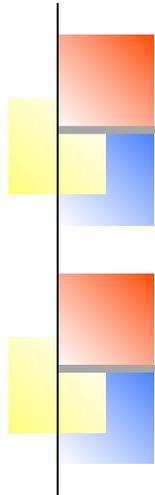


**INSTITUTO DE FÍSICA**  
Universidade Federal Fluminense

# Física IV



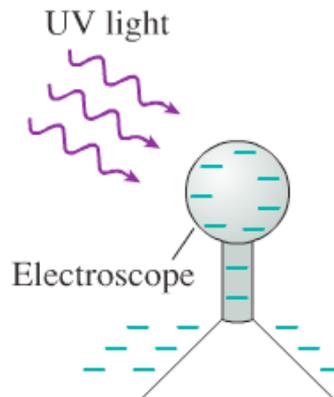
**Cap. 39: Quantização**

**Prof. Daniel Jonathan**

Niterói, Agosto/2014

# O efeito fotoelétrico

Descoberta (acidental, por H. Hertz, 1887): um eletroscópio carregado negativamente pode ser descarregado pela incidência de luz ultravioleta.



Em 1899 J.J.Thomson concluiu que as cargas elétricas que estavam sendo emitidas eram **elétrons**

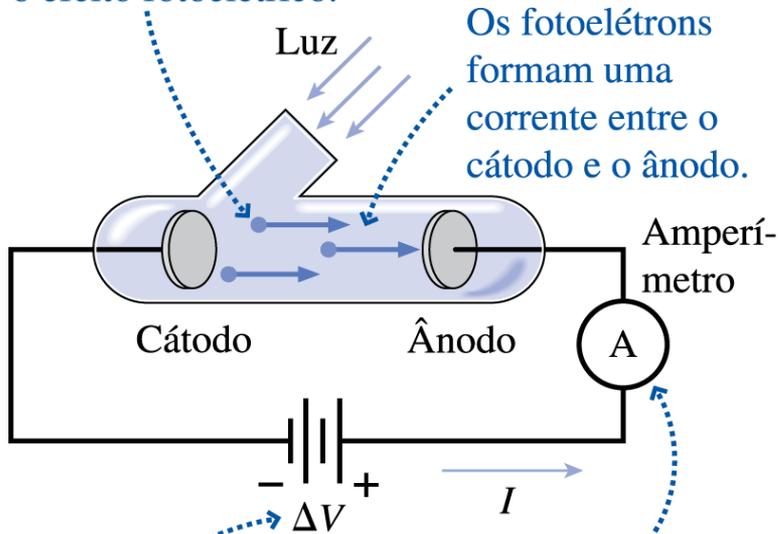
**Efeito fotoelétrico:** emissão de elétrons por uma substância devido à incidência de luz na sua superfície.

# Efeito Fotoelétrico

## Experimento usando tubo de raios catódicos (P. Lenard, 1900)

A luz ultravioleta faz o cátodo metálico emitir elétrons. Esse é o efeito fotoelétrico.

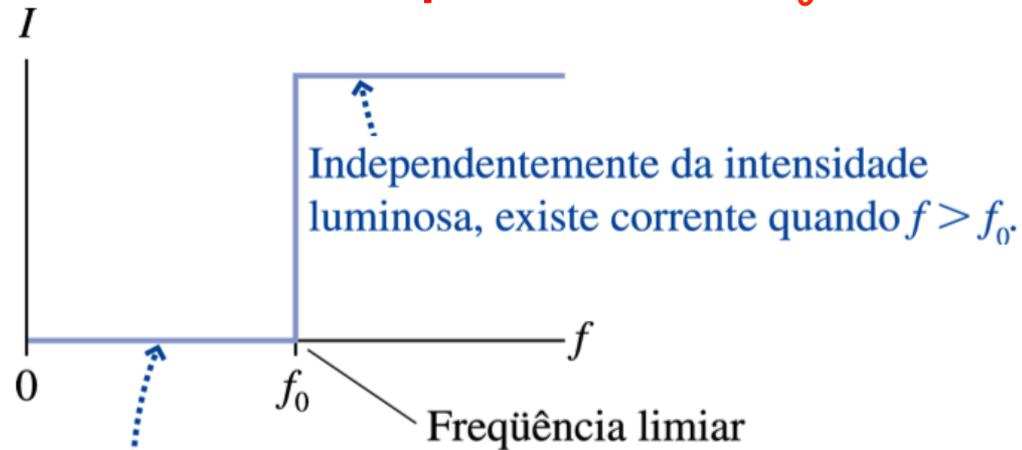
Os fotoelétrons formam uma corrente entre o cátodo e o ânodo.



