assim como as equações de Newton são a base da Mecânica Clássica.

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$\psi(x,y,z)$ : **função de onda**: representa a onda associada ao elétron e descreve o estado do elétron.

$E$ : energia total do elétron.

$\hat{H}$ : **operador Hamiltoniano**.

# Operador Hamiltoniano

---

Leva em consideração a energia cinética e a energia potencial do elétron:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

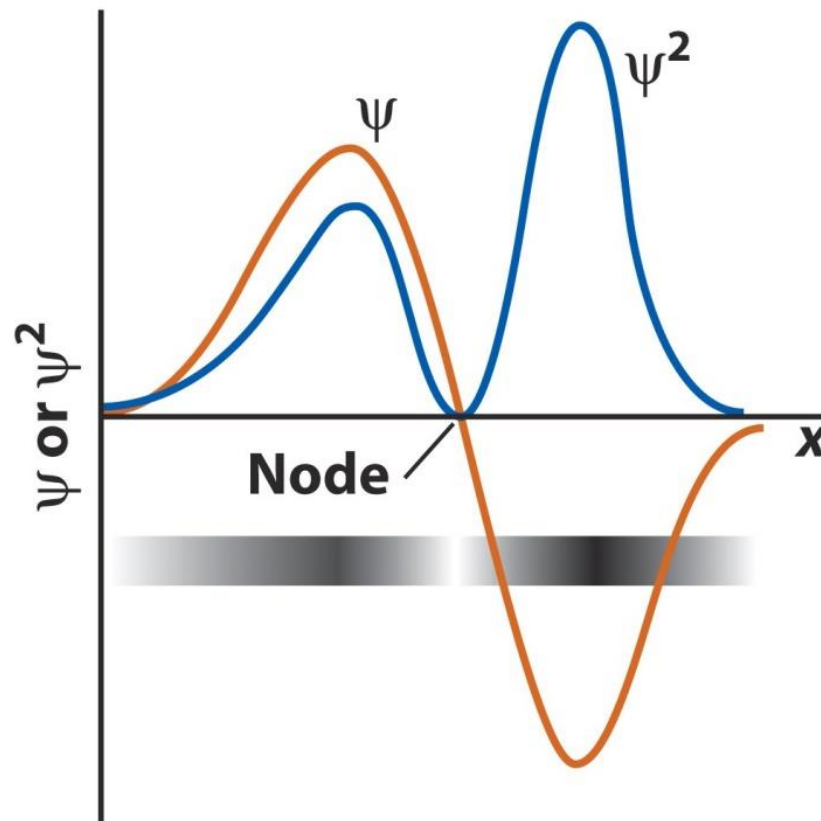
A equação de Schrödinger é uma equação de conservação de energia. Ela leva em consideração o comportamento corpuscular, em termos de massa ( $\mu$ ) e o comportamento ondulatório, em termo da função de onda ( $\psi$ ).

# Significado Físico da Função de Onda

---

$\psi$   $\longrightarrow$  não tem significado físico

$\psi^2$   $\longrightarrow$  densidade de probabilidade de encontrar um elétron em função da posição  $x$



A seguir, mostraremos qualitativamente algumas previsões da Mecânica Quântica para alguns casos simples envolvendo partículas como o elétron. As mesmas idéias serão ampliadas para o átomo de hidrogênio.

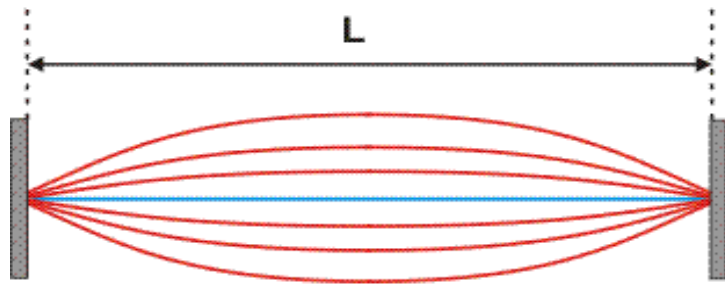


# Ondas Estacionárias

---

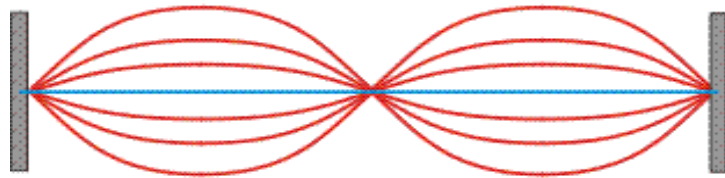
- Uma onda estacionária é aquela em que a crista, ou a posição de maior amplitude não se move. Da mesma forma, pontos em que a amplitude é nula, conhecidos como nós, não se move.
- Um exemplo de onde isso ocorre é numa corda de violão. A corda está presa nas extremidades e, ao ser tocada, vibra de acordo com um modo de vibração. Se não houvesse atrito com o ar, ela vibraria indefinidamente. Como há esse contato com o ar, ouvimos um som de frequência igual à da vibração.

# Modos de Vibração numa Onda Unidimensional



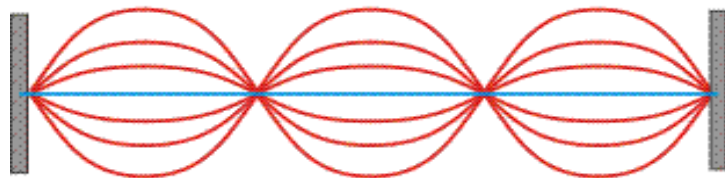
$$L = \frac{\lambda}{2}$$

primeiro harmônico



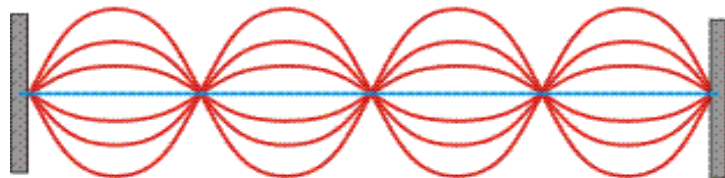
$$L = 2 \cdot \frac{\lambda}{2}$$

segundo harmônico



$$L = 3 \cdot \frac{\lambda}{2}$$

terceiro harmônico



$$L = 4 \cdot \frac{\lambda}{2}$$

quarto harmônico

$$L = n \frac{\lambda}{2} \quad \text{para } n = 1, 2, 3 \dots$$

# Modos de Vibração numa Onda Unidimensional

---

O comprimento de onda de uma onda estacionária numa corda depende do comprimento da corda e do número de ventres. A onda estacionária pode ter apenas alguns valores específicos de  $\lambda$ , que são dados por:

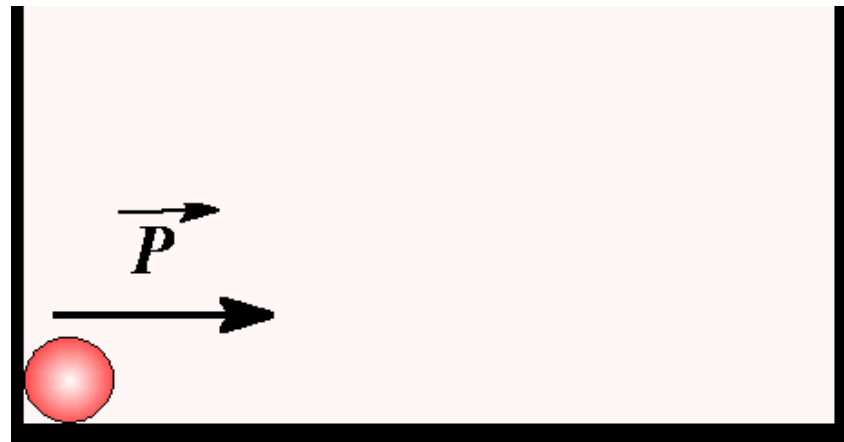
$$L = \frac{n\lambda}{2}$$

$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

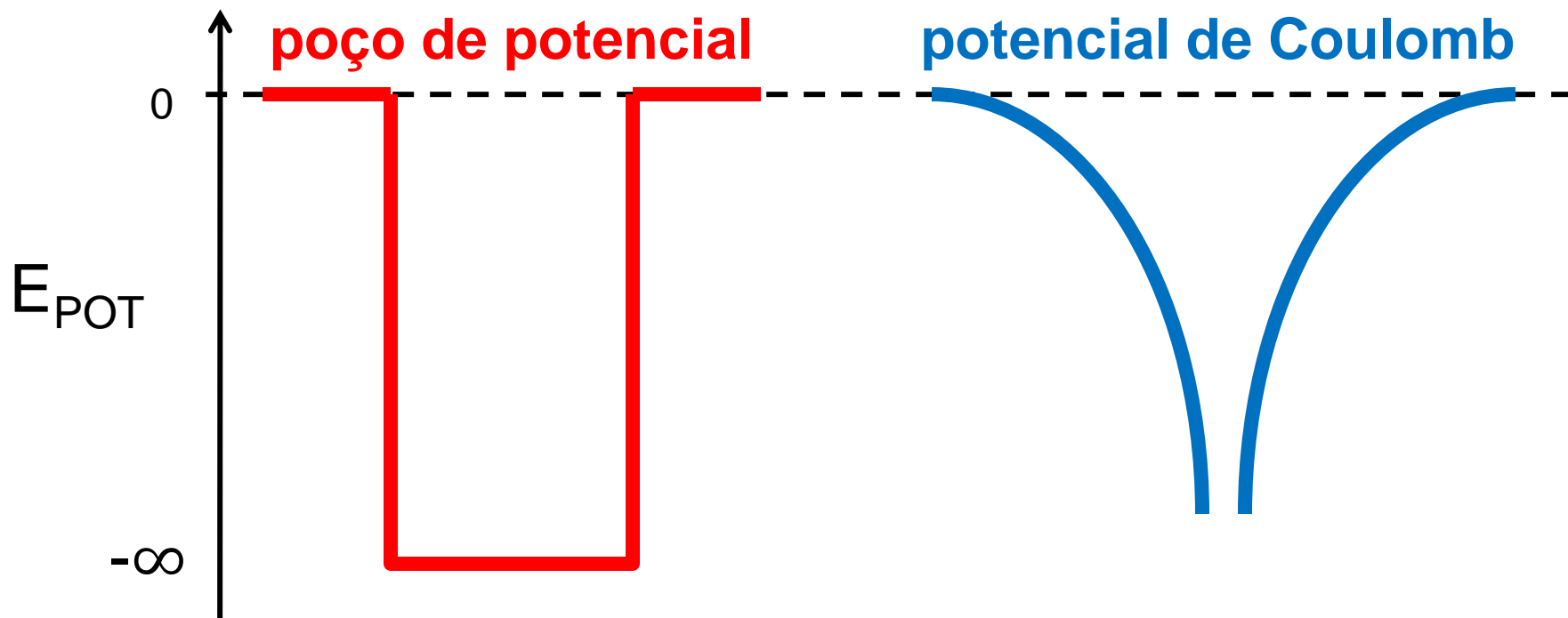
# Problema da Partícula na Caixa

---

- Vamos supor que um elétron esteja confinado em uma caixa.
- De acordo com a mecânica clássica, o elétron poderia ter qualquer valor de energia (no caso, energia cinética).
- Tratando o elétron como uma partícula-onda, veremos que surge um resultado bem diferente...



