

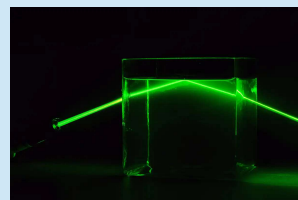
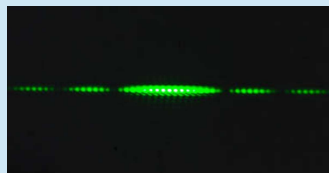
Química

Mecânica Quântica Moderna

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

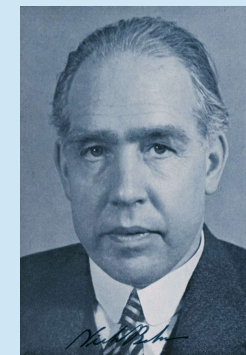
Dualidade onda-partícula

- Tais limitações se devem, em parte, a outra propriedade muito importante no domínio de partículas tão pequenas: a **dualidade onda-partícula**;
- Ondas e partículas apresentam propriedades muito diferentes:
 - Onda:** posição, momento e massa indefinidos.
 - Partículas:** Posição, momento e massa definidos.
- A luz exibe propriedades de onda e de partícula:
 - Propriedades de onda: interferência, difração;
 - Propriedades de partícula: efeito Tyndall, refração (posição, trajetória), efeito fotoelétrico, luminescência (momento mínimo)



Reflexões sobre o modelo de Bohr

- Inovações trazidas pelo modelo de Bohr:
 - Explicação e cálculo de espectros de absorção/emissão de átomos com um elétron, chamados de hidrogenóides;
 - Uso bem sucedido da hipótese quântica na descrição da estrutura dos átomos.
- Limitações do modelo de Bohr
 - Não é aplicável para átomos com mais de um elétron;
 - Não descreve substâncias com mais de um átomo;
 - Não explica a diferença de intensidade entre as linhas, entre outros.



Eq. de Le Broglie

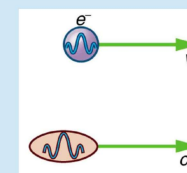
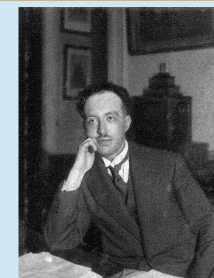
- Usando a Eq. de Planck ($E = hf$) e a de Einstein ($E=pc$), que relaciona a energia e o momento da luz, Le Broglie uniu em uma só equação a característica corpuscular (momento) e ondulatória (comprimento de onda) da luz:

$$\lambda = h/p$$

- Le Broglie foi além e **propôs que a relação era válida para qualquer corpo** com massa m e velocidade v , possuindo propriedades de partícula e de onda simultaneamente:

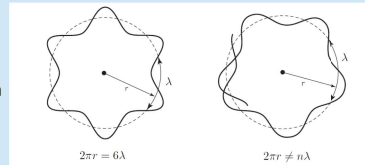
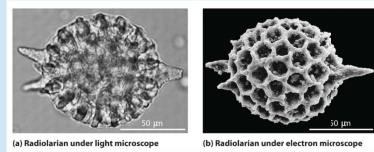
$$\lambda = h/p = h/mv$$

- A confirmação da **Eq. de Le Broglie** veio a partir de dois experimentos:
 - Efeito Compton:** fótons têm momento
 - Difração de elétrons:** eles exibem propriedades ondulatórias também



Exemplos

- 1) Calcule o comprimento de onda de um hambúrguer de 500 g a 1 m/s. R.: $1,33 \cdot 10^{23} \text{ \AA}$.
- Corpos na nossa escala tamanho e massa têm comprimento de onda muito pequeno para que propriedades ondulatórias sejam verificadas na prática. Então o comportamento simultâneo onda-partícula é algo inerente ao domínio microscópico;
- Ex.: Calcule o comprimento de onda do elétron a $9,47 \cdot 10^6 \text{ m/s}$. R.: $0,77 \text{ \AA}$.
- Confirmação adicional a abordagem foi a explicação bem sucedida de Le Broglie para a razão da condição de quantização de Bohr funcionar.