A diferença de potencial pode ser alterada ou invertida.

A corrente pode ser medida enquanto a diferença de potencial, a frequência da luz e a intensidade luminosa são variadas.

Observação crucial 1: só há corrente para luz com frequência **acima de uma frequência limiar  $f_0$**



Independente da intensidade da luz, não existe corrente se  $f < f_0$ .

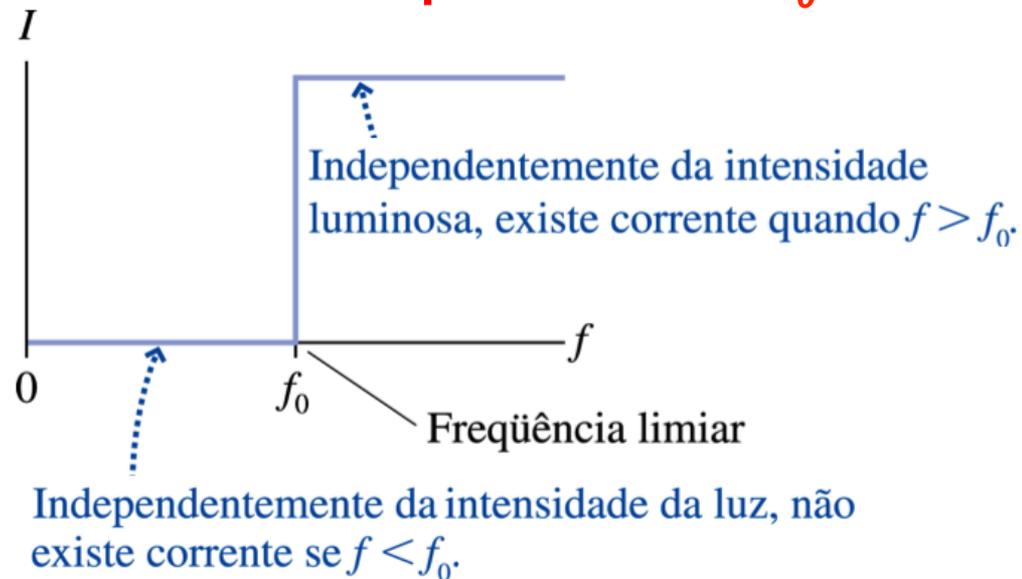
# Efeito Fotoelétrico

Experimento usando tubo de raios catódicos (P. Lenard, 1900)

**P: Essa observação é incompatível com a descrição clássica da luz (onda eletromagnética)!!! Por que?**

**R: Uma onda clássica transmite mais energia quanto maior for sua intensidade. Assim, uma onda intensa deveria ser capaz de ejetar elétrons independente da sua frequência, e uma onda fraca não deveria ser capaz.**

Observação crucial: só há corrente para luz com frequência **acima de uma frequência limiar  $f_0$**



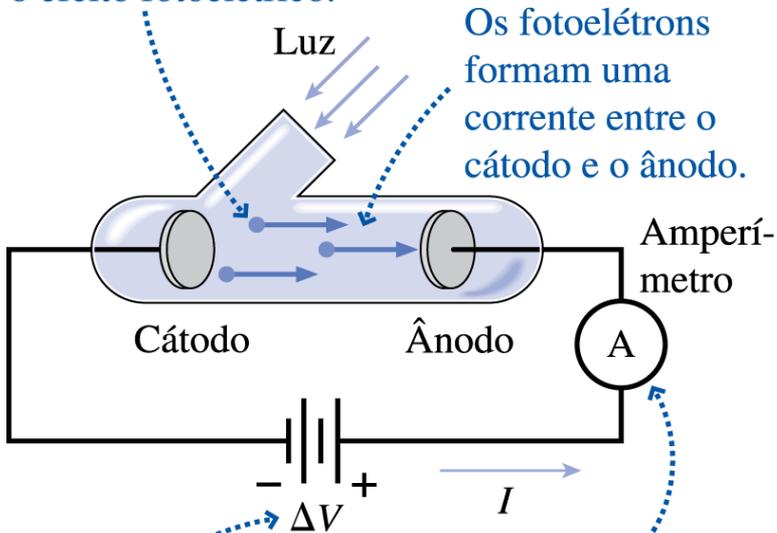
Atenção – a fig. acima (fig. 39.2) está errada na edição brasileira do livro-texto !

