

Aula 23

Professor:

Mauricio Kischinhevsky

Estrutura da matéria (Parte 3)

Conteúdo:

Os átomos - Parte 1

O átomo nuclear e o modelo de Bohr

O átomo nuclear

No início do século XX a comunidade científica já dispunha de muitos resultados experimentais sobre a emissão de luz pelos átomos de um gás, quando estimulados por descargas elétricas. Com espectroscópios determinaram-se as raia características de várias substâncias, cada raia (marca no filme fotográfico) correspondendo a um comprimento de onda.

Em 1885, **Balmer** descobriu que os comprimentos de onda do espectro visível do hidrogênio podiam ser representados pela expressão

$$\lambda = (364,6nm) \frac{m^2}{m^2 - 4}, \text{ para } m = 3, 4, 5, \dots$$

O átomo nuclear

Conforme **Balmer** imaginou, tratava-se de caso particular de expressão formulada por **Rydberg** e **Ritz**, que permite descrever as séries espectrais do hidrogênio ($R=1,097776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$) e metais alcalinos como lítio e sódio.

$$\frac{1}{\lambda} = (R) \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right), \text{ para } n_1 > n_2$$

R é a constante de Rydberg. O resultado de Balmer resulta de $n_2=2$ e $n_1=m$. Dentre as várias propostas para a estrutura dos átomos, a de **JJ.Thomson**, para a qual não foi possível determinar uma configuração estável, era no estilo "pudim de passas". Quando os experimentos de **Geiger e Marsden** (em conjunto com **Rutherford**), em que partículas alfa eram desviadas pelos átomos de uma fina camada de ouro, foram publicados (1911), eles evidenciaram que o modelo de Thomson era incompatível com o resultado. O modelo que pareceu mais adequado foi o de um núcleo positivo contendo a maior parte da massa em uma região de diâmetro de cerca de 10^{-6} nm .

O modelo de Bohr

Em 1912, quando trabalhava no laboratório de Rutherford, Bohr propôs um modelo que levava em conta os resultados de Planck, Einstein e Rutherford. Para ele o elétron do átomo de hidrogênio se move sob a influência da atração de Coulomb do núcleo positivo de acordo com a mecânica clássica, que prevê órbitas circulares ou elípticas. Por simplicidade ele escolheu órbitas circulares.

A energia para um elétron em torno de um núcleo de hidrogênio ($Z=1$) ou um átomo de hélio monoionizado ($Z=2$) pode ser obtida, escrevendo a energia potencial referente à atração elétrica entre cargas e a cinética resultante da velocidade que equilibraria a força centrípeta, como

$$E = -\frac{1}{2} \frac{k.Z.e^2}{r}.$$

Note que o elétron estaria sendo permanentemente acelerado, o que obrigaria à emissão de radiação (teoria eletromagnética clássica).

Os postulados de Bohr

Primeiro postulado: órbitas estáveis

"O elétron do átomo de hidrogênio pode se mover apenas em certas órbitas circulares, chamadas estados estacionários, nas quais não perde energia por radiação."

Segundo postulado: frequência de fótons a partir da conservação da energia

"A frequência da radiação emitida quando da transição de um estado para outro do átomo é"

$$f = \frac{E_i - E_f}{h}.$$

Devido à expressão para a energia, o segundo postulado levou Bohr a buscar compatibilidade com a fórmula de Rydberg-Ritz, obtendo:

Terceiro postulado: quantização do momento angular (m.v.r)

$$m.v.r = \frac{n.h}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Observação

No caso das ondas em um círculo, a condição de onda estacionária é a de que exista um número inteiro de comprimentos de onda na circunferência. Ou seja, $n \cdot \lambda = 2 \cdot \pi \cdot r$, onde $n=1,2,3$, e assim por diante. Essa condição mostra que, quando aplicada às ondas de matéria, implica a quantização do momento angular.

Efetivamente, com auxílio da relação de deBroglie $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{n \cdot h}{2\pi r}$,
como $L = m \cdot v \cdot r = p \cdot r$, $L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$.

