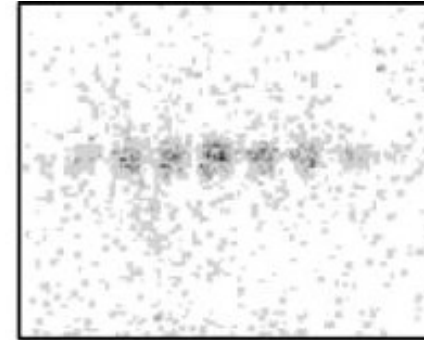
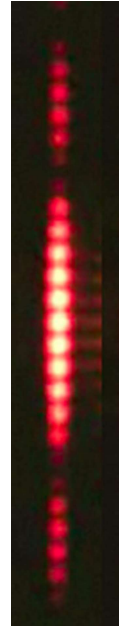
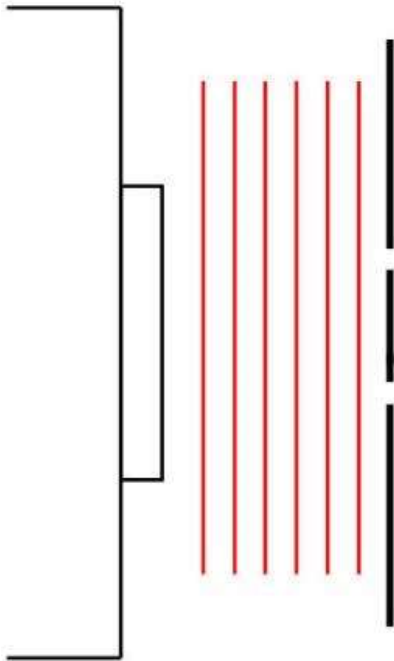


# Amplitudes de Probabilidade



Dualidade ondulatória / corpuscular



Erwin Schrödinger desenvolveu uma teoria que descreve as amplitudes de probabilidade dos objetos quânticos  $\psi(\vec{r})$

A probabilidade de detetar uma partícula numa dada posição é dado por  $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$

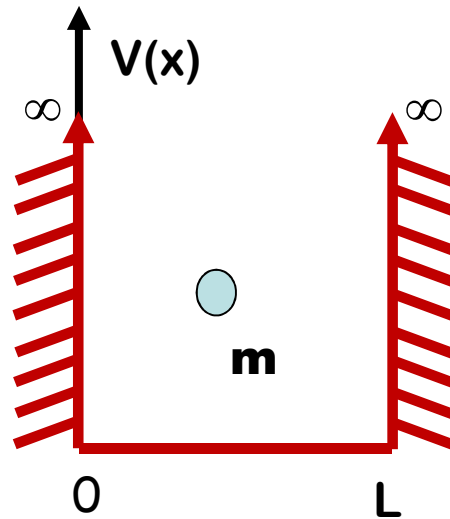
# Amplitude de probabilidade

Em geral é necessário resolver a equação de Schrödinger para determinar níveis energético dos sistema quânticos

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

(Física Quântica I  
2º semestre 2º ano)

- Uma exceção é o caso dos níveis energéticos principais do átomo de hidrogénio (modelo de Bohr)
- Uma outra exceção é o caso do “poço infinito”



Uma partícula de massa  $m$ , frequentemente um elétron, é confinado num poço potencial infinito com uma largura  $L$

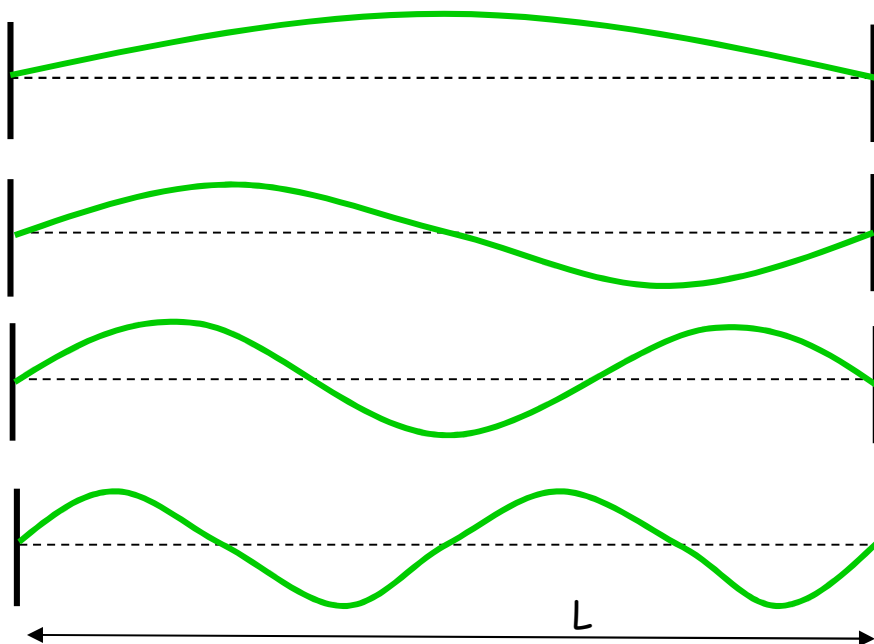
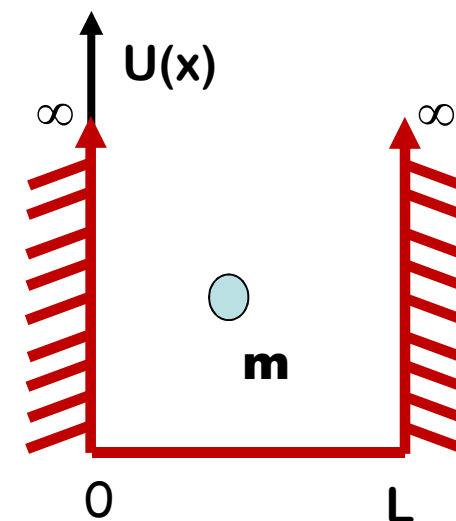
Problema modelo  
Pode ser usado para estimar energias “de confinamento” estruturas semicondutores moléculas

# Uma partícula num poço infinito

Entre  $x = 0$  e  $x = L$  a partícula é livre só tem energia cinética

A probabilidade encontrar a partícula nas regiões  $x < 0$  ou  $x > L$  é nula (requeria uma energia infinito)

As posições  $x = 0$  ou  $x = L$  tem de ser nós na amplitude da probabilidade (equivalente a uma corda numa guitarra)



