

AT#03: Noções da Física Moderna

Bartolomeu Joaquim Ubisse

Instituto Superior de Ciências de Saúde (ISCISA)

(Aulas preparadas para estudantes de Radiologia)

21 de Fevereiro de 2022

1 Modelos atômicos - Estrutura do átomo

- Modelo de Dalton
- Modelo de Thomson
- Modelo de Rutherford
- Modelo atômico de Bohr

2 Noções da Mecânica Quântica

- Radiação do corpo negro
- Efeito fotoelétrico
- Efeito Compton

3 Função de Onda

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

A matéria que compõe a natureza é composta por átomos e, a sua diversificação resulta do tipo de átomos que a compõe e os seus rearranjos.

Átomos são partículas infinitamente pequenas que constituem toda a matéria do universo.

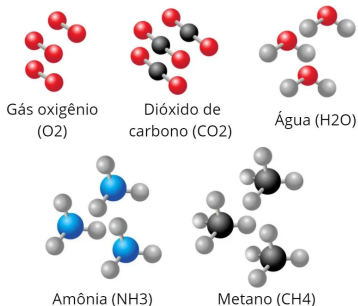


Figura 1: Alguns rearranjos atômicos [Fonte: [<url>](#) . Acesso em 31/10/2021]

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

O que são modelos em Ciência?



Figura 2: Desenhos de uma árvore

Cada desenho dá uma ideia de árvore baseando-se nas observações de quem fez o desenho. Deste modo, pode-se notar que o último desenho parece dar mais detalhes da árvore, porém, nunca passa de desenho para árvore concreta que se possa pegar e obter frutos.

Assim, modelo é algo que permite ter uma ideia do algo, explicar a sua natureza, estrutura e fazer previsões. Um modelo pode sofrer modificações consoante as novas observações que o anterior pode não contemplar.

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Dalton (1766-1844)

O Homem também na sequência das suas observações experimentais, foi desenhando vários modelos do átomo convista a explicar o que ia observando e em seguida fazer previções. Para a nossa consideração, importa os modelos de **Dalton**, **Thomson**, **Rutherford** e **Bohr**.

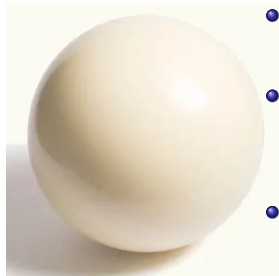


Figura 3: Modelo atômico de Dalton

- Todas as substâncias são formadas de pequenas partículas chamadas átomos;
- Todos os átomos de um determinado elemento são idênticos entre si e de \neq elementos são \neq s entre si. A \neq está nas suas massas relativas;
- Os átomos não se alteram quando formam compostos químicos;
- Os átomos são permanentes e indivisíveis e não podem ser criados ou destruídos. A reacção química só altera o rearranjo dos átomos.

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Dalton (1766-1844)

1 Contribuições importantes:

- Explicou como eram os átomos e como é que se combinavam
- Propôs a regra de máxima simplicidade - a natureza favorecia a formação de átomos compostos - binários.- Postulou a lei das proporções multiplas que ditava a ordem natural da formação de átomos compostos.

2 Limitações:

- A regra de máxima simplicidade admitia a relação de 1:1 e, por essa razão a água devia ser HO e a amónia seria NH o que não é correcto hoje.
- Dalton não contepla a natureza eléctrica da matéria

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Thomson (1856 - 1940)

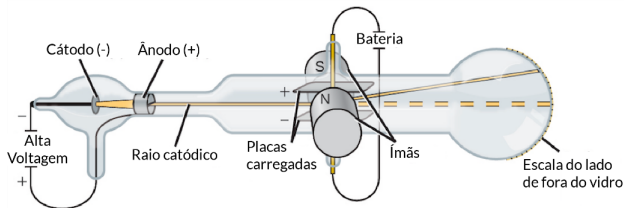


Figura 4: Tubos de raios catódicos



Figura 5: Modelo atômico de Thomson

Raios catódicos são desviados pelo campo elétrico assim como pelo campo magnético.