# Por que estudar o problema do “elétron numa caixa”???



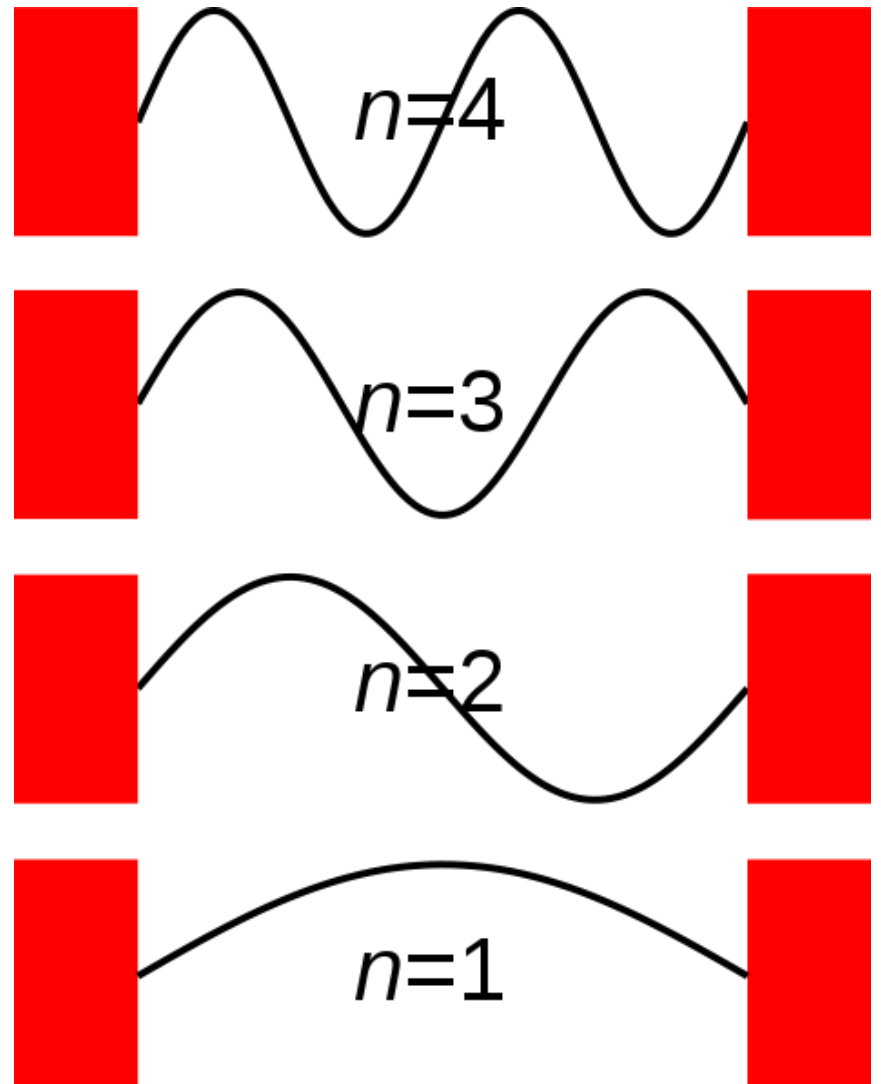
A caixa significa que o movimento do elétron está restrito a uma porção do espaço que chamamos de **poço de potencial**. No átomo de hidrogênio, o potencial que “restringe” o movimento do elétron e impede-o de escapar é o **potencial coulombico**. O problema do hidrogênio é bem mais complexo que o do elétron na caixa, mas os dois problemas têm algumas similaridades.

# Elétron Confinado numa Caixa (Poço de Potencial)

---

Tratando o elétron como onda, temos o mesmo problema da corda de violão. Devido à impossibilidade da partícula estar fora do poço, afirmamos que a função de onda é nula no exterior. No interior do poço, formam-se ondas estacionárias.

$$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$



# Elétron Confinado numa Caixa (Poço de Potencial)

---

$$\lambda = \frac{h}{mv} \Rightarrow v = \frac{h}{m\lambda} = \frac{hn}{2Lm}$$

como

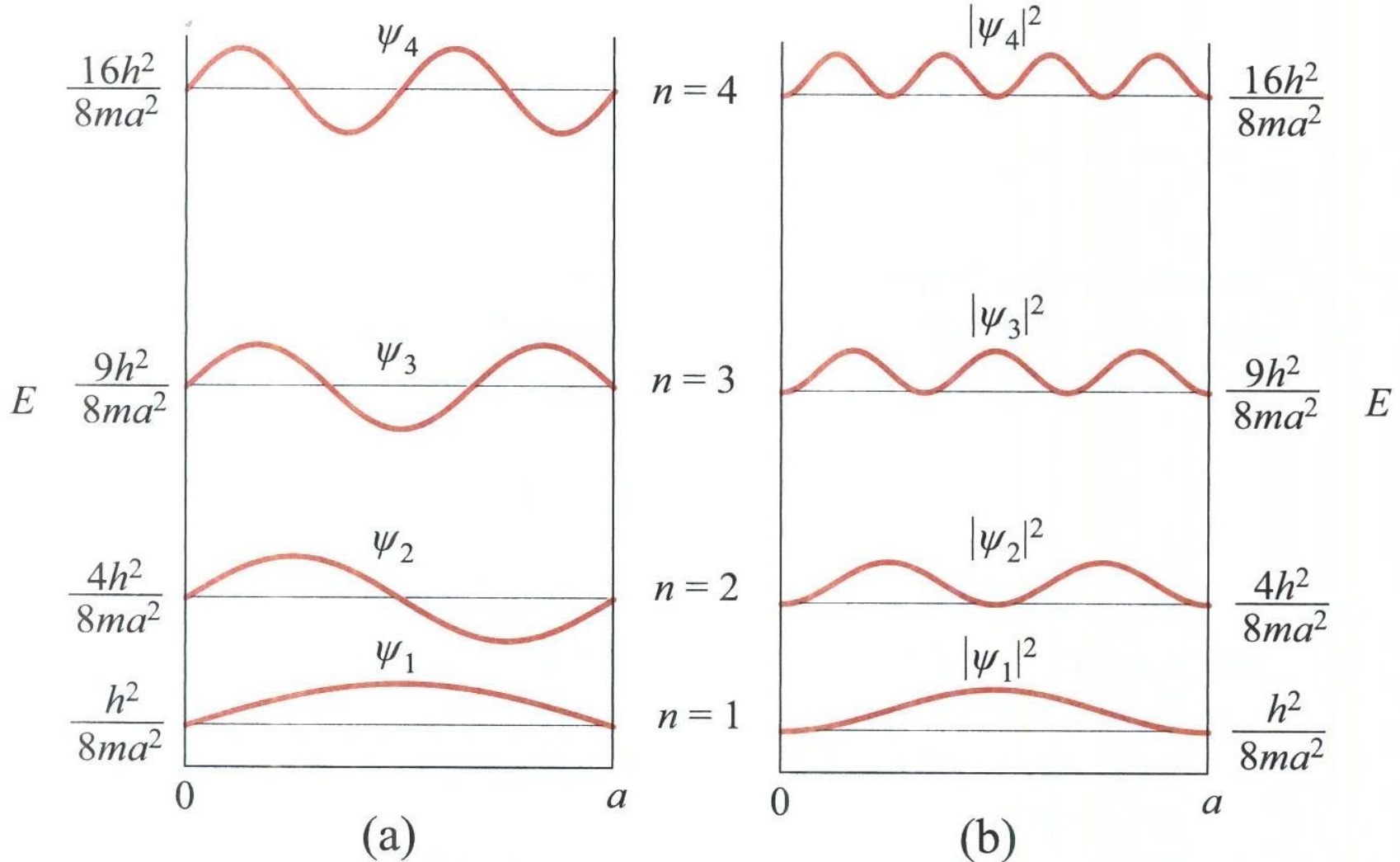
$$E = \frac{mv^2}{2}$$

então

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$$

e a energia dos modos é quantizada

# Elétron Confinado numa Caixa (Poço de Potencial)

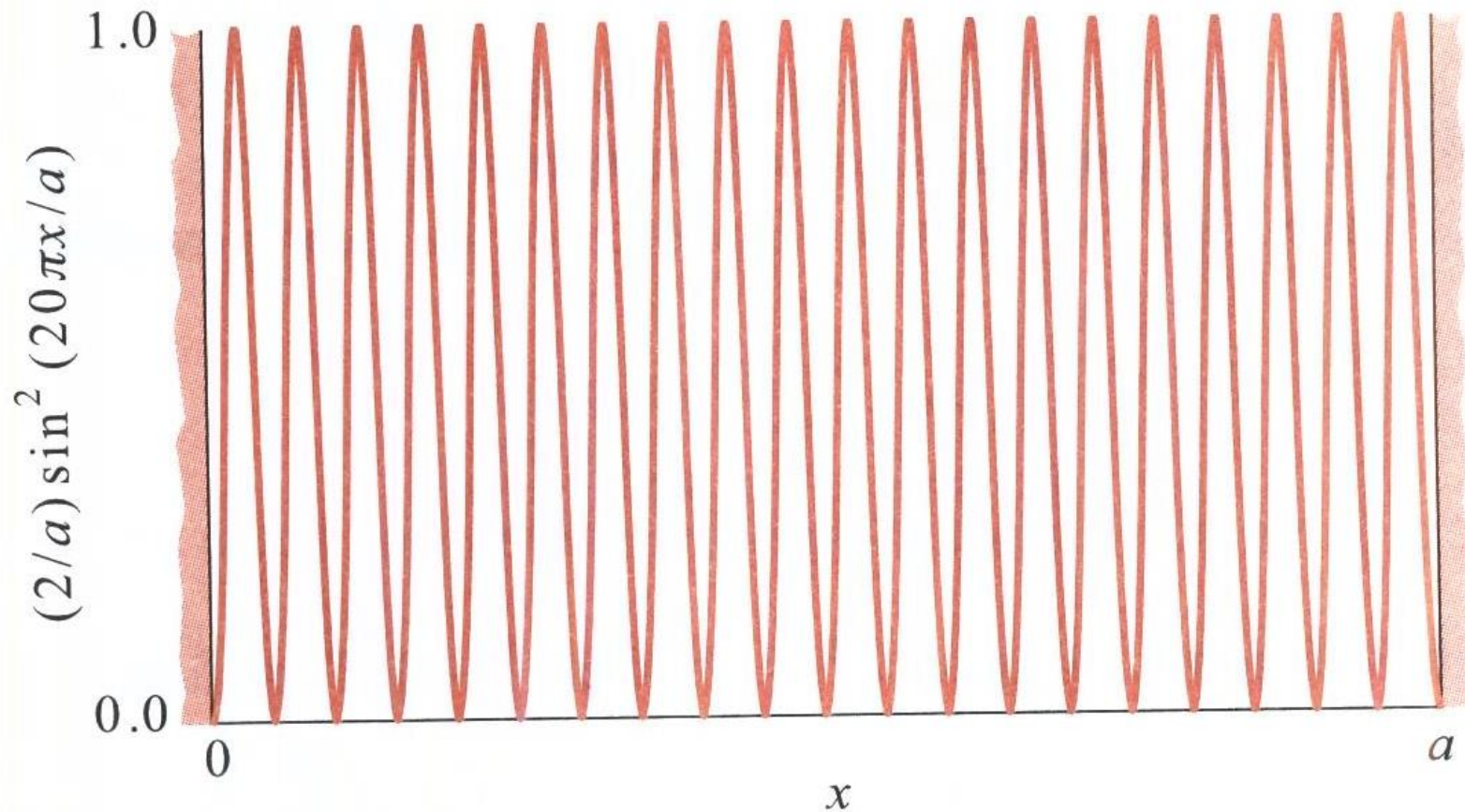


Energia do fóton emitido por uma transição eletrônica:

$$\Delta E = E_{nf} - E_{ni} = h\nu$$



# Elétron Confinado numa Caixa (Poço de Potencial)



# Elétron Confinado numa Caixa (Poço de Potencial)

---

No confinamento unidimensional, a energia possível do estado estacionário depende do **número quântico**  $n$ :