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

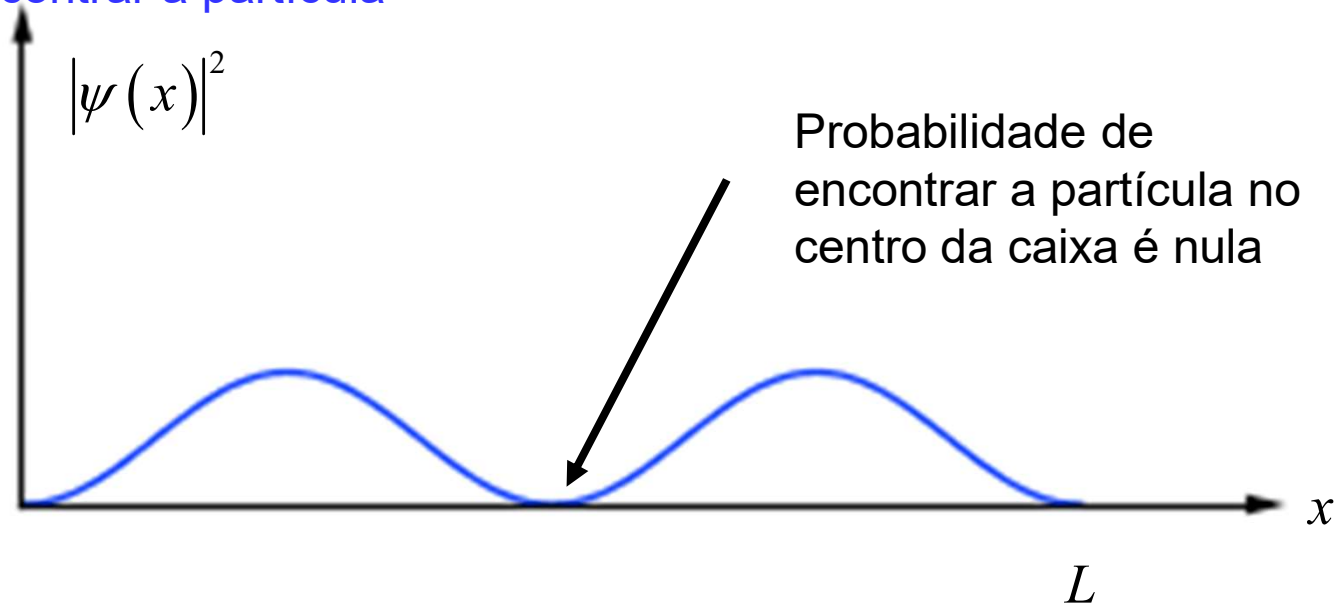
$$E = \frac{p^2}{2m} \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2L}$$

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

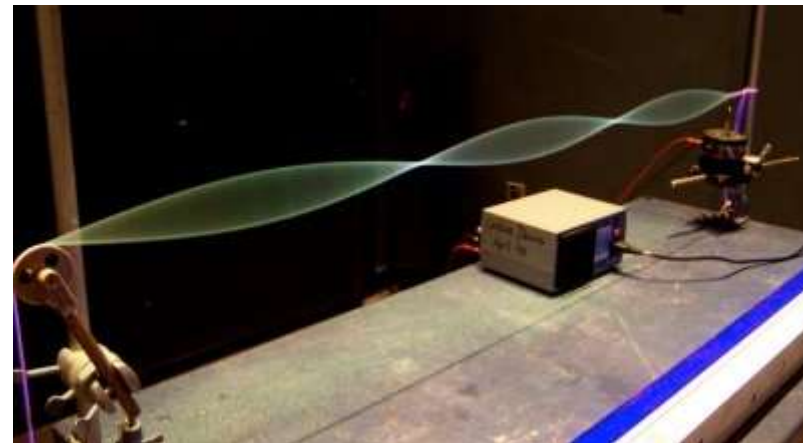
Quanto menor  $\lambda$  (mais nós), maior a energia cinética

# Como é que a partícula salta dum lado ao outro ?

Probabilidade de encontrar a partícula



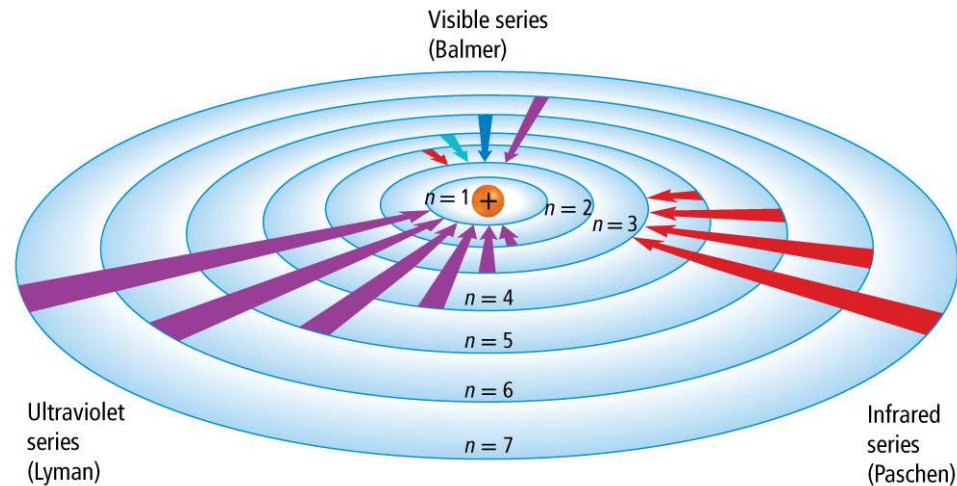
É um caso de interferência destrutiva (entre uma onda que se propaga á direita e outra que se propaga á esquerda)



# Modelo de Bohr para H



Niels Bohr  
1885-1962  
Nobel 1922



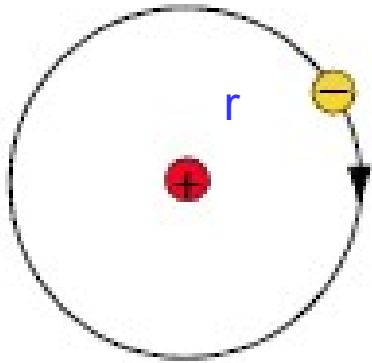
- Elêtrão apenas pode estar encontrado em certas “órbitas” circulares (estados estacionários)
- O momento angular nestas órbitas está quantizada em unidades de  $h/2\pi$
- Ao transitar duma órbita superior á uma órbita inferior o elétrão liberta energia (linhas espectrais)

$$r = \frac{n^2}{Z} a_B \quad a_B \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 53 \text{ pm}$$

$$E_n^H = -\frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} \right) \frac{1}{n^2} \approx -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

# O modelo de Bohr

O modelo de Bohr é uma mistura de conceitos clássicos e quânticos.