Para os níveis de energia, substituindo o raio pelos valores quantizados, encontra-se ($a_0=0,0529\text{nm}$ é chamado o primeiro raio de Bohr). Os decaimentos para o estado fundamental(segundo, terceiro) compõem a série de Lyman (Balmer, Paschen).

$$E_n = -Z^2 \frac{E_o}{n^2}, \text{ com } E_o = \frac{mk^2e^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{2} \frac{ke^2}{a_o} \approx 13,6\text{eV}.$$

Aplicações da equação de Schrödinger

Apesar dos acertos, o átomo de Bohr não era gerado a partir de princípios fundamentais. As tentativas de aplicar a átomos mais complexos foram infrutíferas. A base adequada que propicia o átomo de Bohr como caso particular é a mecânica quântica.

A equação de Schrödinger

A partir de seu domínio da teoria ondulatória clássica, Schrödinger chegou a

$$-\frac{\hbar^2}{2.m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U \Psi(x, t) = i.h \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t},$$

$$\text{onde } i = \sqrt{-1} \text{ e } P(x, t) = \Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|^2.$$

No caso de o potencial depender apenas da posição, tem-se o caso independente do tempo, na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2.m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + U(x) \Psi(x) = E. \Psi(x).$$

Partícula em um poço quadrado finito

No caso do poço infinito, a partícula ficaria confinada à caixa e os níveis de energia seriam conforme estudado na aula anterior. Para o poço finito, a profundidade do potencial quadrado é finita e, acima de certo nível de energia a partícula fica desligada do potencial. Até antes desse valor deverá ficar ligada na região do poço de energia. A forma algébrica do poço pode ser escrita como $U(x)=U_0$, $x<0$, $U(x)=0$, $0<x<L$ e $U(x)=U_0$, $x>L$. Para estudar apenas os estados ligados, suporem $0 \leq E < U_0$.

No interior do poço, tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2.m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E.\Psi(x), \text{ ou } \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k^2\Psi(x) = 0.$$

Observe que a solução é oscilatória, mas não é obrigada a se anular em 0 e L. Tem que ser compatibilizada com a solução fora da região $0<x<L$.

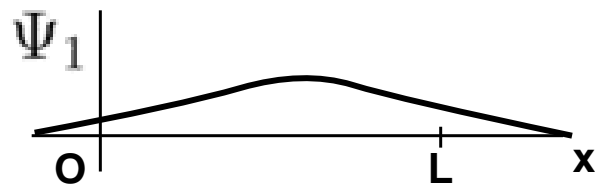
Na região onde $U(x)=U_0$, tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2.m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U_0\Psi(x) = E.\Psi(x), \text{ ou } \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \alpha^2\Psi(x) = 0,$$

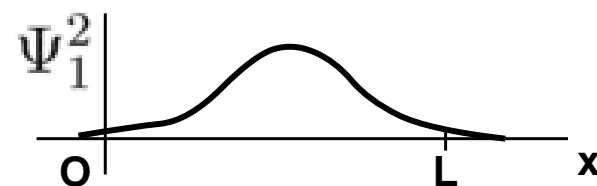
onde $\alpha^2 = \frac{2.m}{\hbar^2}(U_0 - E).$

A solução do problema é obtida compatibilizando a solução interna (em $0 < x < L$, oscilatória), com a solução do tipo exponencial decrescente para $x < 0$ e para $x > L$, através da determinação dos coeficientes multiplicativos do seno, cosseno e exponenciais (seno e cosseno hiperbólicos) que assegurem a continuidade da função de onda e de sua derivada.