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$$

# Elétron Numa Caixa Bidimensional

---

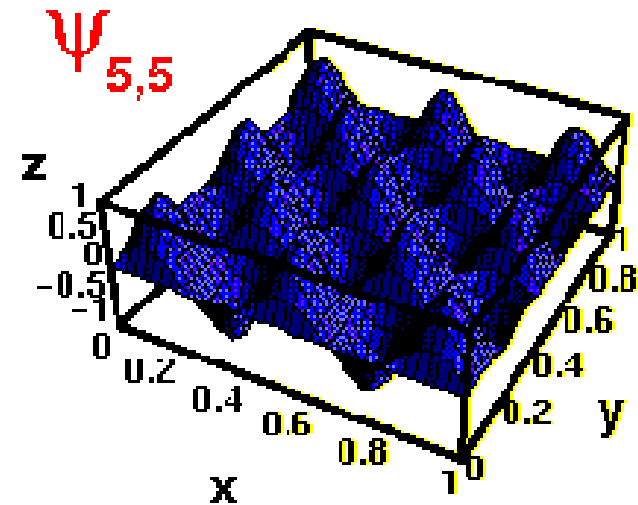
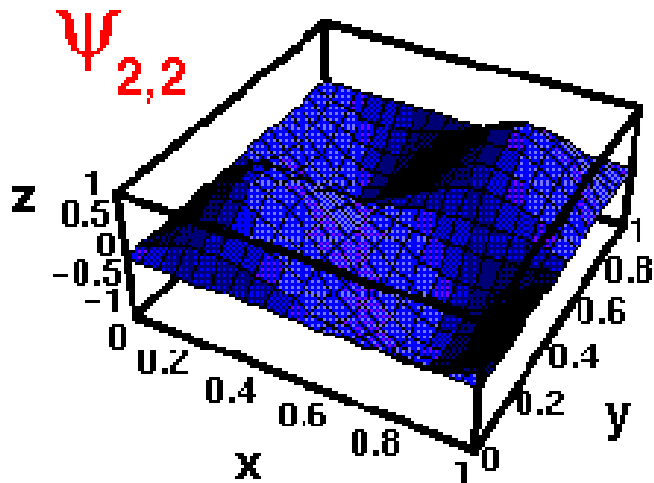
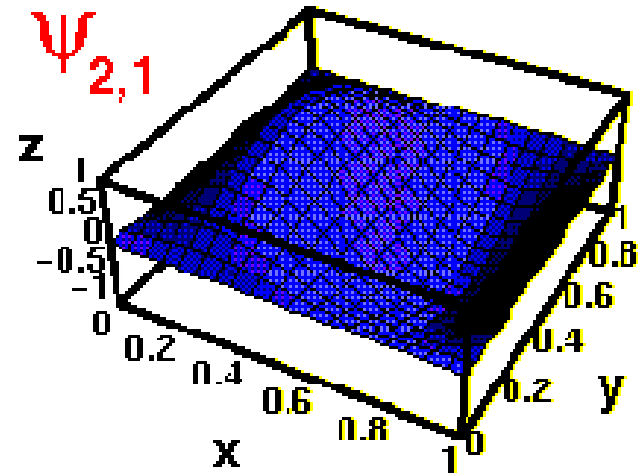
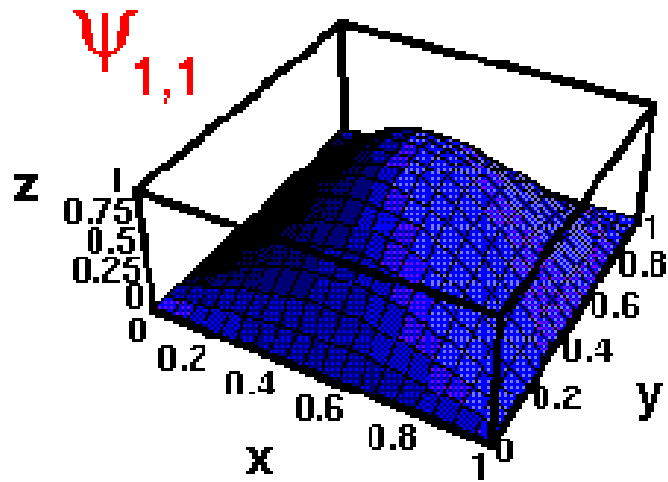
Problema **unidimensional**: onda numa corda

Problema **bidimensional**: onda numa membrana  
(p. ex. na superfície de um tambor)

Ver o link (modos de vibração de ondas bidimensionais):

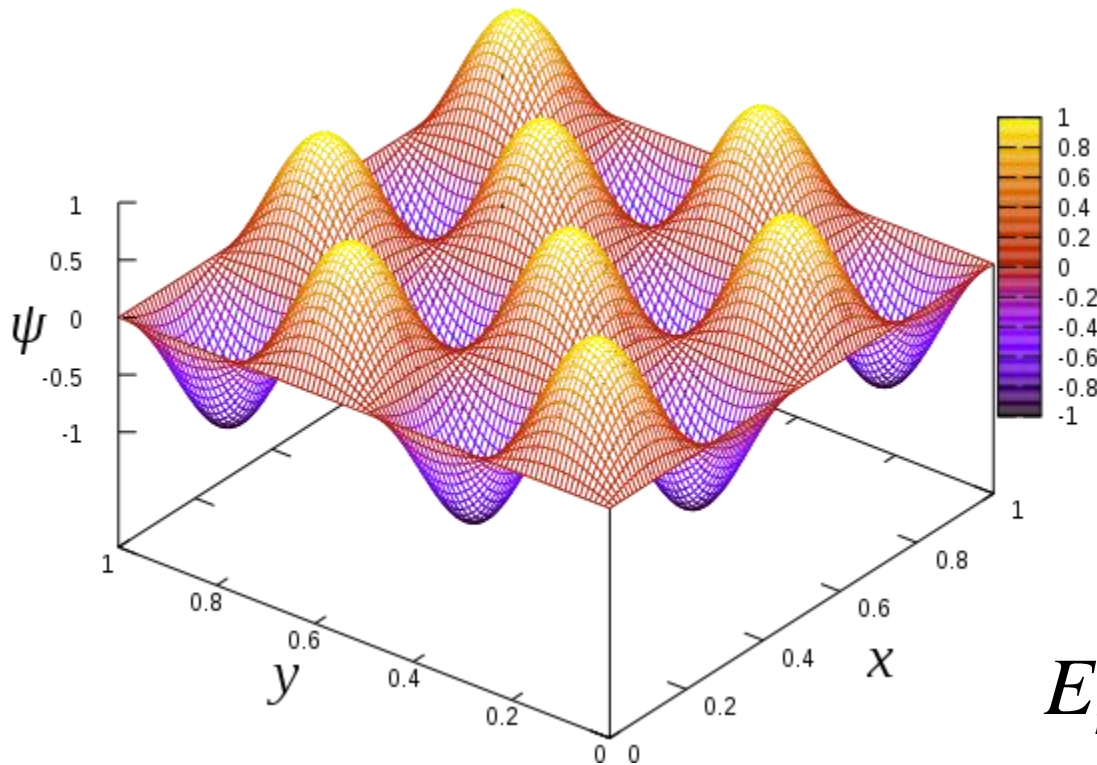
<http://www.kettering.edu/physics/drussell/Demos/MembraneSquare/Square.html>

# Elétron Numa Caixa Bidimensional



# Estados Degenerados

Estados diferentes porém com a mesma energia.