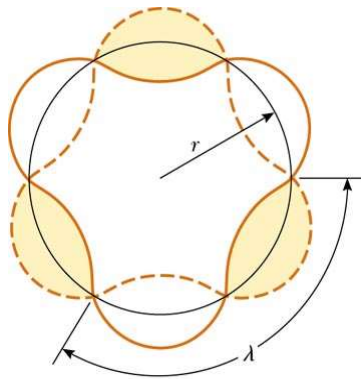
Condição de quantização do momento angular

$$m v_n r_n = n \hbar \quad p = m v_n = \frac{n \hbar}{r_n}$$



$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

No modelo de Bohr  $\Delta r \rightarrow 0$



Mesmo ao invocar o comprimento de deBroglie

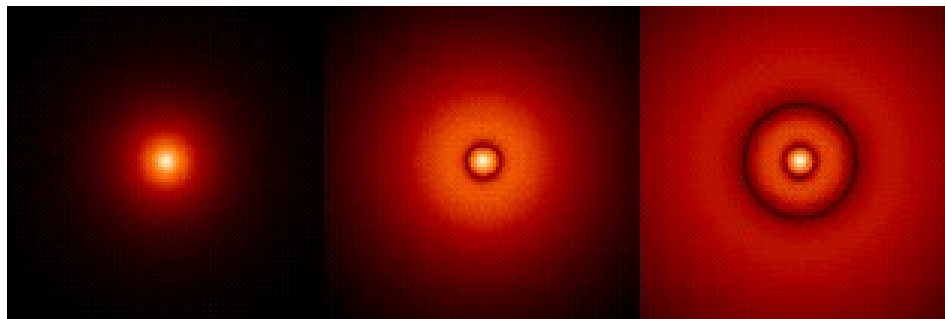
$$\Delta r \approx \lambda \approx \frac{h}{p} \quad \Delta p \geq \frac{\hbar}{2 \Delta r} \approx \frac{p}{4 \pi}$$

# Orbitais em átomos de H

Em vez de orbitais bem definidos, a resolução da equação do Schrödinger resulta em amplitudes de probabilidade,  $\psi$  (como ondas)

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

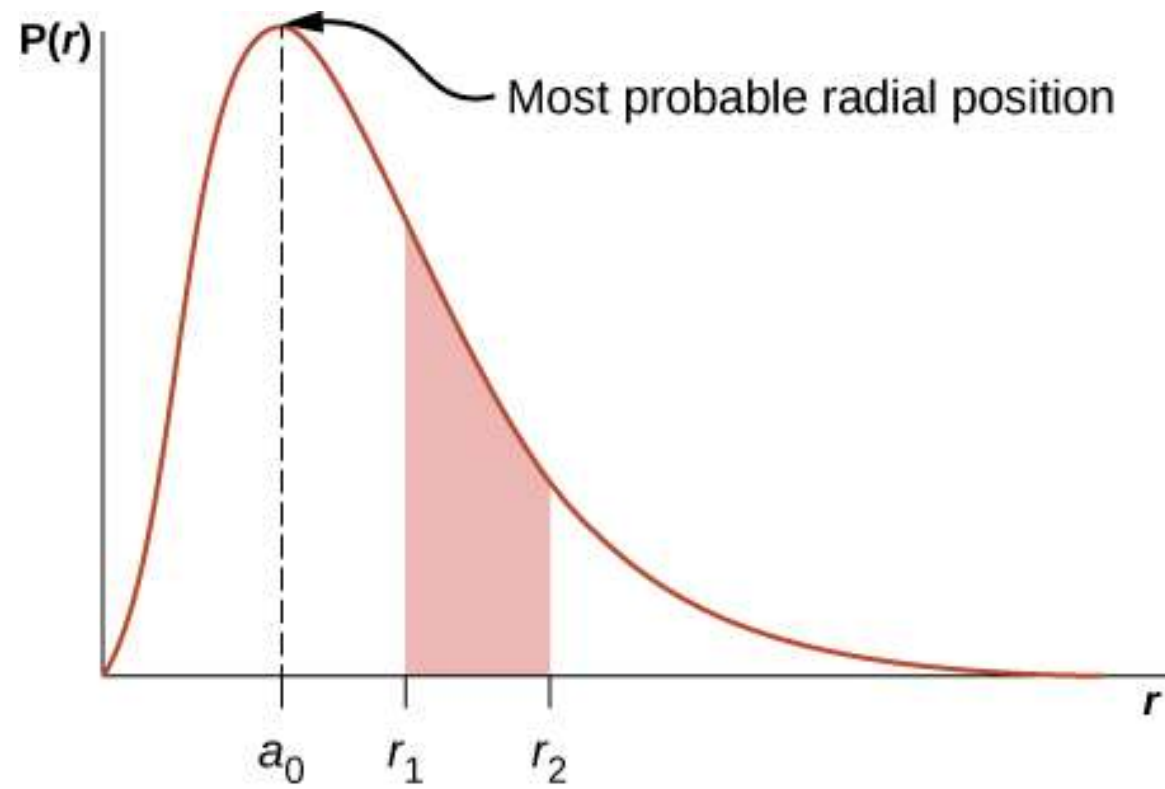
A probabilidade de encontrar o elétron numa certa posição é dado pelo  $|\psi(\vec{r})|^2$



- O modelo de Bohr prevê corretamente os níveis energéticos principais dos átomos com apenas 1 elétron
- A escala das orbitais atômicas também está mais ou menos certa
- Mais a equação de Schrödinger prevê distribuições de probabilidade de encontrar o elétron bem diferentes dos que as orbitas circulares.
- Também a quantização de momento angular acontece numa maneira diferente.