# Efeito Fotoelétrico

## Experimento usando tubo de raios catódicos (P. Lenard, 1900)

A luz ultravioleta faz o cátodo metálico emitir elétrons. Esse é o efeito fotoelétrico.

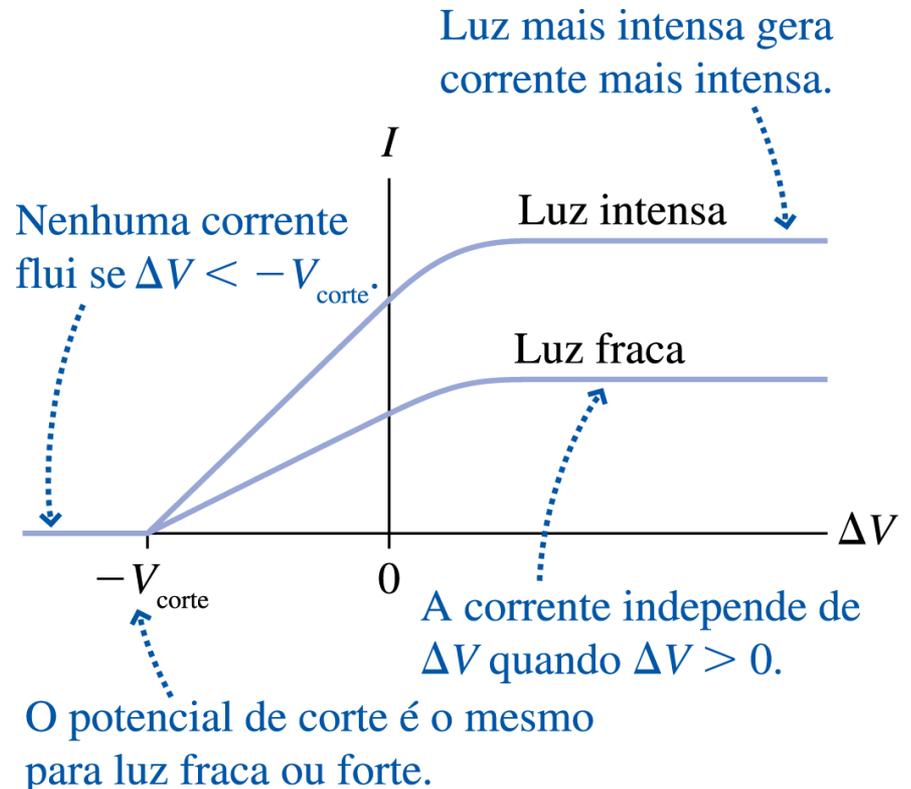
Os fotoelétrons formam uma corrente entre o cátodo e o ânodo.



A diferença de potencial pode ser alterada ou invertida.

A corrente pode ser medida enquanto a diferença de potencial, a frequência da luz e a intensidade luminosa são variadas.

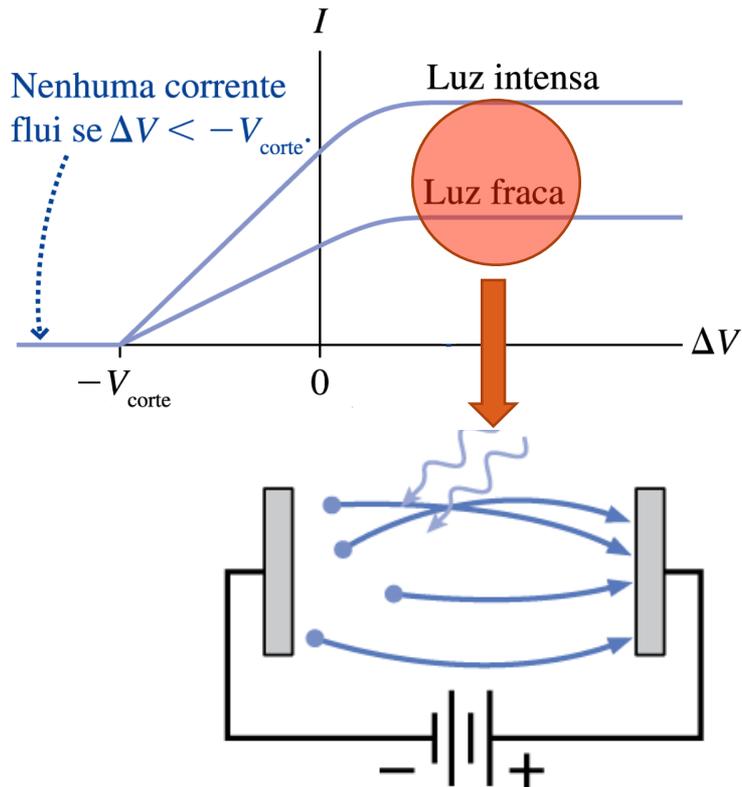
Observação crucial 2: para luz de uma dada frequência  $f$ , se aplicarmos uma voltagem  $\Delta V$  ao circuito, a corrente depende tanto de  $\Delta V$  como da intensidade da luz