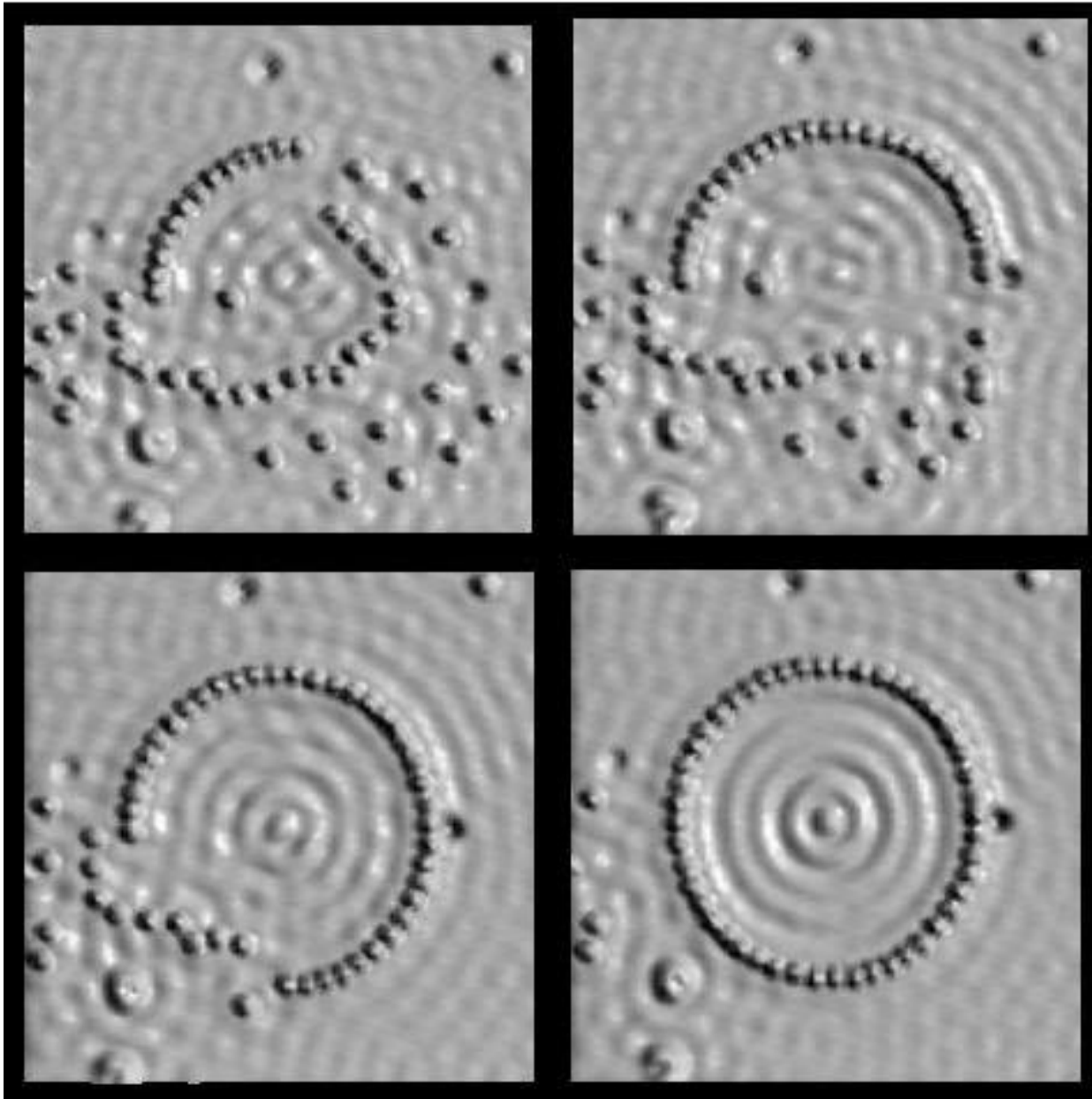


$$E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$$

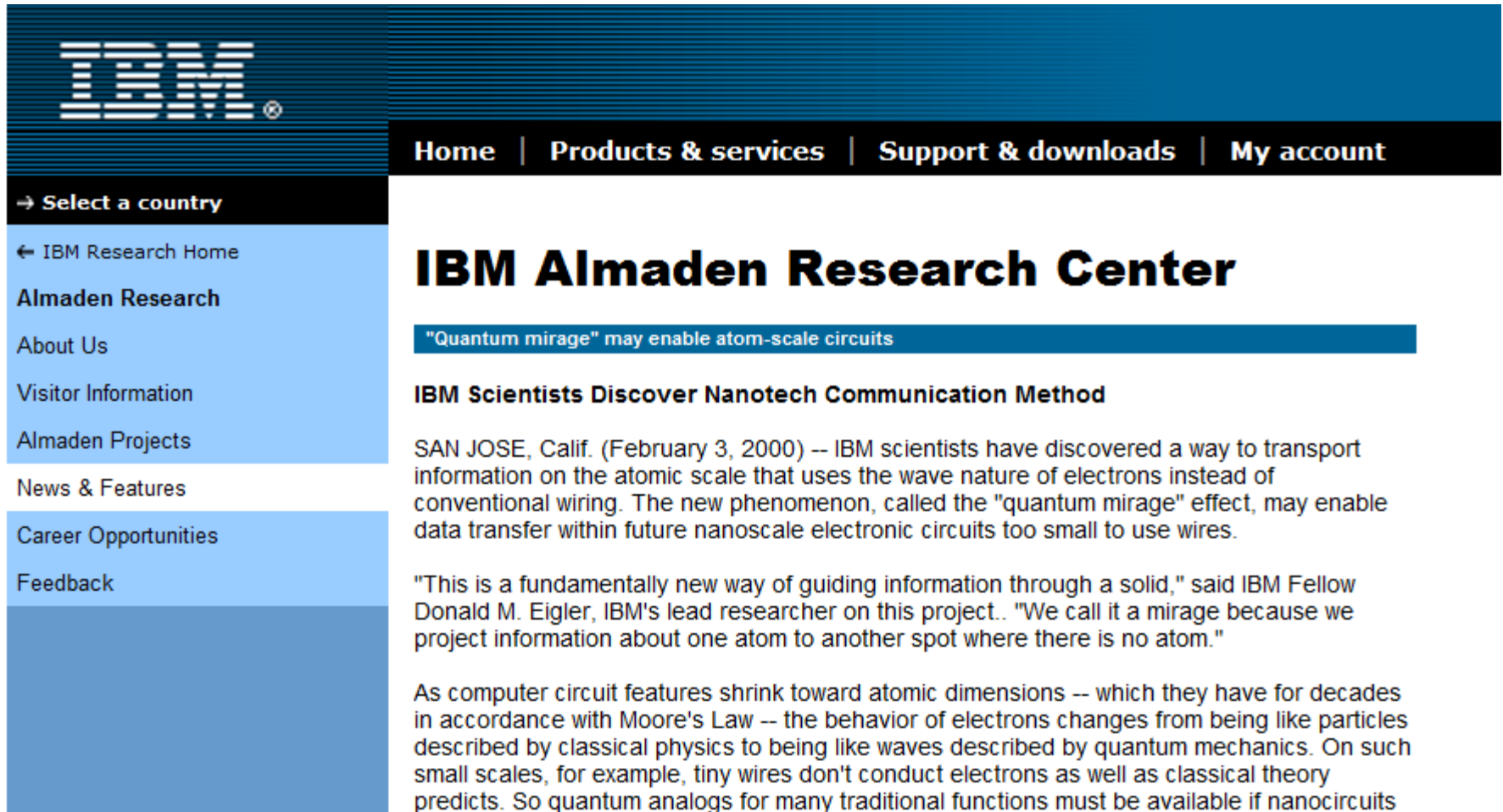
$$E_{1,2} = E_{2,1}$$

# Exemplo: “Curral Quântico”

---



# Exemplo: “Curral Quântico”



The image is a screenshot of the IBM Almaden Research Center website. At the top left is the IBM logo. A navigation bar contains links for Home, Products & services, Support & downloads, and My account. A sidebar on the left lists various site sections like 'Select a country', 'IBM Research Home', 'Almaden Research', 'About Us', 'Visitor Information', 'Almaden Projects', 'News & Features', 'Career Opportunities', and 'Feedback'. The main content area features a headline 'IBM Almaden Research Center' and a sub-headline '“Quantum mirage” may enable atom-scale circuits'. Below this is the article title 'IBM Scientists Discover Nanotech Communication Method' and the text of the article, which discusses a discovery in San Jose, Calif. from February 3, 2000, regarding the transport of information on the atomic scale using the wave nature of electrons.

**IBM**

[Home](#) | [Products & services](#) | [Support & downloads](#) | [My account](#)

→ [Select a country](#)

← [IBM Research Home](#)

[Almaden Research](#)

[About Us](#)

[Visitor Information](#)

[Almaden Projects](#)

[News & Features](#)

[Career Opportunities](#)

[Feedback](#)

## IBM Almaden Research Center

**“Quantum mirage” may enable atom-scale circuits**

### IBM Scientists Discover Nanotech Communication Method

SAN JOSE, Calif. (February 3, 2000) -- IBM scientists have discovered a way to transport information on the atomic scale that uses the wave nature of electrons instead of conventional wiring. The new phenomenon, called the "quantum mirage" effect, may enable data transfer within future nanoscale electronic circuits too small to use wires.

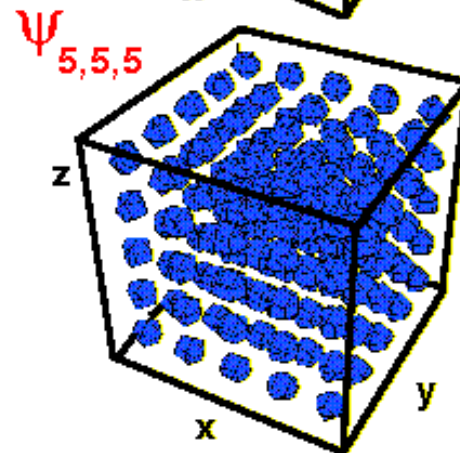
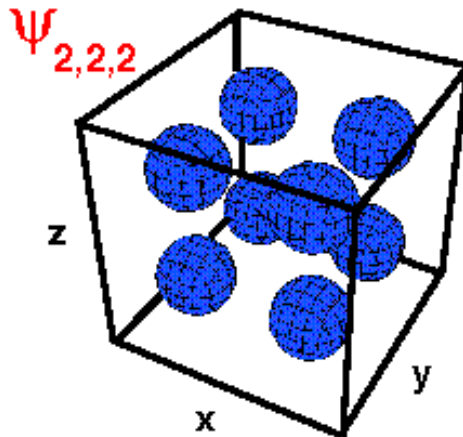
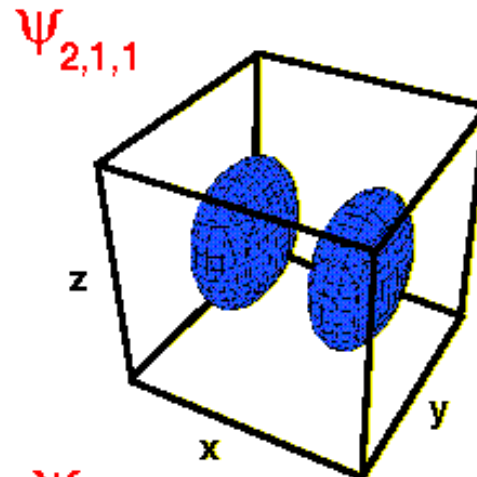
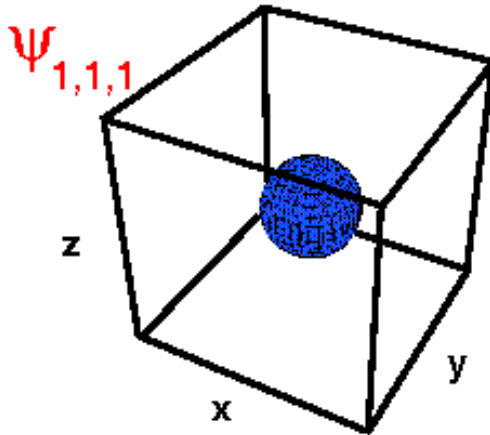
"This is a fundamentally new way of guiding information through a solid," said IBM Fellow Donald M. Eigler, IBM's lead researcher on this project.. "We call it a mirage because we project information about one atom to another spot where there is no atom."

As computer circuit features shrink toward atomic dimensions -- which they have for decades in accordance with Moore's Law -- the behavior of electrons changes from being like particles described by classical physics to being like waves described by quantum mechanics. On such small scales, for example, tiny wires don't conduct electrons as well as classical theory predicts. So quantum analogs for many traditional functions must be available if nanocircuits

<http://www.almaden.ibm.com/almaden/media/mirage.html>

# Elétron Numa Caixa Tridimensional

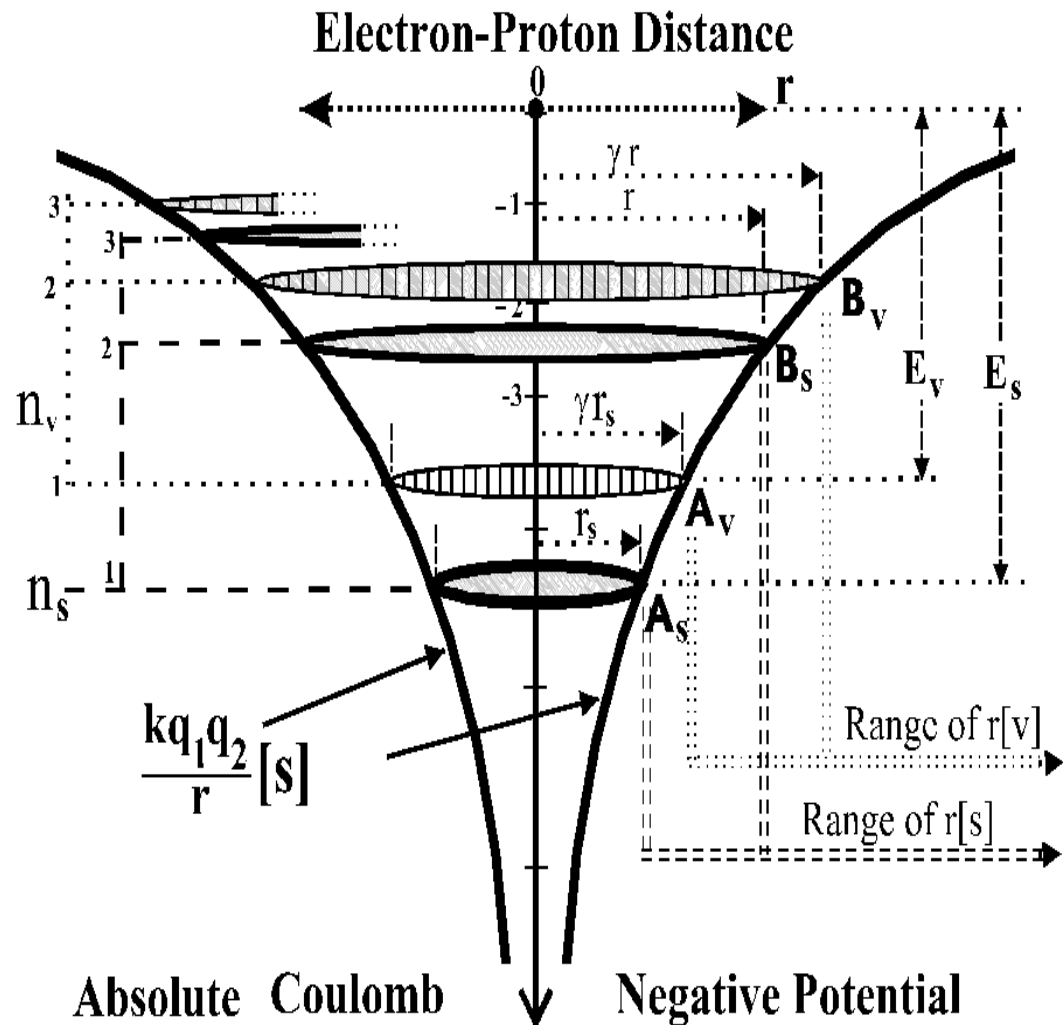
No confinamento 3D, os estados estacionários dependem de 3 números quânticos,  $(n_x, n_y, n_z)$ , um para cada direção.