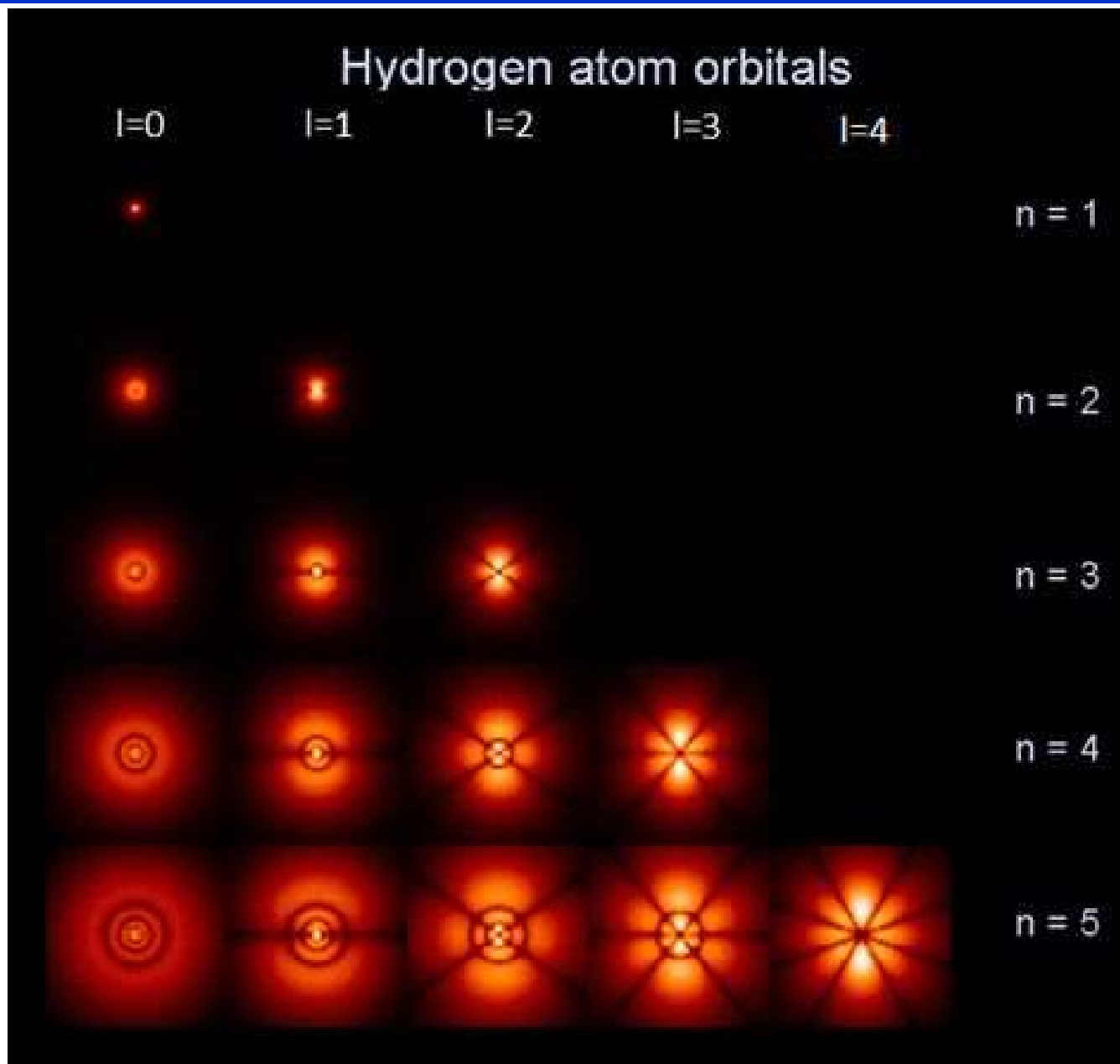
# Estado fundamental

---

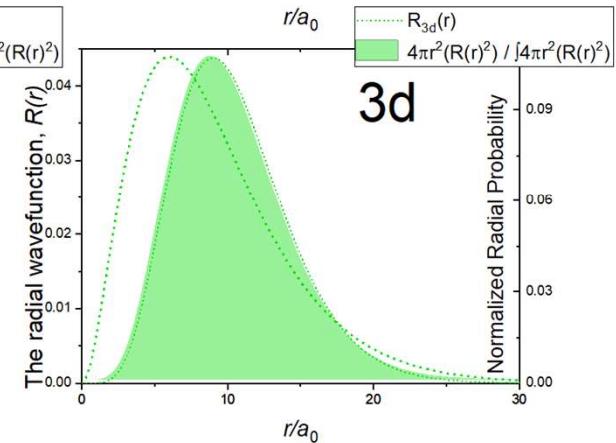
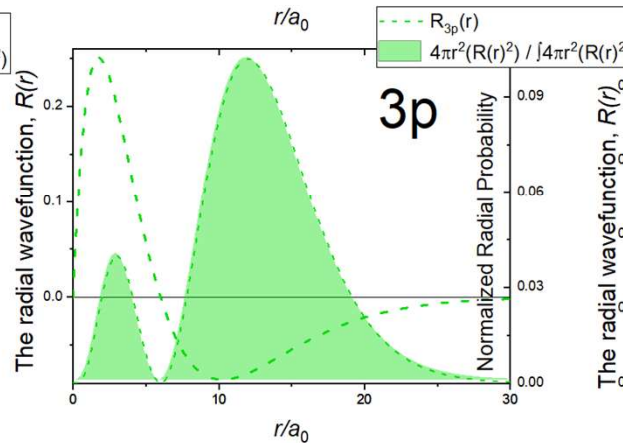
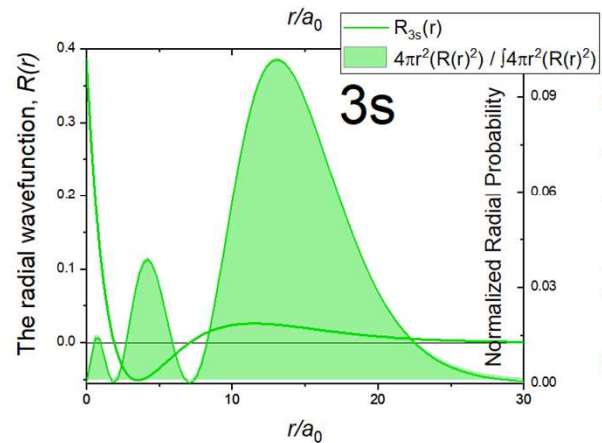
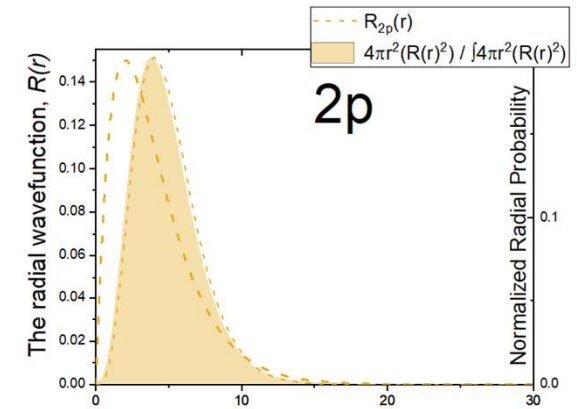
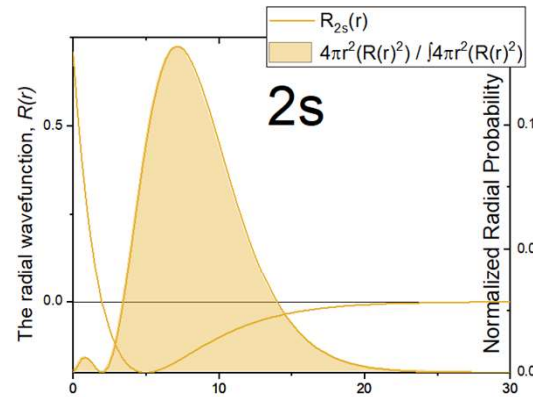
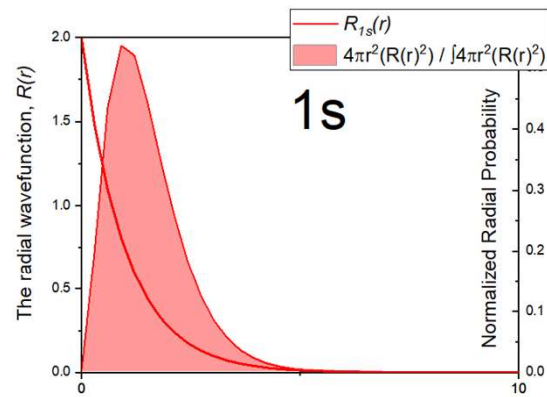
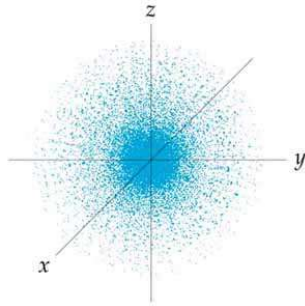