Como os raios catódicos carregam uma carga negativa e são defletidos pela placa positiva na grelha, então eles são cargas elétricas negativas carregadas pelas partículas da matéria \rightsquigarrow Descobre-se elétrons

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Thomson (1856 - 1940)

Determinação de q/m

Dado que se está perante dois campos (eléctrico e magnético), os dois são ajustados de modo que o raio catódico não seja deflectida e, nesta situação $F_m = F_e$. A relação carga-massa é:

$$\frac{q}{m} = \frac{1}{2} \frac{E^2}{VB^2} \quad (1)$$

Onde, V é a diferença de potencial em Volts, E é a intensidade do campo eléctrico em N/C e B é a intensidade da indução magnética em Wb/m^2

Conhecendo-se as magnitudes de todos parâmetros do segundo membro da Eq.1, Thomson obteve o valor da relação q/m como sendo:

$$\frac{q}{m} = 1.76 \times 10^8 C/g$$

Com este resultado e conhecendo-se o valor da carga elementar (E foi inicialmente calculado por Millikan) através da fórmula da carga elementar

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Thomson (1856 - 1940)

① Contribuições importantes:

- Thomson descobre a existência de electrão.
- O átomo é constituído de electrões que giram em círculos imersos em uma bolha esférica de uma substância carregada positivamente. O átomo é electroneútro

② Limitações:

- O modelo de Thomson não consegue explicar a estabilidade do átomo;
- Não faz menção à existência do núcleo, pelo que, não consegue explicar o fenómeno de espalhamento que algumas partículas carregadas sofrem ao colidirem com átomos.

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Rutherford (1871 - 1937)

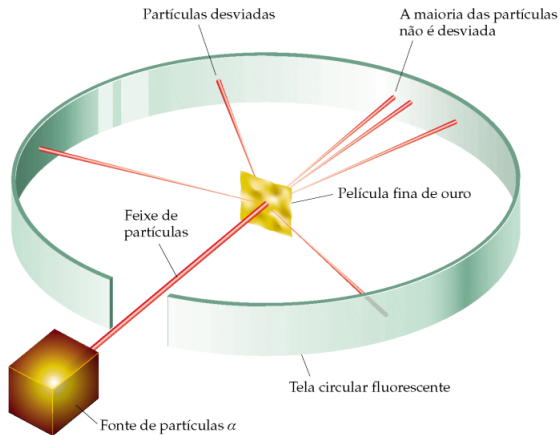


Figura 6: Experimento de Rutherford (Geiger & Marsden)

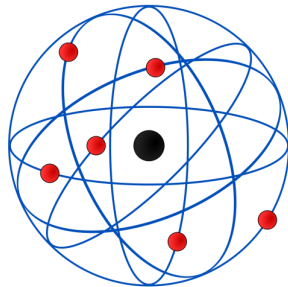


Figura 7: Modelo atômico de Rutherford

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Rutherford (1871 - 1937)

Contribuições e limitações do Modelo de Rutherford

1 Contribuições importantes:

- O átomo consiste em um núcleo muito pequeno, positivamente carregado e rodeado por uma nuvem de electrões;
- A massa do átomo é concentrada no núcleo

2 Limitações:

- Os electrões giram em orbitas circulares entorno do núcleo e, estes circulam a uma grande velocidade \rightsquigarrow Isso faria com que irradiasse uma certa energia e, por conseguinte, electrão pudesse cair no núcleo.
- O núcleo do modelo de Rutherford era somente constituído por partículas positivas.

Em 1912, James Chadwick, aluno de Rutherford, descobre os neutrões e validou a hipótese de Rutherford na qual a maior massa está no núcleo. De acordo com James, os neutrões possuem uma massa relativamente maior que os protões.