Princípio da Incerteza de Heisenberg

- Posição e momento definidos é algo característico de partículas;
- Uma partícula pode ter valores de x e p_x tão exatos quanto se queira, assim os erros Δx e Δp_x podem tender a zero com medidas mais e mais precisas;
- Ondas, por outro lado, não possuem localidade (são deslocalizadas) e não possuem momento definido.
- Mas no mundo microscópico objetos possuem propriedade de onda e partícula, então como conciliar o definido com o indefinido?
- A resposta é uma definição limitada de x e p_x .
- Analogia:** como numa foto desfocada, a direção é certa quando a posição é incerta, e a certeza na posição impede-nos de conhecer a futura direção.



Precisão na posição grande = Δx pequeno
(sabe onde está)
Precisão no momento baixa = Δp_x alto
(não sabe onde vai)



Precisão na posição pequena = Δx grande
(não sabe onde está)
Precisão no momento grande = Δp_x pequeno
(sabe onde vai)

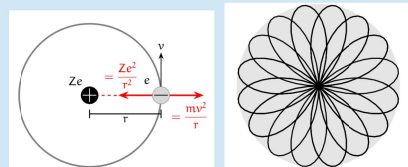
Cuidado: precisão alta equivale a erros (ou incertezas) baixos, e vice-versa

Princípio da Incerteza de Heisenberg

- Heisenberg descobriu que não só o erro na posição e momento de objetos pequenos estão relacionadas, como que existe um mínimo que impede que um ou outro seja nulo ou menor que certo valor:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/4\pi$$

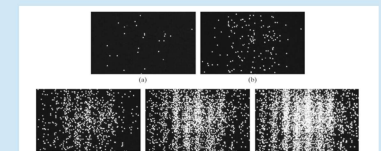
- Logo é verdade que Δx e Δp_x nunca podem ser iguais a zero.
- Essa descoberta mostrou que é impossível descrever um modelo do átomo com trajetórias e velocidades definidas do elétron, como o modelo de Bohr, que está fundamentalmente errado.
- Ex.: O princípio da incerteza no momento da bola (0,40 kg) lançada por um jogador de futebol a 40 m/s é $1 \cdot 10^{-6}$ do seu momento. Qual é a incerteza na posição?



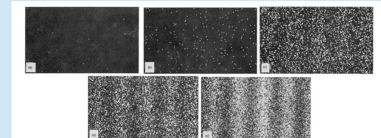
Interpretação de Born

- Se partícula-onda, qual a função de onda Ψ ? É onda de quê?
- Ψ é um objeto matemático sem significado físico intrínseco. Porém, $|\Psi|^2$ é a probabilidade de encontrar o elétron em certa região do espaço. Essa é a interpretação de Born.
- Não podemos determinar precisamente se uma moeda lançada dará cara ou coroa. Mas, por meio de medidas coletivas, podemos ver padrões de probabilidade e fazer previsões.
- Portanto, calcular $|\Psi|^2$ é uma maneira de fazer previsões. Em certo sentido, Ψ não é uma onda comum, que se propaga em um meio, mas um objeto matemático que permite obter probabilidades.

Experimentos de dupla fenda



1 fóton por vez



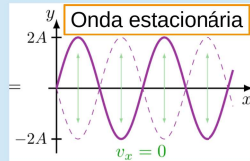
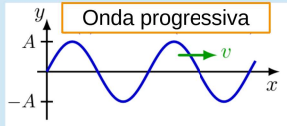
1 elétron por vez

Equação de Schrodinger

- Se Ψ é tão importante, como calculá-lo? Schrödinger sugeriu o uso de duas equações de onda:

a) Uma para determinar a função de **ondas progressivas**, sendo dependente do espaço e do tempo, $\Psi(x,t)$ (ondas tais como a da luz);

b) Outra para determinar a função em **ondas estacionárias**, que depende apenas do espaço, $\Psi(x)$ (ondas de matéria confinada, como uma partícula em uma caixa);



Bons estudos!

Eq. de Schrödinger

- A segunda equação é a adequada para descrever orbitais e energias em um átomo, por isso vamos focar nela. Para usá-la emprega-se o esquema ao lado.

- Ele permitiu que os cientistas previssem, ao longo dos anos:

- A Eq. de Le Broglie
- O princípio da Incerteza de Heisenberg
- Resultados de experimentos com fendas
- Energias e outras propriedades de átomos hidrogenóides
- Energias e outras propriedades de átomos polieletrônicos
- Energias e outras propriedades de moléculas
- E muito mais!