# Alguns membros da familia



# Alguma distribuições de probabilidade radial





## Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States

A. S. Stodolna,<sup>1,\*</sup> A. Rouzée,<sup>1,2</sup> F. Lépine,<sup>3</sup> S. Cohen,<sup>4</sup> F. Robicheaux,<sup>5</sup>  
A. Gijsbertsen,<sup>1</sup> J. H. Jungmann,<sup>1</sup> C. Bordas,<sup>3</sup> and M. J. J. Vrakking<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>*FOM Institute AMOLF, Science Park 104, 1098 XG Amsterdam, Netherlands*

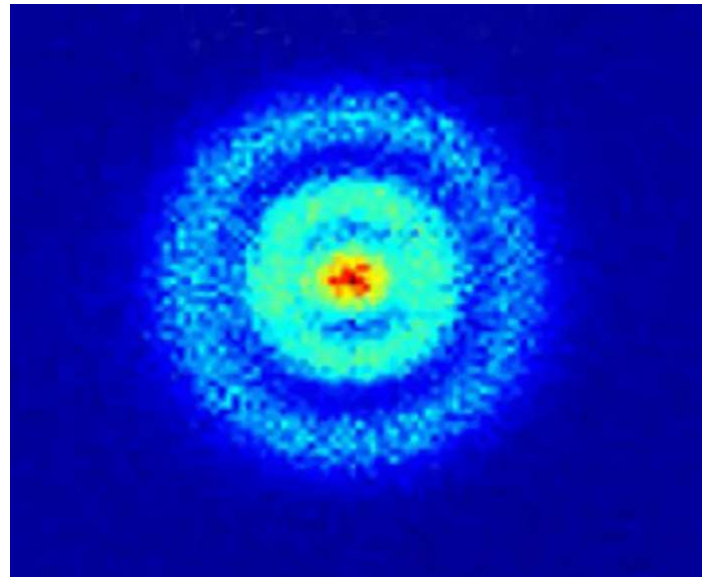
<sup>2</sup>*Max-Born-Institut, Max Born Straße 2A, D-12489 Berlin, Germany*

<sup>3</sup>*Institut Lumière Matière, Université Lyon 1, CNRS, UMR 5306, 10 Rue Ada Byron, 69622 Villeurbanne Cedex, France*

<sup>4</sup>*Atomic and Molecular Physics Laboratory, Physics Department, University of Ioannina, 45110 Ioannina, Greece*

<sup>5</sup>*Department of Physics, Auburn University, Auburn, Alabama 36849, USA*

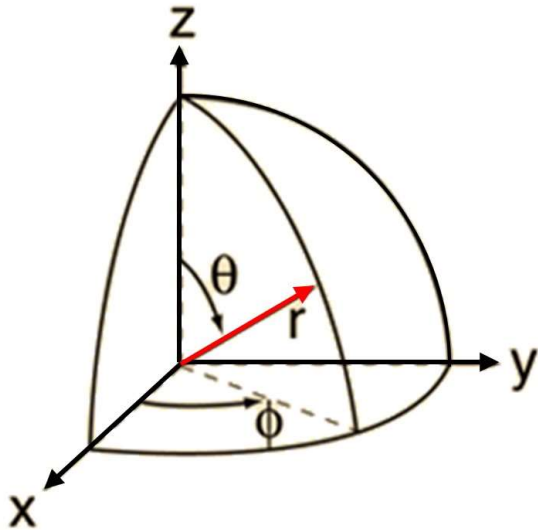
(Received 18 January 2013; revised manuscript received 13 March 2013; published 20 May 2013)



# Quais são estas etiquetas?

---

O átomo de hidrogénio é um sistema 3 dimensional com uma simetria esférica

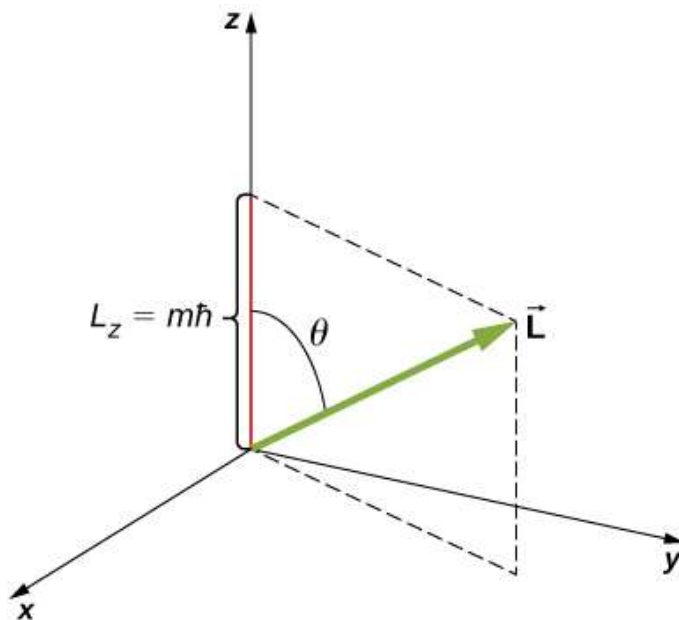


Coordenados esféricas  $r, \theta, \phi$

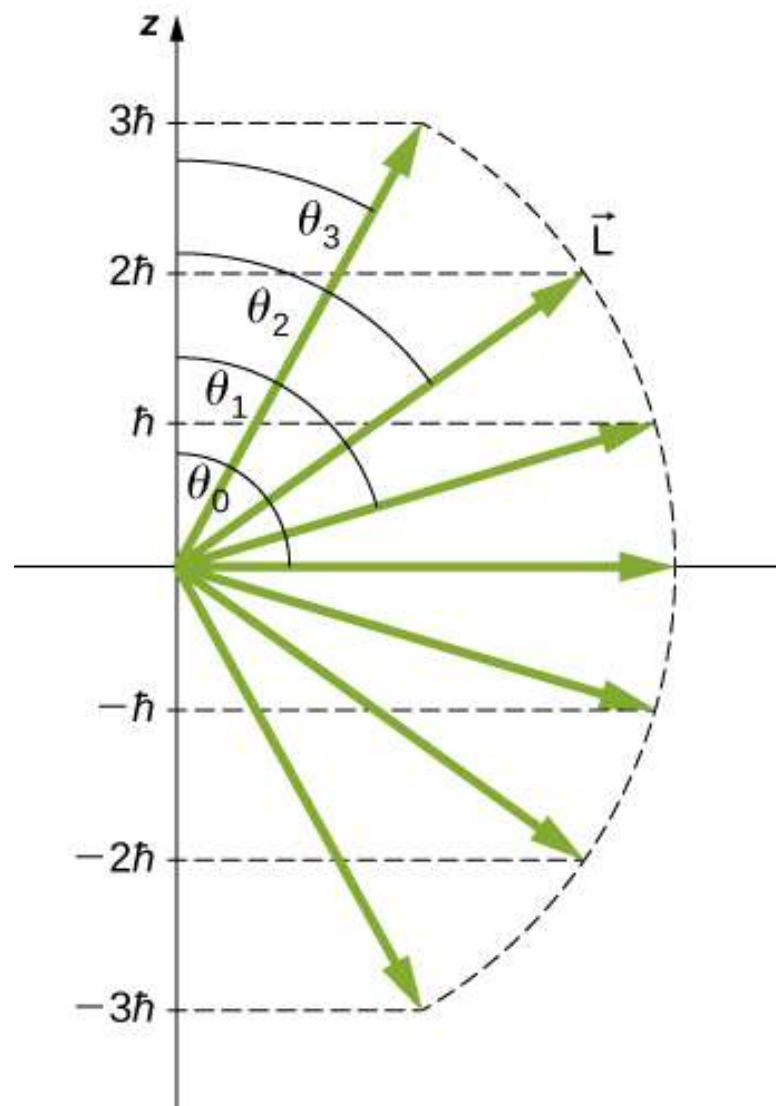
Na descrição quântica dos orbitais de hidrogénio existe 3 números quânticos