# Efeito Fotoelétrico

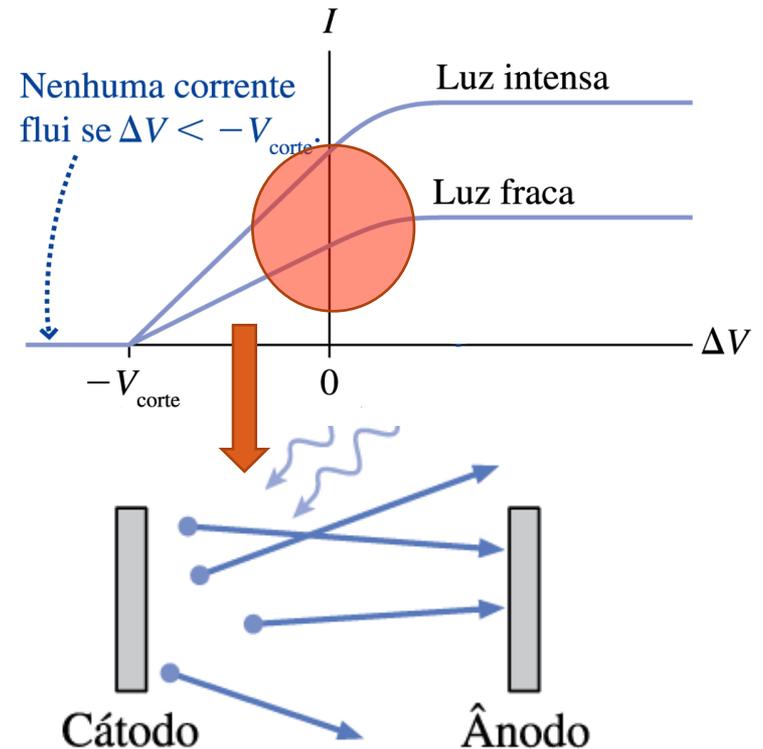
Variando a diferença de potencial  $\Delta V$  da fonte

a)  $\Delta V > 0$



$\Delta V > 0$ : um ânodo positivo atrai todos os fotoelétrons para si.

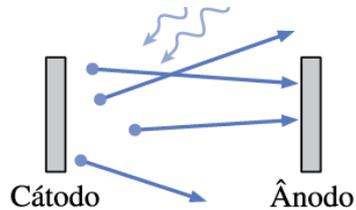
b)  $\Delta V = 0$



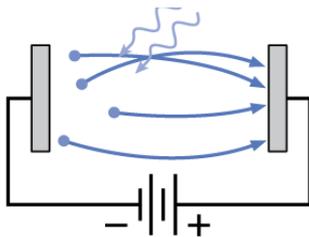
$\Delta V = 0$ : os fotoelétrons deixam o cátodo em todas as direções. Poucos deles chegam ao ânodo.