# Átomo de Hidrogênio

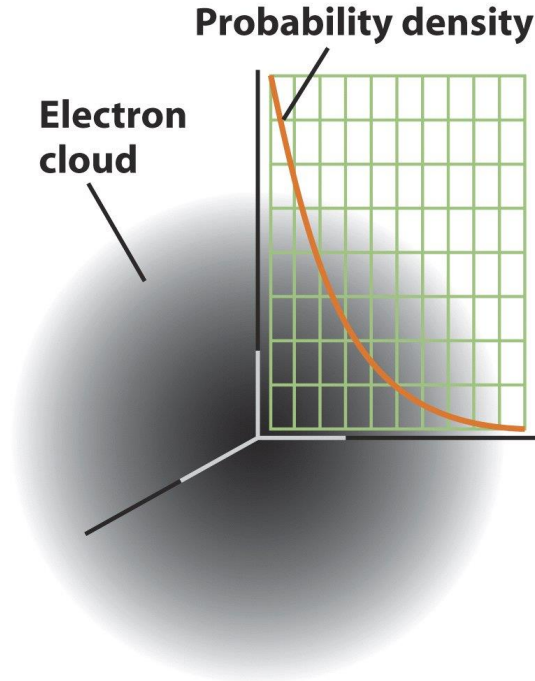
- Vamos supor um sistema com um próton e um elétron.
- O próton cria uma armadilha para o elétron, mantendo-o confinado.
- Qualquer tipo de confinamento faz surgir estados estacionários.



# Orbitais do Átomo de Hidrogênio

---

Densidade de probabilidade de se encontrar o elétron:



O modelo da mecânica quântica não se refere a órbitas porque o movimento do elétron em um átomo não pode ser medido ou localizado com precisão (princípio da incerteza de Heisenberg).

Orbital (modelo da mecânica quântica)

≠

Órbita ou camada (modelo de Bohr)

# Orbitais Atômicos

**TABLE 1.2** Hydrogen Wavefunctions (Atomic Orbitals),  $\psi = RY$

(a) Radial wavefunctions, $R_{nl}(r)$			(b) Angular wavefunctions, $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$		
$n$	$l$	$R_{nl}(r)$	$l$	" $m_l$ "*	$Y_{lm_l}(\theta, \phi)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$	1	$x$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$
	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$		$y$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$
3	0	$\frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(3 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-Zr/3a_0}$	2	$z$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
	1	$\frac{2}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}$		$xy$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$
	2	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$		$yz$	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \sin \phi$
				$zx$	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \cos \phi$
				$x^2 - y^2$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$
				$z^2$	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$

Note: In each case,  $a_0 = 4\pi\epsilon_0^2/m_e e^2$ , or close to 52.9 pm; for hydrogen itself,  $Z = 1$ .

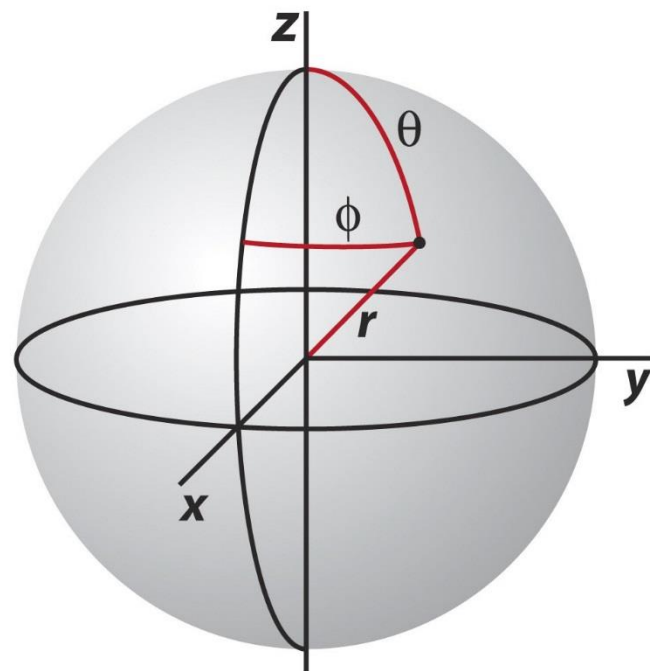
\*In all cases except  $m_l = 0$ , the orbitals are sums and differences of orbitals with specific values of  $m_l$ .

# Átomo de Hidrogênio

---

- Por se tratar de um problema em 3 dimensões, teremos 3 números quânticos associados aos estados estacionários.
- Os números quânticos do problema da partícula na caixa estavam associados às 3 direções cartesianas. O problema do hidrogênio possui uma simetria diferente (simetria esférica), e o tratamento matemático requer uma transformação de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas. Isso faz com que cada número quântico tenha um significado especial, como veremos a seguir.

## Coordenadas Esféricas Polares



# Números Quânticos

**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

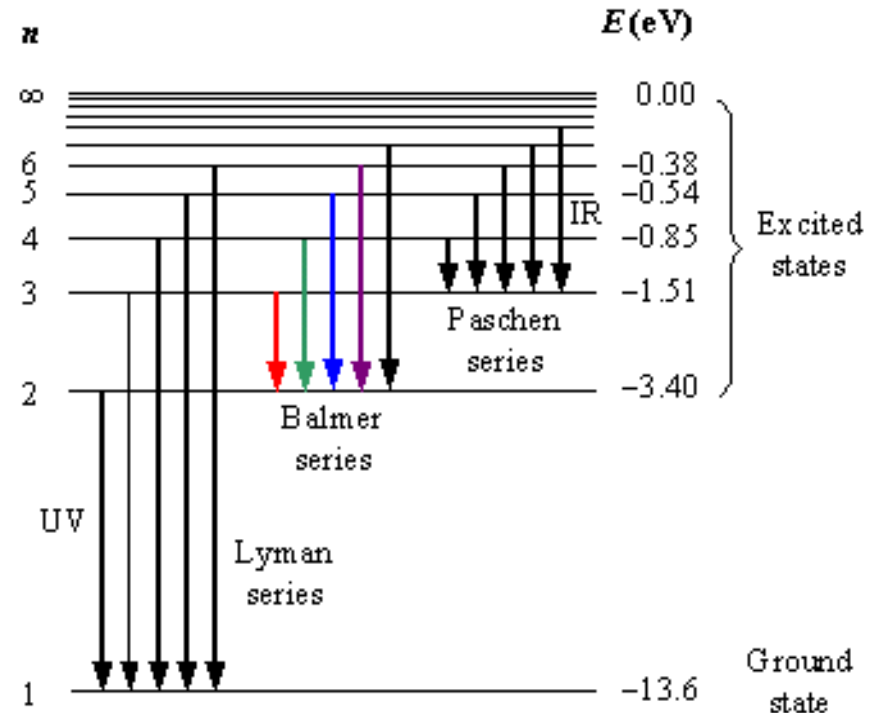
\*Also called the *azimuthal quantum number*.

**Os níveis de energia do átomo de hidrogênio são dados pelo número quântico principal:**

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -(13,6\text{eV}) \frac{1}{n^2}$$

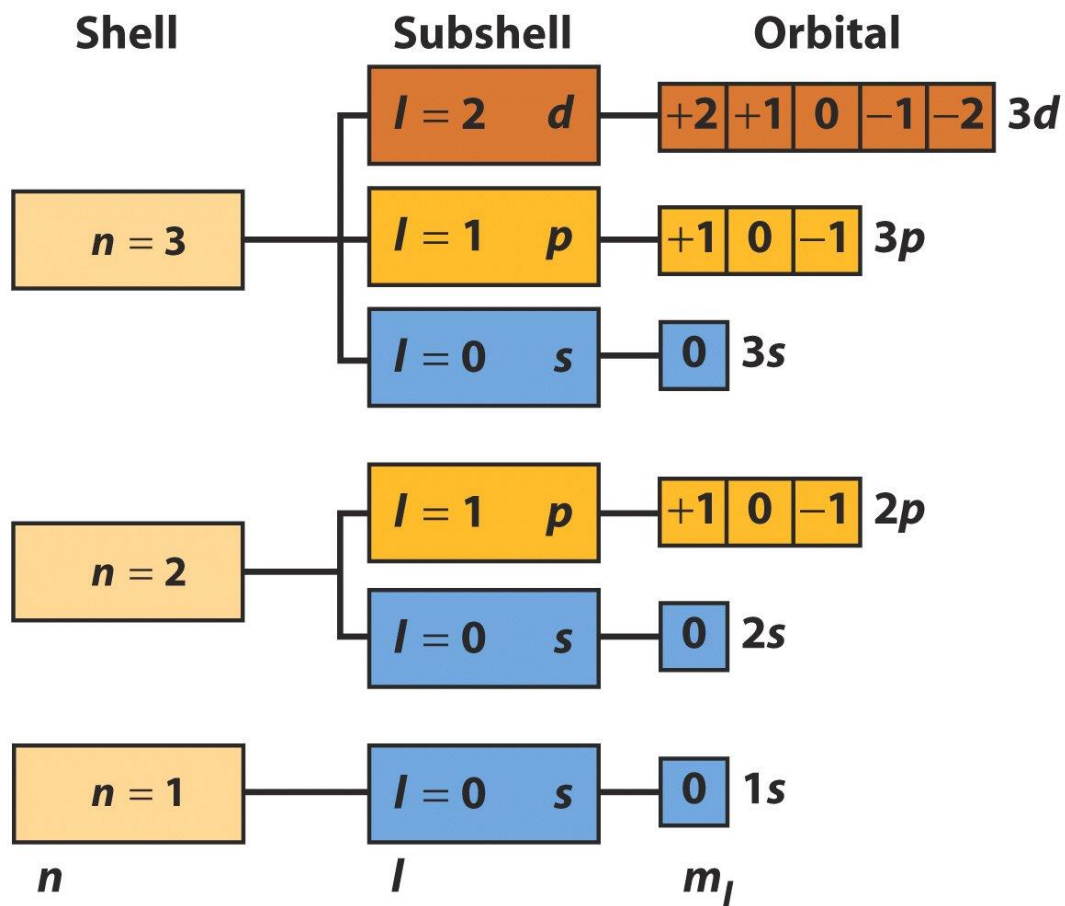
# Espectroscopia

A verificação experimental sobre a existência de estados estacionários no átomo de hidrogênio é através de experimentos de espectroscopia. Neles, átomos de hidrogênio absorvem ou emitem fótons cuja energia é igual a diferença entre os níveis.

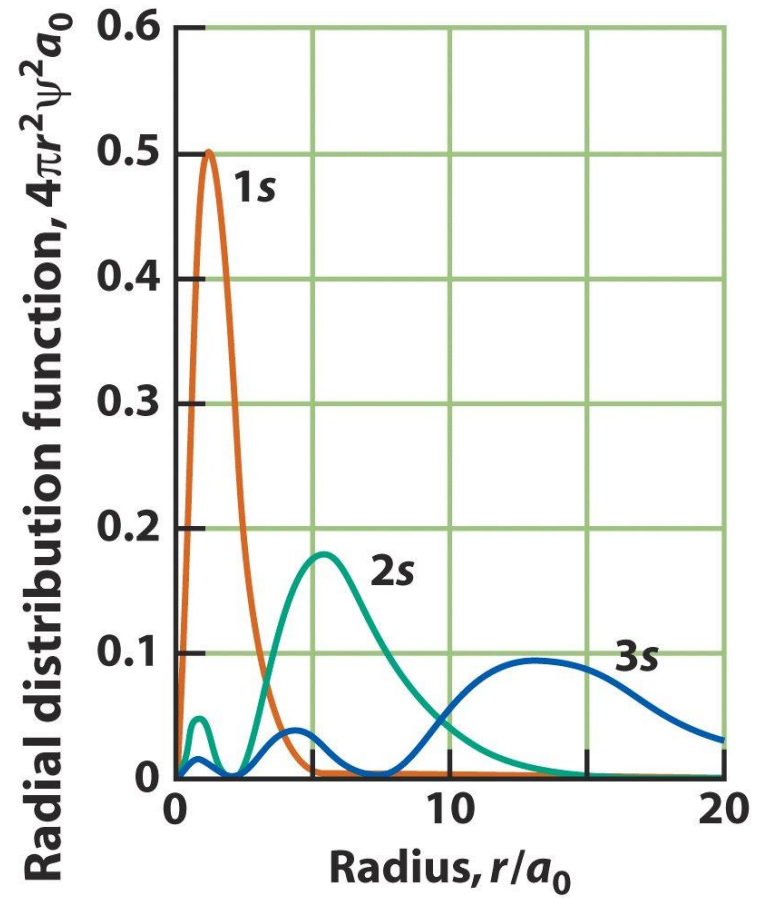
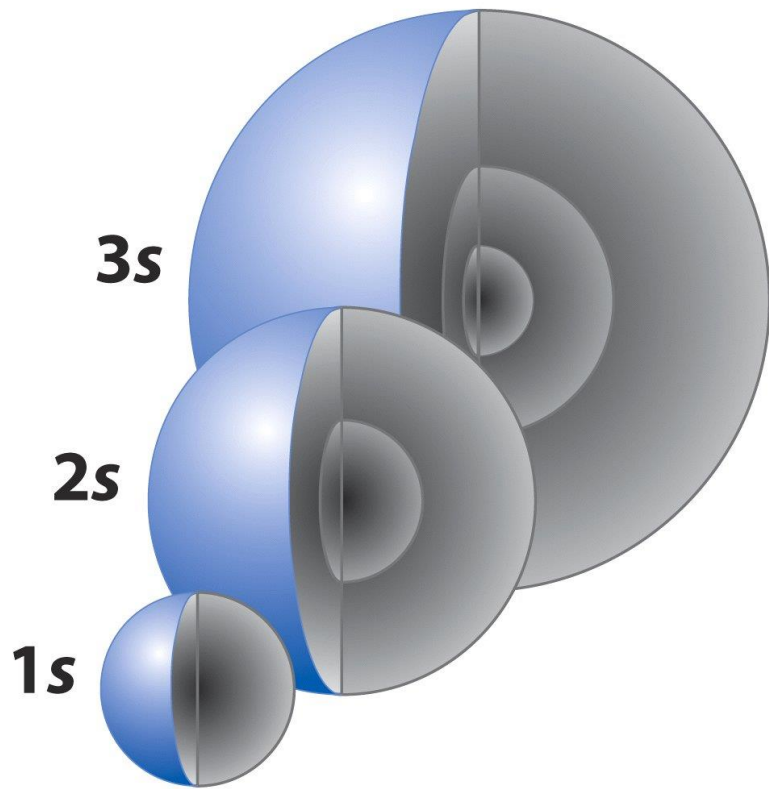


Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated.

# Arranjos



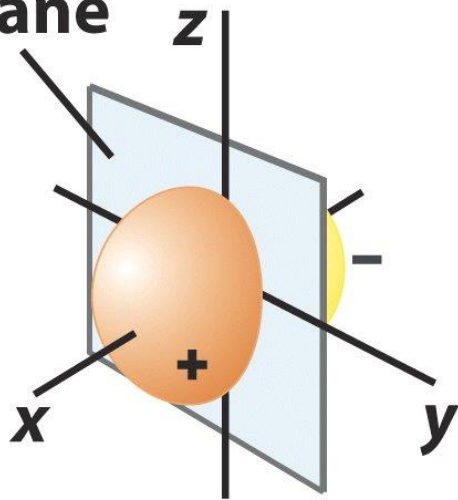
# Orbitais s



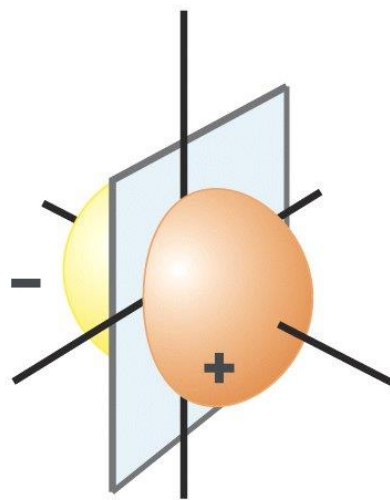


# Orbitais p

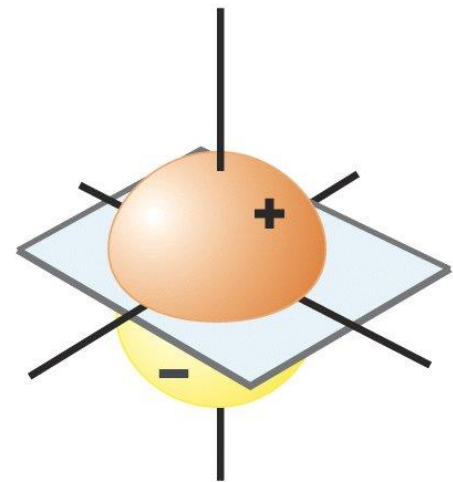
Nodal  
plane



$p_x$

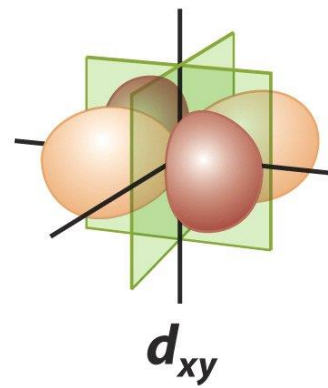
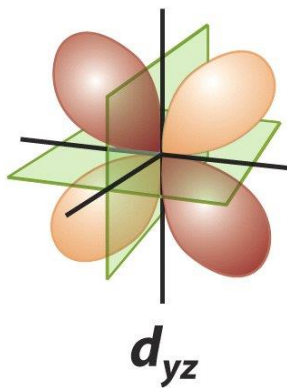
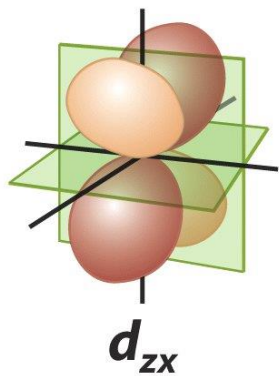
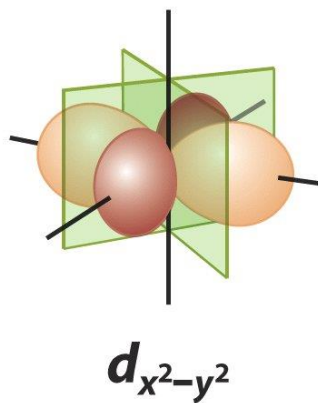
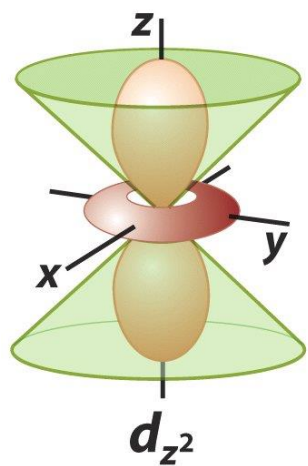


$p_y$

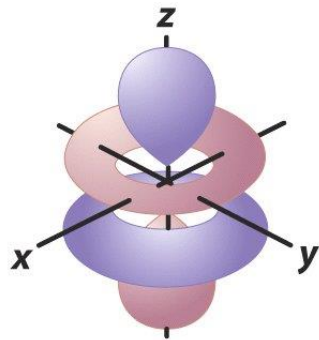


$p_z$

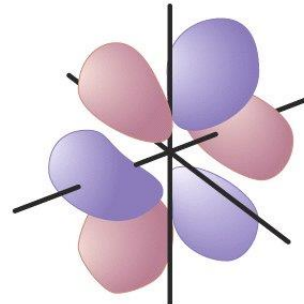
# Orbitais d



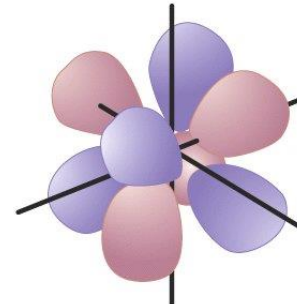
# Orbitais f



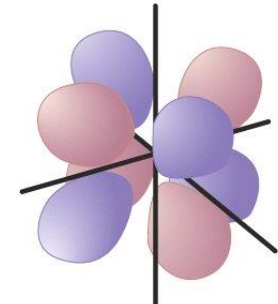
$$5z^3 - 3zr^2$$



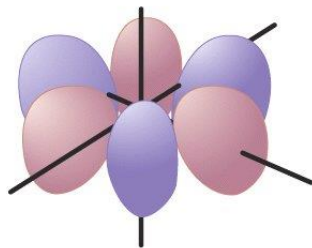
$$5xz^2 - xr^2$$



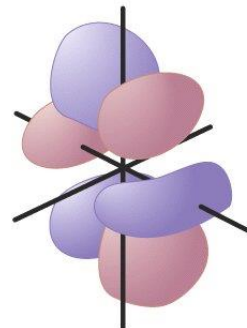
$$zx^2 - zy^2$$



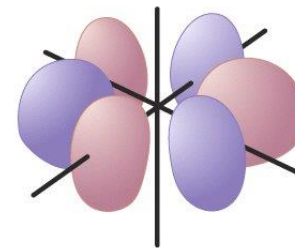
$$xyz$$



$$y^3 - 3yx^2$$



$$5yz^2 - yr^2$$



$$x^3 - 3xy^2$$

# Átomo de hidrogênio

Temos para  $n=1$ :

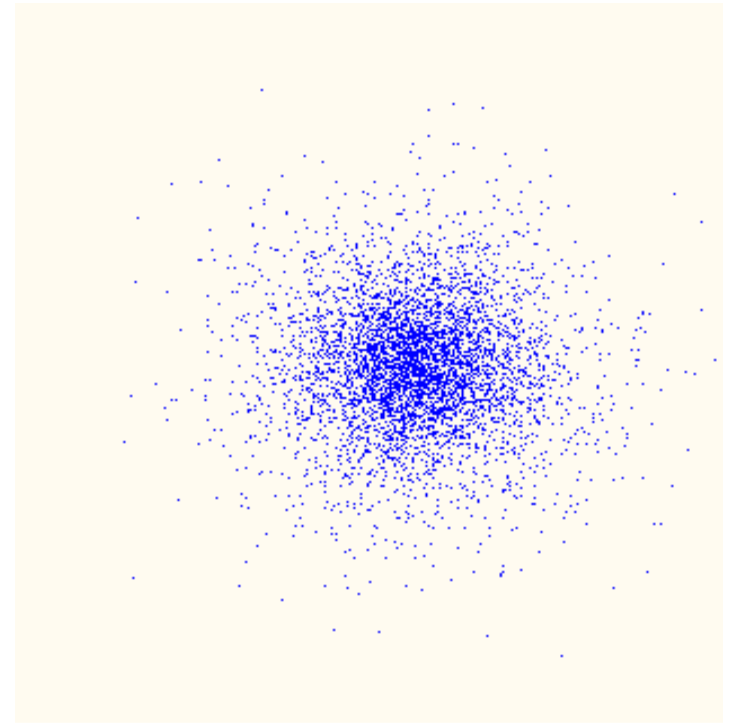
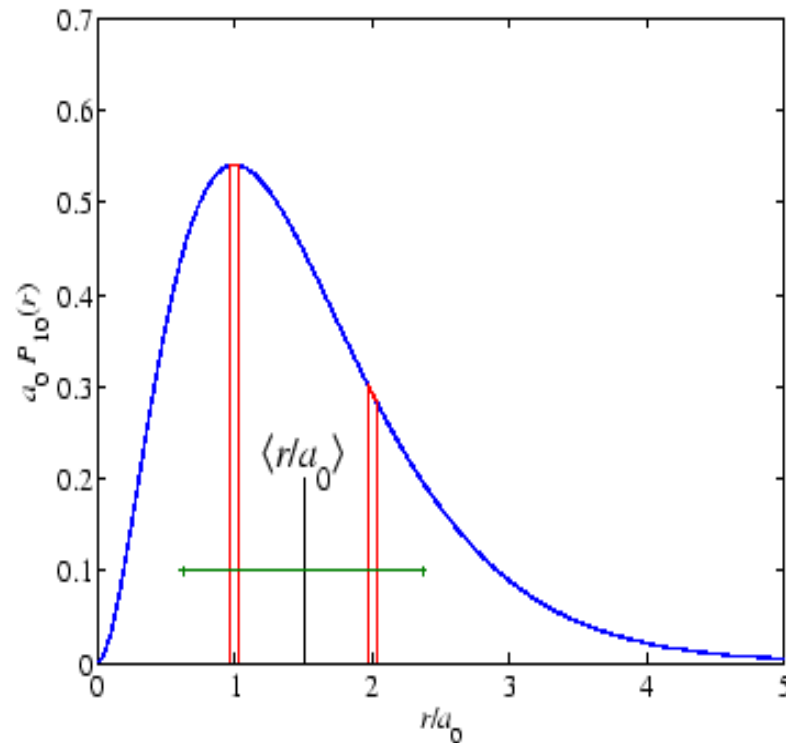
$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2/3}} e^{-r/a}$$

onde

$$a = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 52,92 \text{ pm}$$

# Átomo de hidrogênio

Dessa forma para  $n=1$ :