- $n$  : o número principal (1,2,3...)  
Determine os níveis energéticos  
Distância radial em média de eletrão do núcleo
- $L$ : o momento angular orbital (0,1,...n-1)  
 $L=0$  - orbital s esfericamente simétrica  
 $L=1$  orbital p  
 $L=2$  orbital d  
 $L=3$  orbital f
- $m_L$  : a projeção do momento angular no eixo dos  $z$   
 $m_L$  : (-L, -L+1,...,1,0,1,...L-1,L)  
Em total são  $2L+1$  valores possíveis

# O momento angular é quantizada

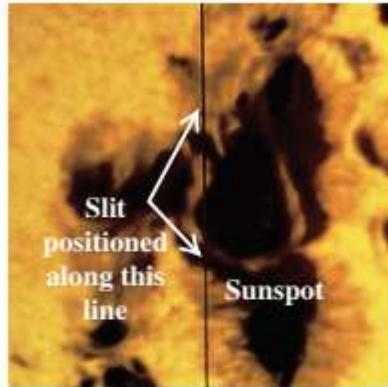


A projeção do momento angular orbital no eixo dos z's assume valores inteiros do constante de Planck  $\hbar$

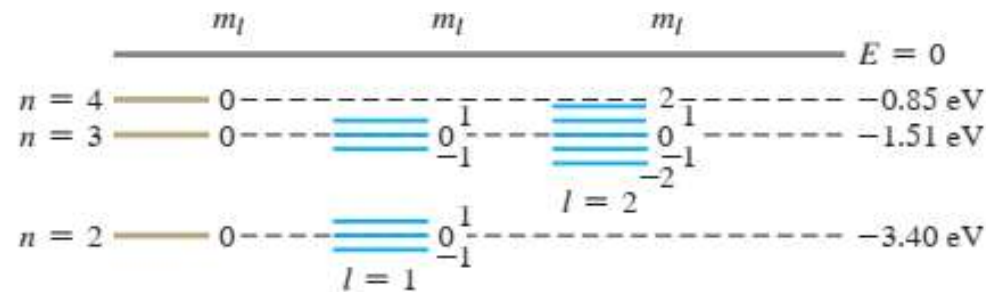


# Evidência para a quantização do momento angular

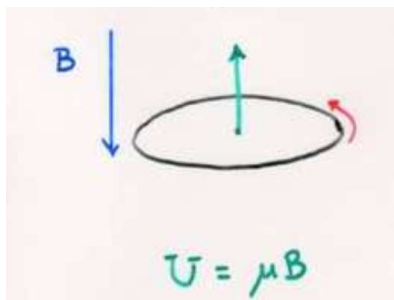
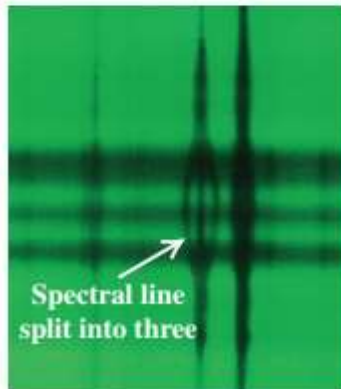
(a)



Espectro numa mancha solar onde existe campo magnéticos fortes



(b)



$$n = 1 \quad l = 0 \quad 0 \quad \text{---} \quad -13.60 \text{ eV}$$

O campo magnético forte desdobra os níveis energéticos.

O momento magnético do eletrão é proporcional ao seu valor m

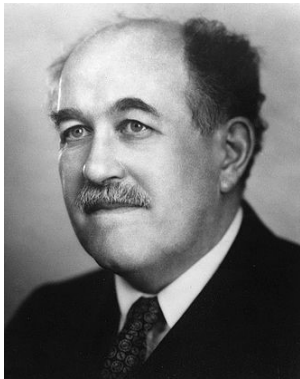
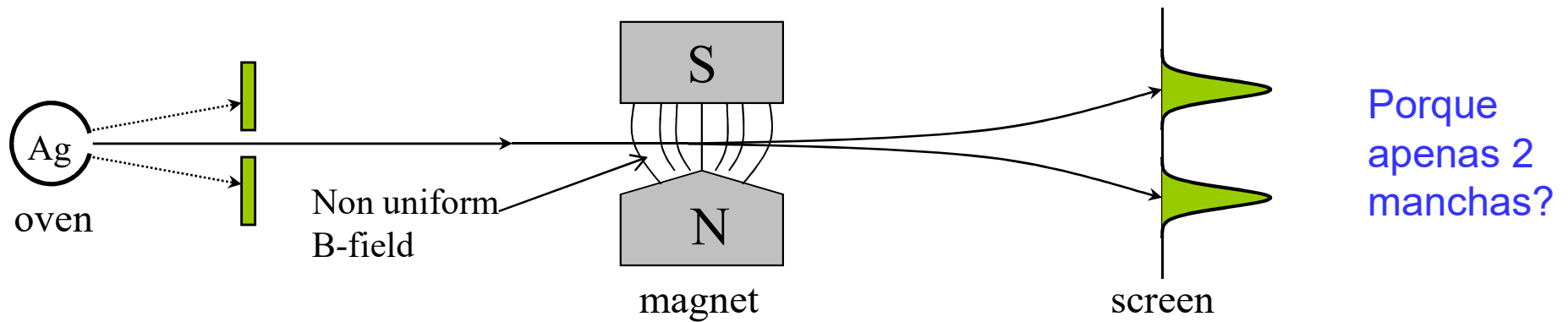