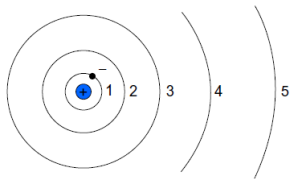
Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Bohr

Bohr resolveu a questão da instabilidade do modelo atômico de Rutherford impondo as seguintes regras de quantização:

- Os electrões deslocam-se em orbitas circulares nos quais o momento angular L é múltiplo inteiro da constante \hbar

$$L = mvr_n = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$



$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m k Z e^2} \quad (3)$$

Considerando-se a primeira órbita ($n=1$) do átomo de Hidrogénio ($Z=1$)

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m k e^2} = 0.529 \times 10^{-10} m = 0.529 \text{ \AA}$$

$r_1 \rightsquigarrow$ Raio de Bohr

Figura 8: Modelo atômico de Bohr

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Bohr

- Os electrões, ao se deslocarem nas suas órbitas, chamadas estacionárias, embora estejam animados de um movimento acelerado e periódico, não irradiam energia (radiação electromagnética);

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}m_e v^2 - k \frac{Ze^2}{r_n}$$
$$E_n = -\frac{m_e k^2 e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{Z^2}{n^2} \right) \quad (4)$$

Para o átomo de Hidrogénio, $n = Z = 1$:

$$E_1 = -13.58 \text{ eV} \quad (5)$$

Esta é a energia do estado mais baixo do átomo de Hidrogénio (Energia do estado fundamental).

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Bohr

Assim, para qualquer outro nível:

$$E_n = E_1 \left(\frac{1}{n^2} \right) \quad (6)$$

- Quando o electrão passa de uma órbita para a outra, irradia-se ou absorve-se uma quantidade de energia $\hbar\omega$ igual à diferença das energias das duas órbitas e/ou níveis.

$$\hbar\omega = E_f - E_i \Rightarrow \omega = \frac{E_1}{\hbar} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (7)$$

onde ω é a frequência angular ($\omega = 2\pi f$) do fotão absorvido ou emitido, dependendo da ordem dos níveis de transição.

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Bohr

Os postulados de Bohr para o átomo de Hidrogénio estão em consonância com os resultados experimentais do espectro óptico do mesmo átomo descritos pela fórmula de **Rydberg**.

Considerando o número de onda ($\bar{\nu} = \frac{c}{\lambda} = \frac{1}{\lambda}$), pode-se escrever:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (8)$$

onde, $R_H = \frac{mk^2e^4}{4\pi c\hbar^3}$ é a constante de Rydberg
($R_H = 1.09681 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$) e c é a velocidade da luz no vácuo.

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Bohr

Séries de espectro do átomo de Hidrogénio

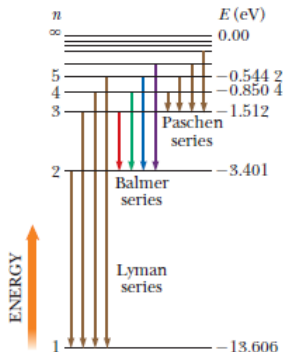


Figura 9: Séries de espectro do átomo de Hidrogénio []

Tabela 1: Séries de emissão do átomo de Hidrogénio [Podgoršak,2009]

Série	Faixa	Órbita final	limite da série (\AA)
Lyman	UV	1	911
Balmer	Visível	2	3646
Paschen	IR	3	8210
Brackett	IR	4	14584
Pfund	IR	5	22957

Modelos atômicos - Estrutura do átomo

Modelo de Bohr

Contribuição e limitações do modelo de Bohr

① Contribuições:

- Explica a estabilidade dos átomos assumindo a ideia de quantização;
- Explica adequadamente o espectro de linhas do átomo de hidrogênio

② Limitações:

- Não explica o porquê de não emissão de radiação pelos electrões ao se deslocarem nas suas orbitas (orbitas estacionárias);
- Não explica porque é que o electrão permanece em um nível energético correspondente ao estado excitado por um período de tempo antes de regressar ao seu estado fundamental. *Qual é o mecanismo físico que o faz esperar no estado excitado?*
- O modelo de Bohr estabelece o número máximo de electrões em cada nível a $2n^2$. Porém, este limite só funciona para alguns átomos como, por exemplo, ${}^4_2\text{He}$ e ${}_3\text{Li}$ e não para átomos mais complexos.