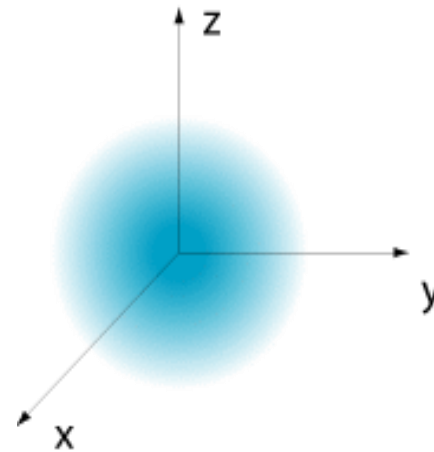


# Estado fundamental de H

Para o estado fundamental (o de menor energia), também chamado de orbital 1s:

$n$	$\ell$	$m_\ell$	$E_n$
1	0	0	$-\frac{me^4}{2\hbar^2}$

1s orbital  
 $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0$

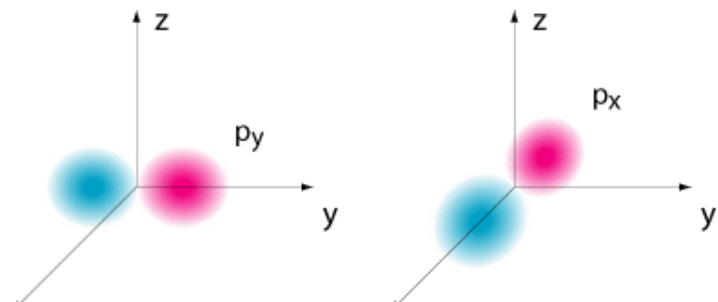
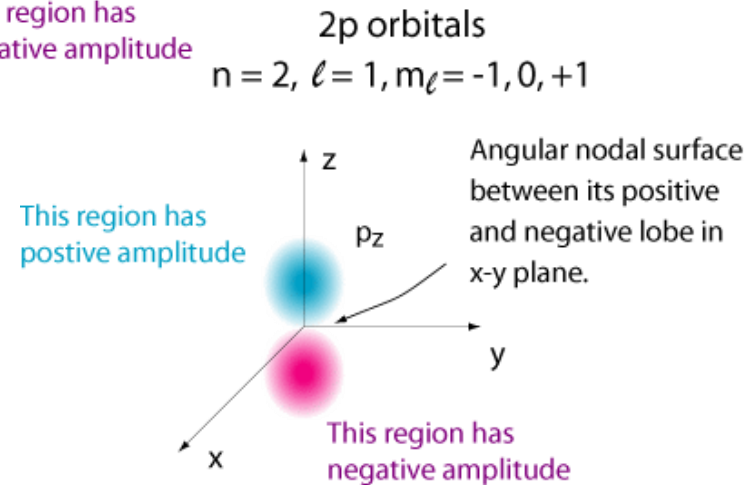
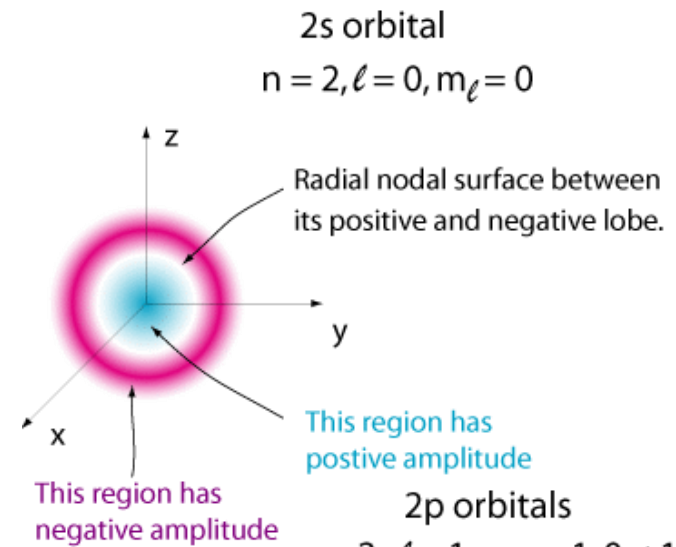


The 1s standing wave function (orbital) is all positive (i.e., no negative lobes) and has no nodal surfaces. It is spherically symmetric.

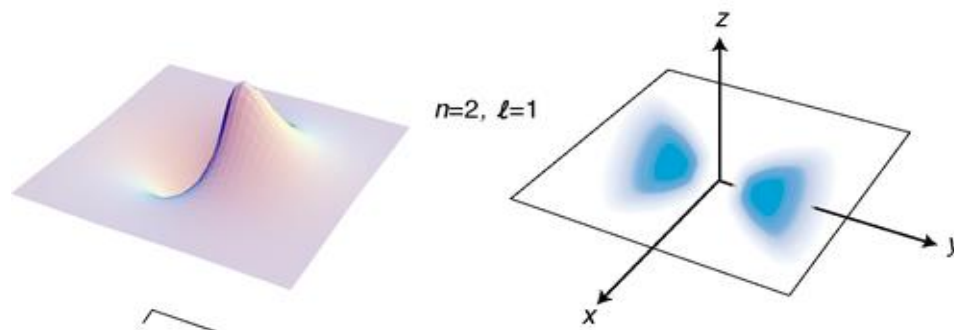
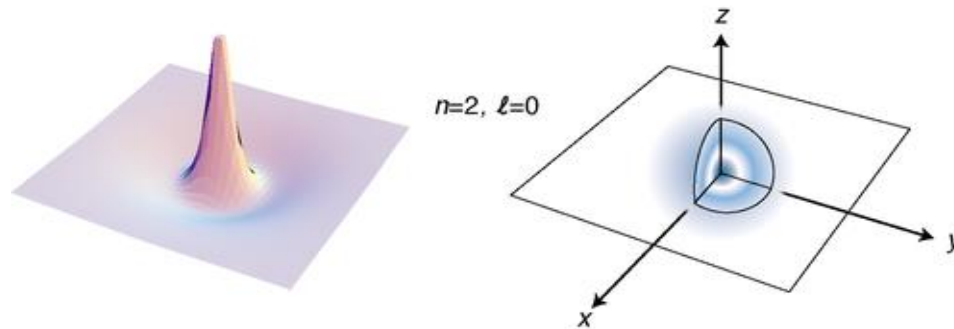
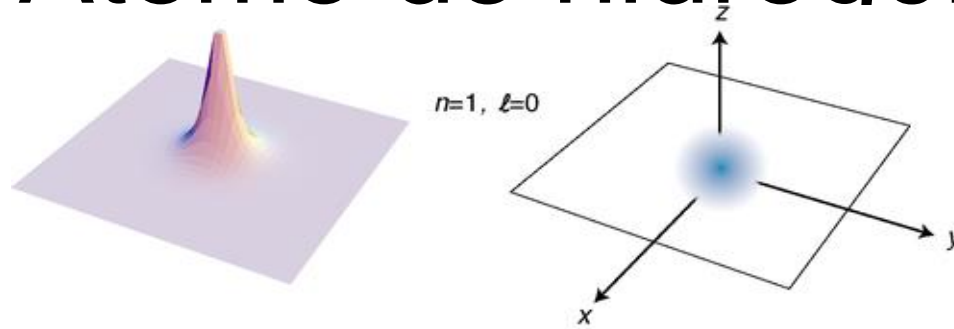
# 1<sup>o</sup> est. excitado

Para o 1<sup>o</sup> estado excitado, conhecido como orbital 2s( $l=0$ ) e 2p( $l=1$ ):

$n$	$l$	$m_l$	$E_n$
2	0	0	$-\frac{me^4}{8\hbar^2}$
2	1	-1	$-\frac{me^4}{8\hbar^2}$
2	1	0	$-\frac{me^4}{8\hbar^2}$
2	1	1	$-\frac{me^4}{8\hbar^2}$



# Átomo de hidrogênio

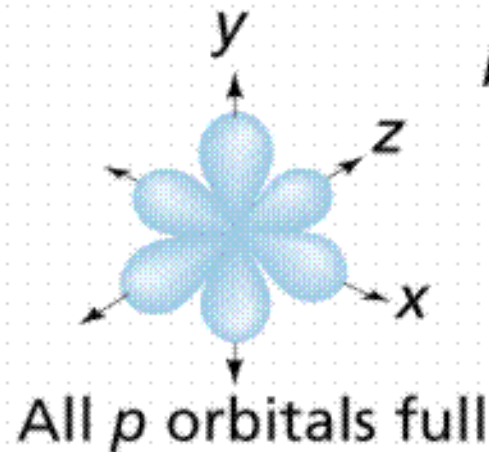
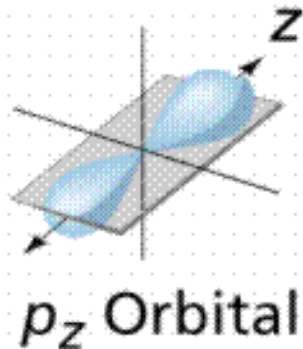
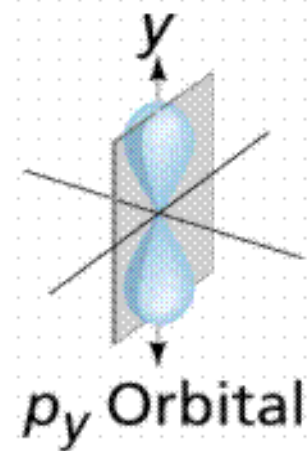
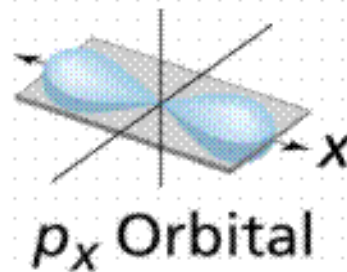
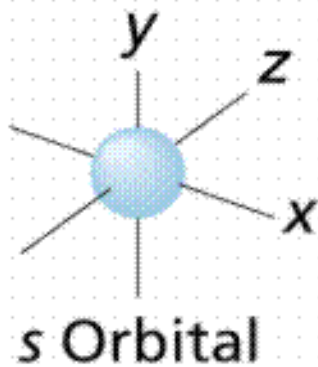