# Experiência Stern Gerlach (1922)

Resultado inesperado

Momento angular orbital é sempre inteiro  $L$

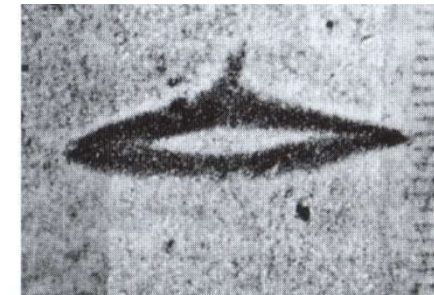
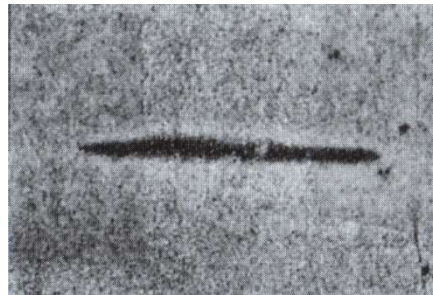
Numero de projeções no eixo do campo ( $2L+1$ ) que é sempre impar



Otto Stern  
(1888 -1969)  
Nobel 1943



Walter Gerlach  
(1889 -1979)  
Nobel 1943

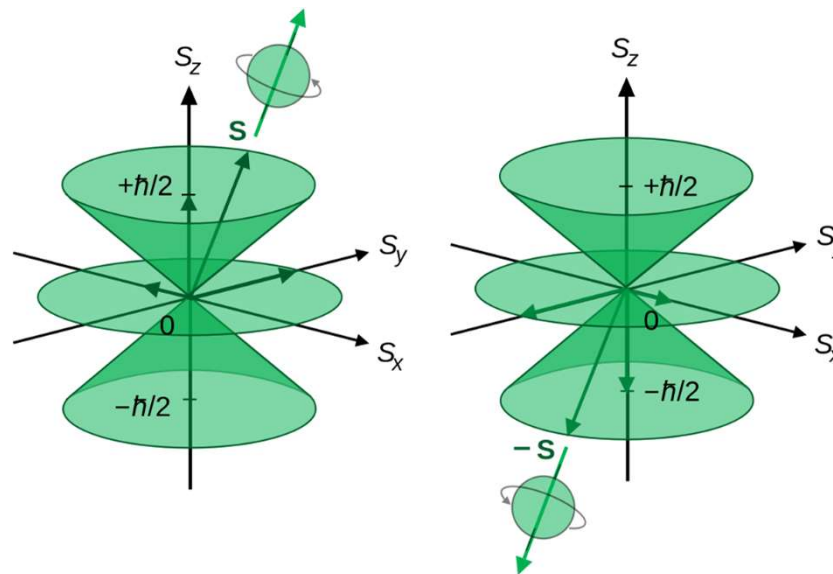


# Spin o 4º número quântico



Wolfgang Pauli  
1900-1958  
Nobel 1945

Momento angular intrínseco com apenas 2 projeções











































$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

**Princípio de exclusão:** partículas com um spin intrínseco igual a  $\frac{1}{2} \hbar$  nunca são encontrados no mesmo estado quântico. É o resultado dum efeito de interferência



# Estrutura da tabela Periódica

Atom	1s	2s	2p			Electron configuration
Li						$1s^2 2s^1$
Be						$1s^2 2s^2$
B						$1s^2 2s^2 2p^1$
C						$1s^2 2s^2 2p^2$
N						$1s^2 2s^2 2p^3$
O						$1s^2 2s^2 2p^4$
F						$1s^2 2s^2 2p^5$
N						$1s^2 2s^2 2p^6$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$L = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m_L = -L, \dots, L$$

$$S_z = \uparrow, \downarrow$$

$$\begin{array}{ll} L = 0 & s \quad m_L = 0 \\ L = 1 & p \quad m_L = -1, 0, 1 \end{array}$$

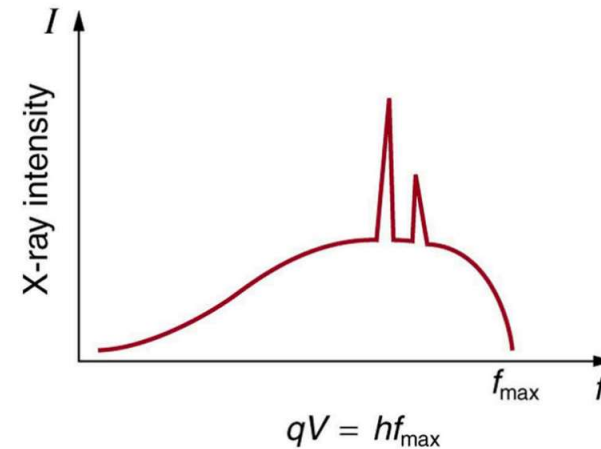
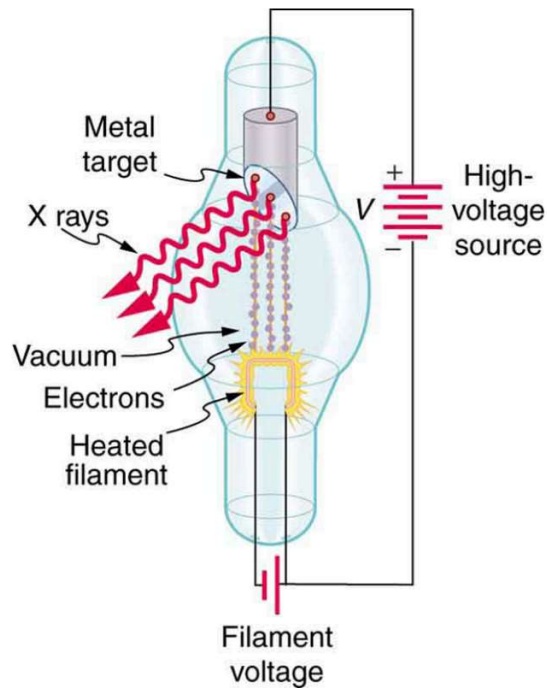
# Tabela Periódica