# Efeito Fotoelétrico

## Variando a diferença de potencial $\Delta V$ da fonte

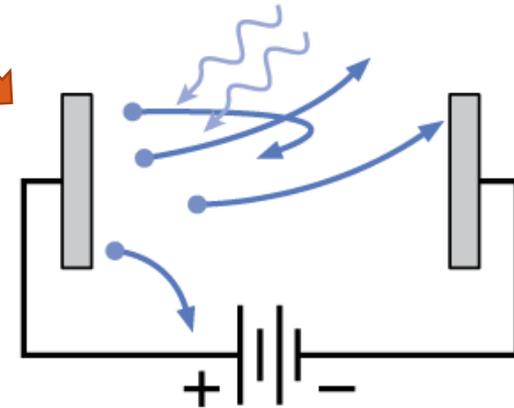
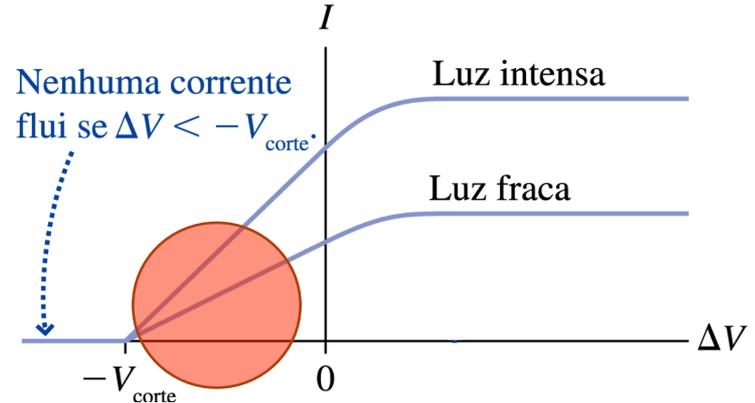


$\Delta V = 0$ : os fotoelétrons deixam o cátodo em todas as direções. Poucos deles chegam ao ânodo.



$\Delta V > 0$ : um ânodo positivo atrai todos os fotoelétrons para si.

c)  $\Delta V < 0$

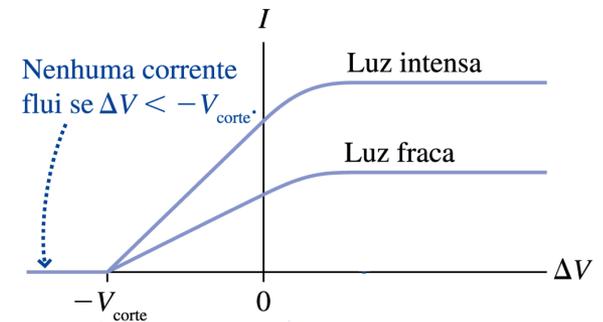
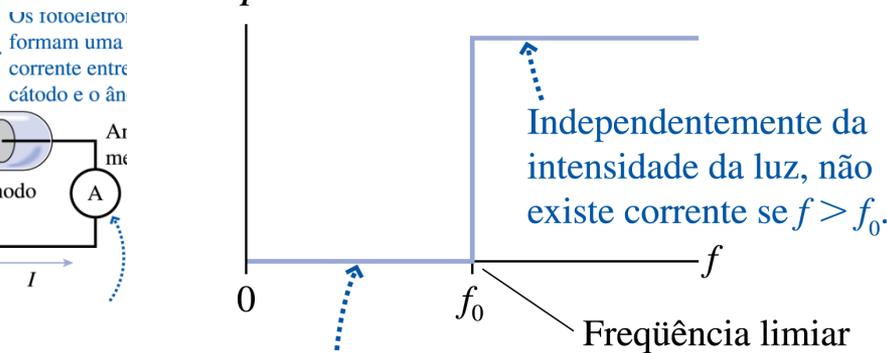
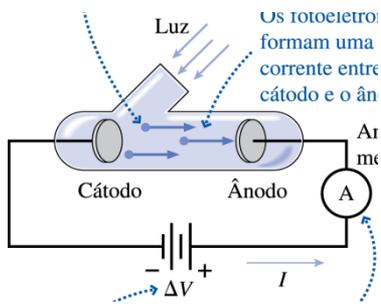


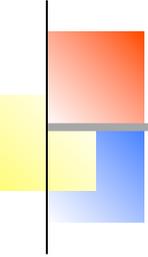
$\Delta V < 0$ : um ânodo negativo repele os elétrons. Apenas os mais rápidos conseguem chegar ao ânodo.

# Efeito Fotoelétrico

## Resumo das observações

- 1) Fotoelétrons são emitidos apenas se a freq. da luz for maior que  $f_0$ .
- 2) Para  $f > f_0$  e  $\Delta V$  fixo, a corrente  $I$  é diretamente proporcional à intensidade da luz
- 3) Para  $f > f_0$  a corrente  $I$  surge *imediatamente* quando a luz incide, por mais fraca que seja.
- 4) O valor de  $f_0$  depende do material que constitui o cátodo.
- 5) Com  $\Delta V$  positivo e alto a corrente é constante. Reduzindo  $\Delta V$ , a corrente decresce até 0 A no potencial de corte  $\Delta V = -V_{\text{corte}} < 0$ .
- 6) Para uma dada frequência  $f$ , o valor de  $V_{\text{corte}}$  independe da intensidade da luz.