Estas limitações e mais, levaram ao surgimento da mecânica quântica!

Noções da Mecânica Quântica

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

As primeiras ideias da teoria quântica surgiram com Max Planck, na tentativa de explicar a natureza da radiação emitida pelos corpos sólidos aquecidos.

De acordo com a teoria clássica, a radiação emitida pelo corpo sólido aquecido devia-se ao movimento acelerado das partículas carregadas nas superfícies desses corpos. Assim, dado que $\lambda = \frac{c}{f}$ esperar-se-ia que quando $\lambda \rightarrow 0$, $f \rightarrow \infty$. Porém, isto não se observa em caso da radiação emitida por um corpo negro.

Em 1893, **Wien** apresentou uma lei exponencial sobre a energia por unidade de volume por frequência da radiação emitida em uma cavidade do corpo negro:

$$u(f, T) = A f^3 e^{-\beta f/T} \quad (9)$$

onde A e β são constantes

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

A lei de Wien foi confirmada experimentalmente por Friedrich Paschen para uma faixa da radiação **IR** de **1 a 4 μm** e para temperaturas de **400 a 1600 K**.

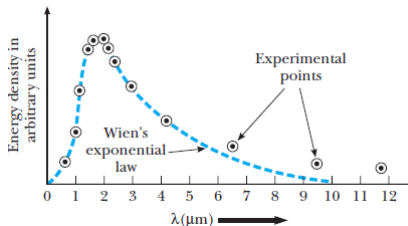


Figura 10: Curva de ajuste da lei de Wien em dados experimentais de um corpo negro a 1500 K (Serway *et al.*, 2005)

Mas tarde, com os trabalhos de Lummer e Pringsheim (para λ até 18 μm) e Rubens e Kurlbaum (para λ até 60 μm), verificou-se que a lei de Wien já não estava em consonância com os dados experimentais.

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

Em Outubro de 1900, Max Planck apresentou o modelo para o corpo negro, introduzindo para tal, parâmetros de natureza quântica

$$u(f, T) = \frac{8\pi h f^3}{c^3} \left(\frac{1}{e^{hf/k_B T} - 1} \right) \quad (10)$$

onde h é a constante de Planck ($h = 6.626 \times 10^{-34}$ J.s) e k_B é constante de Boltzmann ($k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J.K⁻¹)

A expressão de Planck pode ser analisada tendo em consideração e expansão em série de Taylor:

- Para altas frequências, i.é., $hf/k_B T \gg 1$:

$$\frac{1}{e^{hf/k_B T} - 1} \approx e^{-hf/k_B T}$$

- Para baixas frequências, i.é., $hf/k_B T \ll 1$:

$$\frac{1}{e^{hf/k_B T} - 1} \approx \frac{k_B T}{hf}$$

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

Assim, para baixas frequências, $u(f, T) \sim T$ e corresponde a região clássica. Para altas frequências (menor λ), a teoria clássica é completamente desfasada conforme a Fig.11

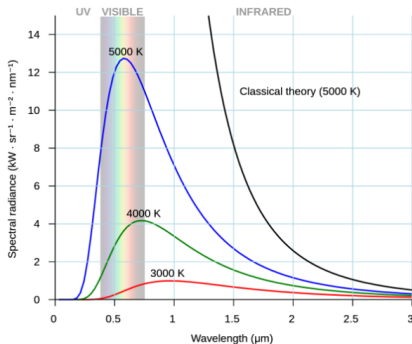


Figura 11: Densidade espectral do corpo negro

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

Tanto para a lei de Wien quanto a expressão de Planck, A radiação emitida pelo corpo negro depende só da temperatura das paredes da sua cavidade.