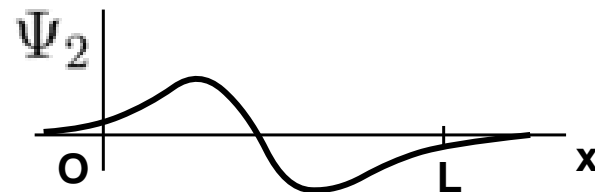
As funções de onda dos estados fundamental e os dois próximos estados energéticos (estados correspondentes aos números quânticos 1, 2 e 3) têm as formas seguintes:



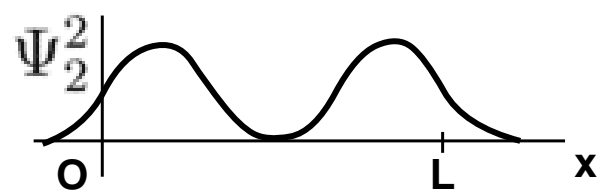
(a)



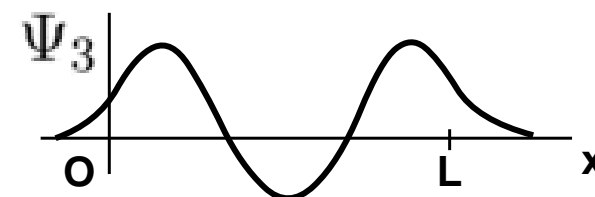
(b)



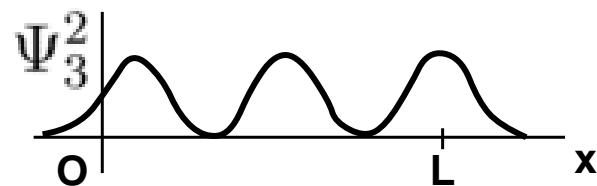
(c)



(d)



(e)



(f)

O oscilador harmônico

A energia potencial neste caso tem a forma

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}mw_0^2x^2, \text{ onde } w_0 = \sqrt{k/m}.$$

Classicamente a partícula oscilaria entre $-A$ e $+A$, com .

$$E = \frac{1}{2}kA^2 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2E}{k}}.$$

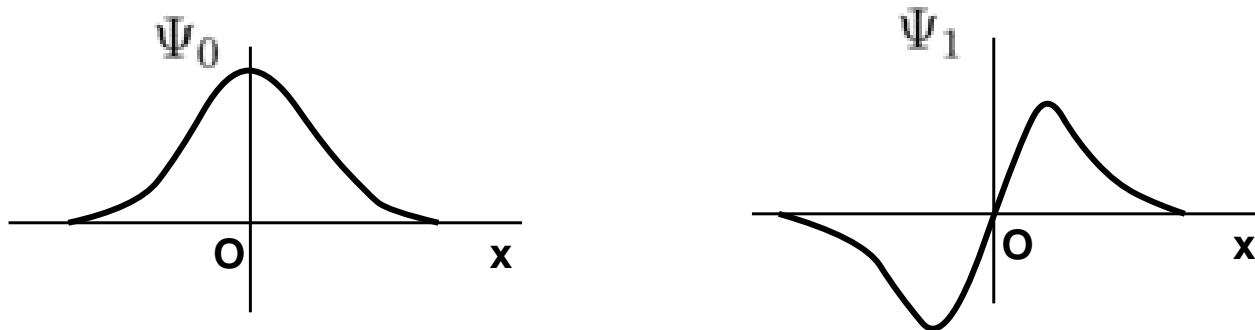
De modo análogo ao poço finito, para uma dada energia, na região em que ela é maior do que o potencial soluções oscilatórias são geradas e, para a parte em que o potencial supera a energia, uma função decrescente é produzida.

A equação de Schrödinger se escreveria como

$$-\frac{\hbar^2}{2.m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m.w_0^2.x^2.\Psi(x) = E.\Psi(x).$$

À guisa de exemplo, os estados fundamental e primeiro excitado são representados pelas funções de onda $\Psi_0(x) = A_0.e^{-ax^2}$ e $\Psi_1(x) = A_1.x.e^{-ax^2}$.

A representação gráfica nestes casos é



Os níveis de energia têm a descrição algébrica

$$E_n = (n + 1/2).\hbar.w_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$