1 nanometer



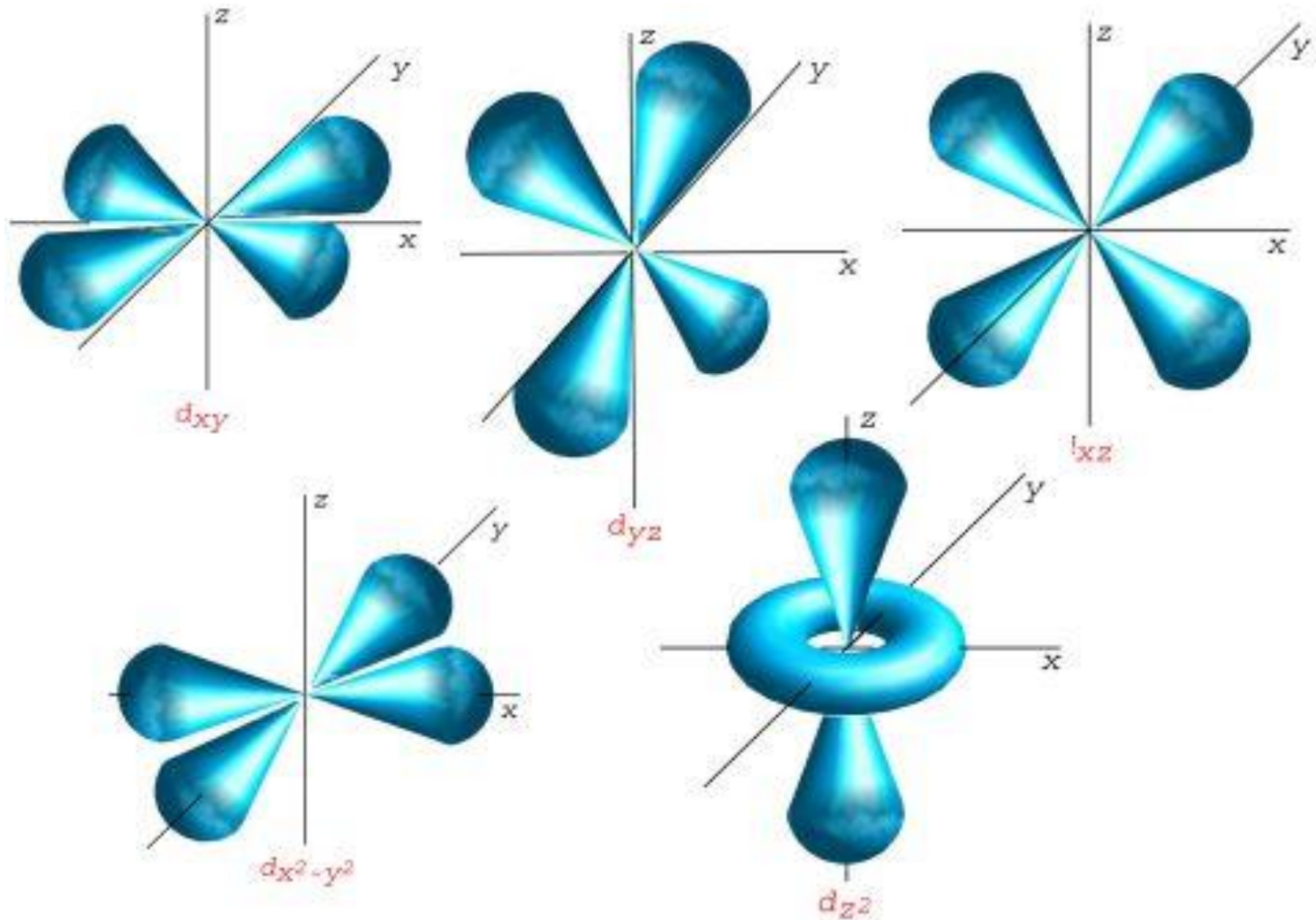
# Átomo de hidrogênio

Podemos visualizar a distribuição dos estados estacionários dos orbitais s e p:



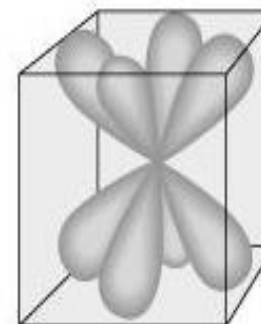
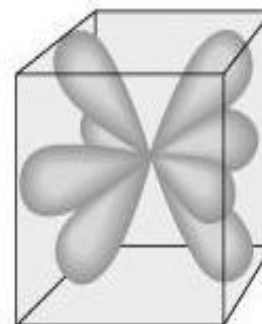
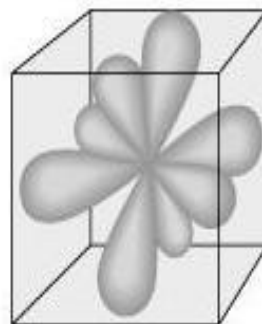
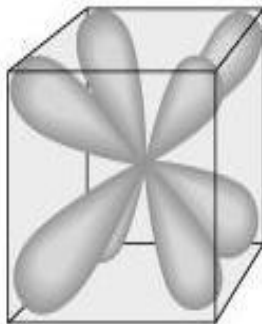
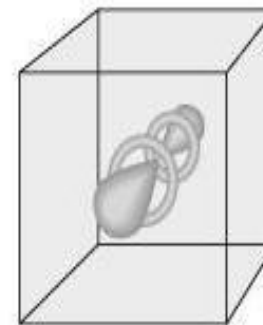
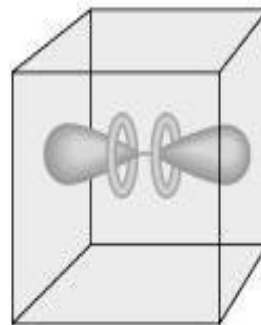
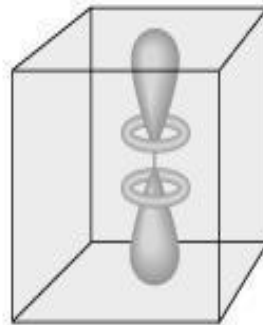
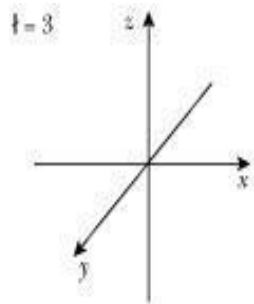
# Átomo de hidrogênio

Para o orbital d temos:



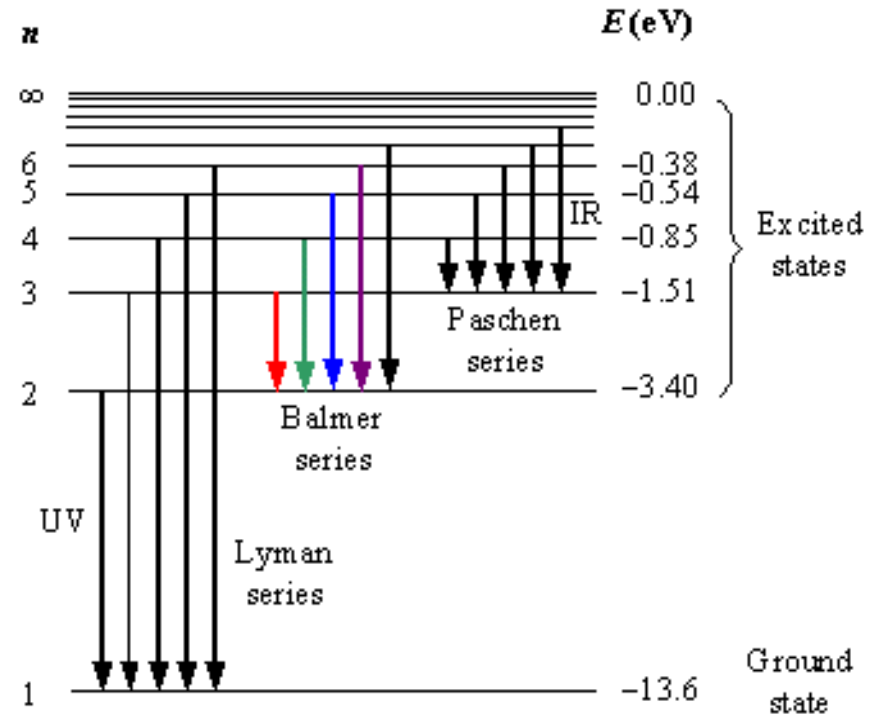
# Átomo de hidrogênio

Para o orbital f:



# Espectroscopia

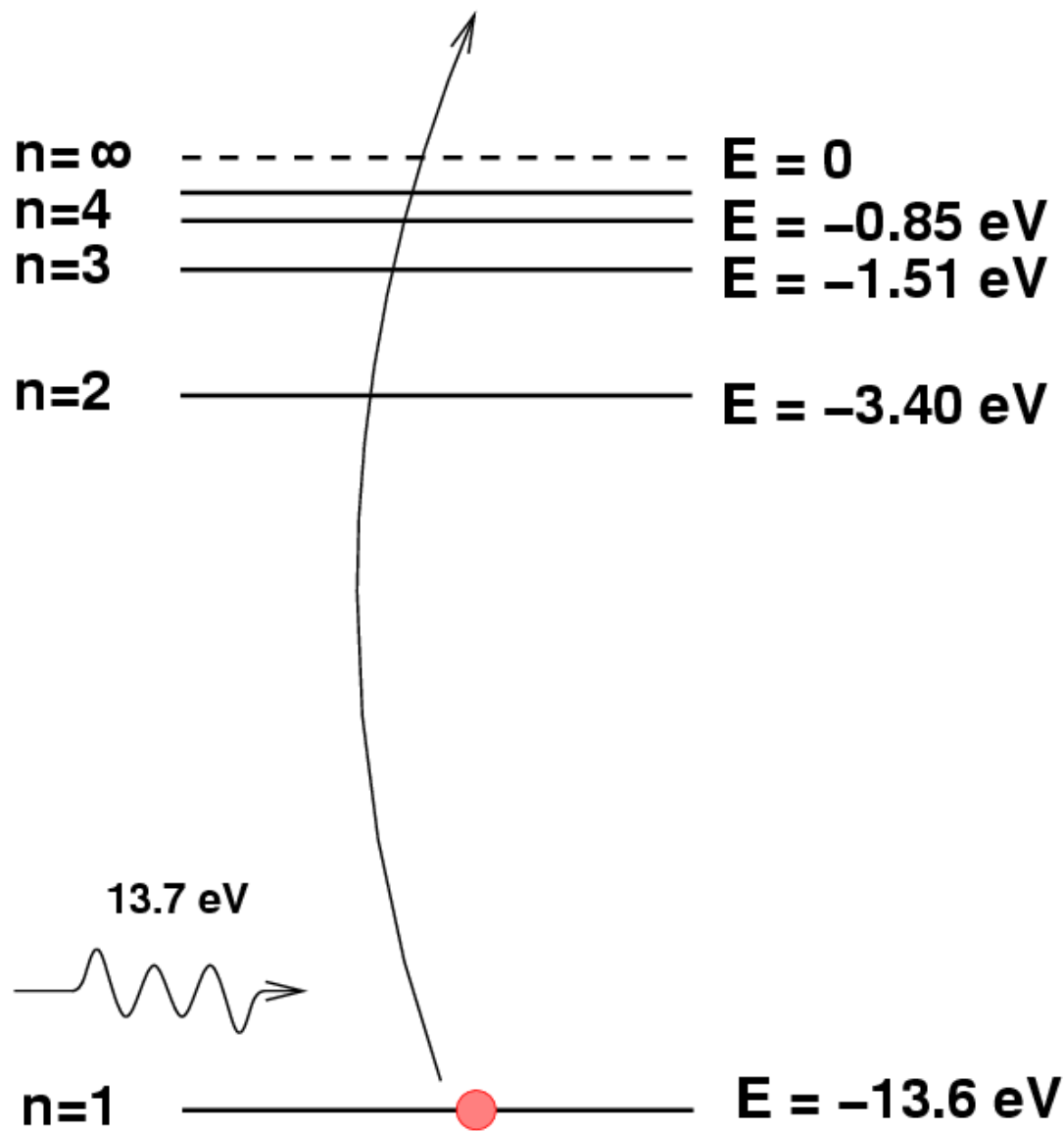
A verificação experimental sobre a existência de estados estacionários no átomo de hidrogênio é através de experimento de espectroscopia. Onde um gás de hidrogênio absorve ou emite fótons cuja energia é igual a diferença entre os níveis.



Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated.

A ionização do átomo ocorre quando a energia do fóton for maior que o módulo da energia do estado estacionário. Ficando o hidrogênio com carga positiva.

# Ionização



# Átomos multi-eletrônicos

- Conhecido o átomo de hidrogênio poderíamos fazer a mesma análise para outros átomos que possuam mais de um elétron. Porém esbarramos em algumas coisa, os elétrons interagem entre si e não é possível ter dois ou mais elétrons num mesmo estado estacionários.
- Mas isso é matéria para a próxima aula.