O deslocamento dos picos das curvas espectrais são dadas pela lei do deslocamento de **Wien**:

$$\lambda_{max}T = 0.2898 \times 10^{-2} \text{ mK} \quad (12)$$

Exemplo 1

A temperatura da pele do corpo humano é aproximadamente 35°. Qual é o pico da radiação emitida por essa pessoa?

$$\lambda_{max} = \frac{0.2898 \times 10^{-2} \text{ mK}}{308.15 \text{ K}} = 9.40 \text{ } \mu\text{m} \text{ (radiação infra-vermelha !)}$$

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

Com que base Planck desenvolveu o seu modelo sobre a radiação do corpo negro ?

Planck pensava que a radiação emitida pelo corpo negro era devido à vibração dos ressonadores (partículas carregadas microscópicas).

Considerando a teoria clássica de Maxwell, um oscilador com frequência f podia ter qualquer valor de energia e podia variar continuamente a sua amplitude à medida que fosse emitindo uma radiação, resultando deste modo, em redução de uma fracção da sua energia.

Assim, Planck assumiu que, para que esteja de acordo com dados experimentais, a energia total de um ressonador só pode ser um múltiplo inteiro de hf , isto é,

$$E = nhf \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

Radiação do corpo negro e teoria quântica da luz

Ainda mais, Planck concluiu que a emissão de uma radiação ocorria quando o ressonador passava do nível de maior energia para o de menor e, ao irradiar, não pode perder a sua energia total mas sim, uma quantidade finita hf , o que foi chamado de **quantum da energia**.

$$\Delta E = hf \quad (14)$$

Energia emitida por unidade de área - Lei de Stefan-Boltzmann

$$E = \int_0^{\infty} u(f, T) df \quad (15a)$$

$$E = \left(\frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3} \right) T^4 \Rightarrow E = \sigma T^4 \quad (15b)$$

onde $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$ é a constante de Boltzmann.

Efeito fotoelétrico e dispersão de Compton

O efeito fotoelétrico consiste na emissão de electrões (fotoelectrões) por um metal, geralmente metálico, quando sobre ele incide uma radiação electromagnética (Fig.12). Este efeito foi descoberto em 1887 pelo Heinrich Hertz.

Será que qualquer radiação pode resultar em efeito fotoelétrico ?

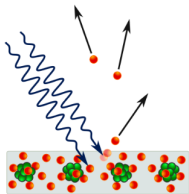


Figura 12: Efeito fotoelétrico

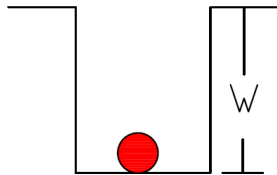


Figura 13:

- Para que haja efeito fotoelétrico, a radiação incidente deve ter energia igual ou superior à função trabalho " ϕ " (ϕ - depende de cada material e do seu grau de acabamento).

Efeito fotoelétrico e dispersão de Compton

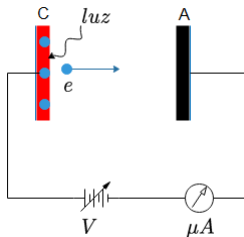


Figura 14:

Lenard (1902), verificou que o número de electrões que atingem a placa **A** decresce à medida que V cresce. Isto significa que só electrões com energia $\frac{1}{2}mv^2 > eV$ conseguem chegar a placa **A**. Assim, existe um potencial de frenagem V_o para o qual nenhum electrão chega à placa **A**:

$$eV_o = \left(\frac{1}{2}mv^2 \right)_{max} \quad (16)$$

Por outro lado, se invertermos a polarização no circuito da Fig.14, verifica-se que uma vez os electrões emitidos, todos chegam à placa **A** e a corrente decorrente desse fluxo de electrões não depende da Voltagem (V).

De que depende o potencial de frenagem ?

Efeito fotoelétrico e dispersão de Compton

- V_o depende do tipo de material e do seu grau de acabamento;
- V_o é independente da intensidade da radiação incidente
- V_o depende da frequência da radiação incidente.