Periodic Table of the Elements																	
1 IA 1A																	18 VIIIA 8A
1 H Hydrogen 1s <sup>1</sup>	2 He Helium 1s <sup>2</sup>																
3 Li Lithium [He]2s <sup>1</sup>	4 Be Beryllium [He]2s <sup>2</sup>																
11 Na Sodium [Ne]3s <sup>1</sup>	12 Mg Magnesium [Ne]3s <sup>2</sup>	13 Al Aluminum [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	14 Si Silicon [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	15 P Phosphorus [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	16 S Sulfur [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	17 Cl Chlorine [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	18 Ar Argon [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>										
19 K Potassium [Ar]4s <sup>1</sup>	20 Ca Calcium [Ar]4s <sup>2</sup>	21 Sc Scandium [Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	22 Ti Titanium [Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	23 V Vanadium [Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	24 Cr Chromium [Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	25 Mn Manganese [Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	26 Fe Iron [Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	27 Co Cobalt [Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	28 Ni Nickel [Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	29 Cu Copper [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	30 Zn Zinc [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	31 Ga Gallium [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	32 Ge Germanium [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	33 As Arsenic [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	34 Se Selenium [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	35 Br Bromine [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	36 Kr Krypton [Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>
37 Rb Rubidium [Kr]5s <sup>1</sup>	38 Sr Strontium [Kr]5s <sup>2</sup>	39 Y Yttrium [Kr]4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	40 Zr Zirconium [Kr]4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	41 Nb Niobium [Kr]4d <sup>4</sup> 5s <sup>1</sup>	42 Mo Molybdenum [Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	43 Tc Technetium [Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	44 Ru Ruthenium [Kr]4d <sup>6</sup> 5s <sup>1</sup>	45 Rh Rhodium [Kr]4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	46 Pd Palladium [Kr]4d <sup>10</sup>	47 Ag Silver [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	48 Cd Cadmium [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	49 In Indium [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	50 Sn Tin [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	51 Sb Antimony [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	52 Te Tellurium [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	53 I Iodine [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	54 Xe Xenon [Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>
55 Cs Cesium [Xe]6s <sup>1</sup>	56 Ba Barium [Xe]6s <sup>2</sup>	57-71 Lanthanide Series	72 Hf Hafnium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	73 Ta Tantalum [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	74 W Tungsten [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	75 Re Rhenium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	76 Os Osmium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	77 Ir Iridium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	78 Pt Platinum [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s <sup>1</sup>	79 Au Gold [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>	80 Hg Mercury [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	81 Tl Thallium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	82 Pb Lead [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	83 Bi Bismuth [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	84 Po Polonium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	85 At Astatine [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	86 Rn Radon [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>
87 Fr Francium [Rn]7s <sup>1</sup>	88 Ra Radium [Rn]7s <sup>2</sup>	89-103 Actinide Series	104 Rf Rutherfordium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	105 Db Dubnium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>3</sup> 7s <sup>2</sup>	106 Sg Seaborgium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>4</sup> 7s <sup>2</sup>	107 Bh Bohrium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>5</sup> 7s <sup>2</sup>	108 Hs Hassium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	109 Mt Meitnerium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	110 Ds Darmstadtium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>8</sup> 7s <sup>2</sup>	111 Rg Roentgenium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	112 Cn Copernicium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	113 Uut Ununtrium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>1</sup>	114 Fl Flerovium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>2</sup>	115 Uup Ununpentium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>3</sup>	116 Lv Livermorium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>4</sup>	117 Uus Ununseptium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>5</sup>	118 Uuo Ununoctium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>6</sup>

Configurations denoted with \* are unknown and the listed values are predicted.

Lanthanide Series	57 La Lanthanum [Xe]5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	58 Ce Cerium [Xe]4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	59 Pr Praseodymium [Xe]4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	60 Nd Neodymium [Xe]4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	61 Pm Promethium [Xe]4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	62 Sm Samarium [Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	63 Eu Europium [Xe]4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	64 Gd Gadolinium [Xe]4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	65 Tb Terbium [Xe]4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	66 Dy Dysprosium [Xe]4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	67 Ho Holmium [Xe]4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	68 Er Erbium [Xe]4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>	69 Tm Thulium [Xe]4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>	70 Yb Ytterbium [Xe]4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>	71 Lu Lutetium [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>
Actinide Series	89 Ac Actinium [Rn]6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	90 Th Thorium [Rn]6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	91 Pa Protactinium [Rn]5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	92 U Uranium [Rn]5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	93 Np Neptunium [Rn]5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	94 Pu Plutonium [Rn]5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	95 Am Americium [Rn]5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	96 Cm Curium [Rn]5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	97 Bk Berkelium [Rn]5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	98 Cf Californium [Rn]5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	99 Es Einsteinium [Rn]5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup>	100 Fm Fermium [Rn]5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup>	101 Md Mendelevium [Rn]5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup>	102 No Nobelium [Rn]5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup>	103 Lr Lawrencium [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>

# Produção de Raios X



Picos no espectro corresponde a energia libertada por um elétron excitado que transita para um nível inferior

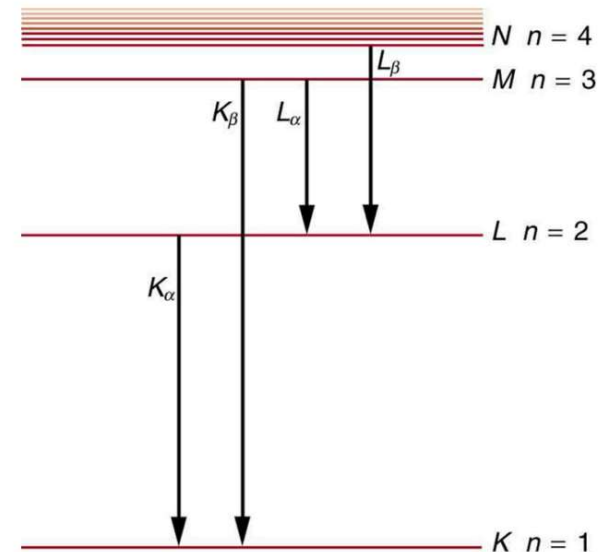
Se Tungsténio ( $Z=74$ ) fosse ionizado até haver apenas 1 elétron, o modelo de Bohr dá para as energias

$$E_n^Z = -\frac{Z^2}{n^2}(13.6\text{eV})$$

$$E_2^{Z=74} \approx -17.6\text{keV}$$

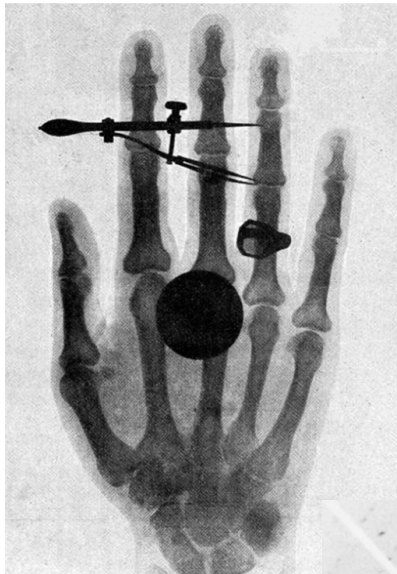
$$E_1^{Z=74} \approx -70.5\text{keV}$$

$$\Delta E \approx 53\text{keV} \quad \lambda \approx 20\text{pm}$$

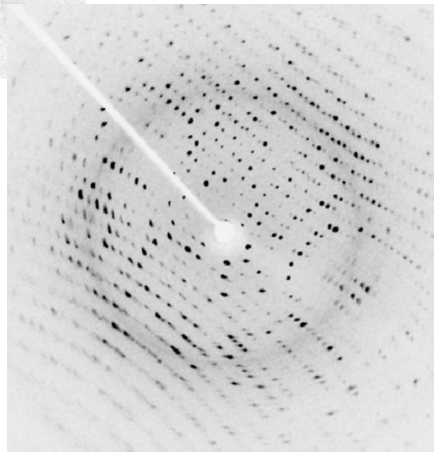


# Aplicações de Raios X

A radiação dos raios X passam facilmente através materiais com átomos leves (H,C,N,O), mas são absorvidos pelas materiais feitos dos átomos mais pesados



Mão de Sra.  
Röntgen



Padrão de difração – estrutura cristalina  
proteína