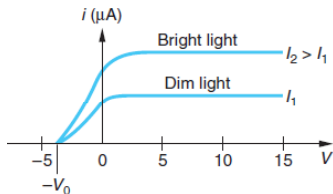


Figura 15:

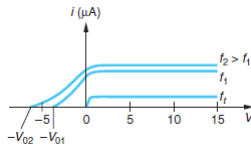


Figura 16:

O que é surpreendente nisso tudo ?

Baseando-se na visão onduatória clássica, esperava-se que com o aumento da intensidade luminosa, os electrões absorvessem maior energia e, por conseguinte, a sua energia cinética máxima também fosse maior.

Efeito fotoelétrico e dispersão de Compton

Ainda mais, baseando-se na mesma teoria ondulatória clássica, o tempo entre a absorção da energia e a emissão do electrão pelo material devia ser um tempo considerável (~ 5 horas, segundo Rayleigh). Porém, experiências mostram que o referido tempo é muito menor, pelo que, a teoria ondulatória não é apropriada para explicar o fenómeno do efeito fotoelétrico.

Qual é a teoria que melhor explica o efeito fotoelétrico?

Em 1905, Einstein demonstrou que o efeito fotoelétrico poderia ser explicado da seguinte maneira:

- A energia luminosa não é distribuída continuamente no espaço, mas sim em pequenos pulsos cada qual denominado de fotão como estipulado pelo Planck.
- Um electrão emitido de uma superfície metálica exposta à luz, recebeu a energia correspondente a um único fotão;

Efeito fotoelétrico e dispersão de Compton

- Quando a intensidade da luz de uma certa frequência for aumentada, maior será o número de fótons que atingirão a superfície por unidade de tempo, porém, a energia absorvida por um electrão é imutável (fixa)

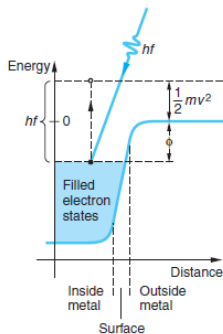


Figura 17:

$$eV_o = \left(\frac{1}{2}mv^2 \right)_{max} = hf - \phi \quad (17)$$

onde ϕ é função trabalho e representa a quantidade de trabalho necessário para retirar o electrão da superfície.

Definindo-se a frequência de corte f_o , i.,é., o valor limite da frequência para o qual ainda existe a emissão de electrões (considera-se $E_{c_{max}} \approx 0$):

$$f_o = \frac{\phi}{h} \quad (18)$$

Efeito Compton

Em 1922, Arthur Holly Compton observou um fenómeno que a teoria ondulatória clássica não conseguia explicar.

Compton fez incidir um feixe de raios-x monocromático sobre em vários materiais e observou que ocorria um espalhamento no qual os raios-x espalhados tinham uma menor energia em relação aos incidentes.

Para se explicar o que teria absorvido parte dessa energia, percebeu-se que só seria possível se os raios-x fossem considerados como um conjunto de partículas (fotóns) que colidissem com **electrões livres**¹.

Considerando a conservação do momento e da energia, o comprimento de onda do fotão após a colisão (λ') é:

$$\lambda' = \lambda_o + \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (19)$$

¹O electrão é considerado livre porque a energia de raios-x é muito maior que a energia de ligação de um electrão no átomo

Efeito Compton

A quantidade $h/m_e c$ tem unidades de comprimento e é denominado de comprimento de onda de Compton para o electrão (λ_c):

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 0.00243 \text{ nm}$$

A variação Compton ($\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_o$), como descrito pela Eq.19, varia só com o ângulo através do qual se detecta a radiação espalhada.

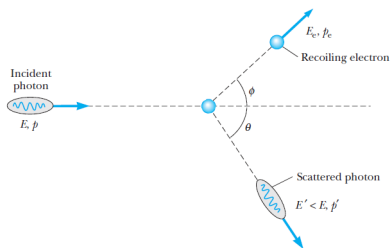


Figura 18:

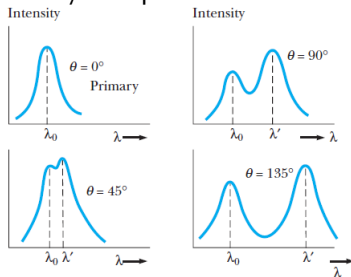


Figura 19:

Efeito Compton

Tanto o efeito fotoelétrico quanto o efeito Compton assim como a produção de pares electrão-positrão, correspondem aos fenómenos que ocorrem quando a radiação electromagnética interagem com a matéria.

O efeito Compton é mais uma demonstração inequívoca de que a luz não pode ser explicada meramente como um fenómeno ondulatório mas também como um conjunto de partículas cuja energia é proporcional à frequência.

O efeito Compton ocorre para todos os materiais, principalmente quando sobre eles incide uma radiação de energia média (0.5 e 3.5 MeV)

Cosiderando-se a unidade da constante de planck:

$$[h] = \frac{[E]}{[f]} = \frac{ML^2T^{-2}}{T^{-1}} = L (MLT^{-1}) \Rightarrow [h] = [r][p]$$

Assim, a constante de Planck tem unidades de momento angular

Efeito Compton

Suponhamos que temos uma partícula de massa "m", então podemos associá-la com uma distância "r" dada por $\frac{h}{p}$.

Se a partícula estiver em repouso, a tal distância fica: $\frac{h}{mc}$ que é o comprimento de onda de Compton

Resumindo: Associamos o comprimento de onda com qualquer partícula com uma determinada massa. Assim, se sob uma partícula fizermos incidir um fóton com comprimento de onda correspondente a energia de repouso da referida partícula, é possível que haja criação de muitas partículas e por essa razão tornar-se difícil isolar a mesma partícula.

Função de Onda - Onda da matéria (Louis de Broglie, 1924)

Assumindo o comportamento dual (onda-partícula) do fóton, de Broglie propôs que qualquer partícula (elétron, próton, etc) tem a propriedade de onda e qualquer onda também tem a propriedade de partícula e, esta é uma propriedade universal.

A onda em questão considerou como onda da matéria com energia $E = hf$ e momento $p = h/\lambda$

Quanto à onda, esta não é uma onda ordinária visto que, para transformações Galileanas, contrariamente às ondas planas, o seu comprimento de onda varia.

Ainda de acordo com de Broglie, a onda da matéria é descrita por uma função, a função de onda (ψ):

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{i\kappa\vec{r} - i\omega t} \quad (20)$$

onde κ é número de onda ($\kappa = 2\pi/\lambda$) e ω é a frequência cíclica

Onda da matéria - Equação de Schrödinger

Tal como a acontece com as ondas eletromagnéticas que são descritas pelas equações de Maxwell, a onda da matéria (função de onda) é descrita pela **equação de Schrödinger**.

Considerando o movimento em uma dimensão (x):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (21)$$

A equação de Schrödinger define o comportamento da função de onda dado um potencial de interação.

Onda da matéria - Equação de Schrödinger

O que significa a função de onda ?

A interpretação correcta da função de onda decorre de Max Born:

A função de onda não diz nada sobre a localização da partícula em um instante "t", mas sim, ela representa a probabilidade de se encontrar a partícula na posição \vec{r} no instante de tempo "t".

Assim, considerando o movimento em uma dimensão, por exemplo "x", a condição de normalização é:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad (22)$$

Onda da matéria - Princípio de Incerteza de Heisenberg

A natureza probabilística do mundo quântico coloca uma limitação importante para se medir a posição de uma partícula e o seu momento simultaneamente. Isto é, é impossível medir com isatidão a posição \vec{r} de uma partícula e o seu momento \vec{p} simultaneamente.

Considerando o movimento em uma dimensão, por exemplo, x (para as outras dimensões procede-se de uma forma aáloga) fica:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (23)$$

Analogamente, para a energia fica:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (24)$$