# Efeito Fotoelétrico

## Considerações energéticas

- Elétron absorve uma energia  $E_{\text{elétron}}$  da luz:

$$E_{\text{elétron}} \cong I \Delta t A \text{ (clássico)}$$

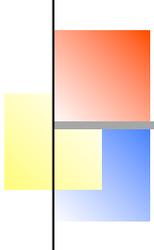
- Ele precisa superar uma barreira de energia  $E_0$  para escapar do material.

$$K_{\text{max}} = E_{\text{elétron}} - E_0$$

- Após sair, ele é acelerado pelo potencial externo, ganhando ou perdendo energia cinética:

$$K_f = K_i + e \Delta V \rightarrow V_{\text{corte}} = (E_{\text{elétron}} - E_0)/e$$

**Mas nesse caso  $V_{\text{corte}}$  dependeria da intensidade  $I$  ???!**



# Postulados de Einstein

---

Em 1905 (mesmo ano da Teoria da Relatividade), Einstein propôs um modelo simples capaz de explicar todas as características do Efeito Fotoelétrico. Por esse feito, recebeu o Prêmio Nobel de 1921.

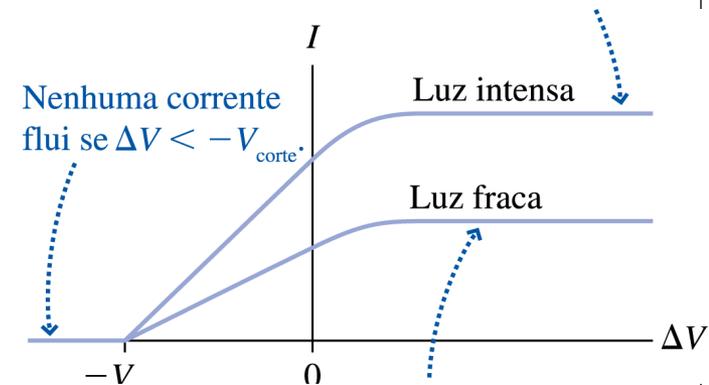
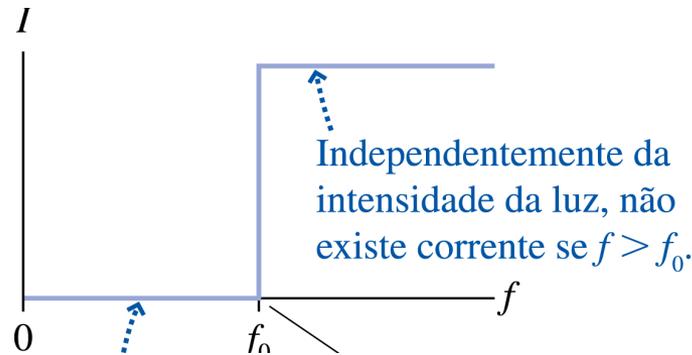
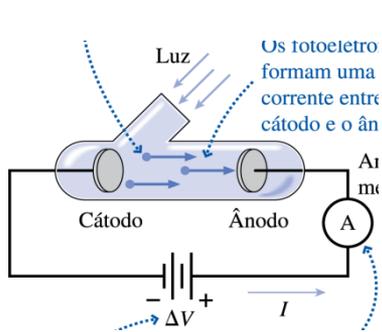
O modelo de Einstein consiste de 3 postulados:

- 1) A luz de frequência  $f$  consiste em unidades ou 'quanta' discretas, "**Fótons**", cada uma das quais carrega energia  $E = hf$ , e se propaga com velocidade  $c$ .
- 2) Os quanta de luz são emitidos ou absorvidos integralmente. Podem ser emitidos 1, 2, 3, ... quanta, mas não 1,5 quantum.
- 3) Um quantum da luz, quando absorvido pelo metal, transfere a *totalidade* de sua energia a um único elétron.

# Efeito Fotoelétrico

## Implicações dos Postulados de Einstein

- 1) Uma iluminação mais intensa transfere maior quantidade de quanta e portanto, mais elétrons são ejetados: Corrente aumenta com Intensidade!
- 2) O potencial de corte não depende da Intensidade da luz.
- 3) O quantum de luz é absorvido instantaneamente, não há atraso.



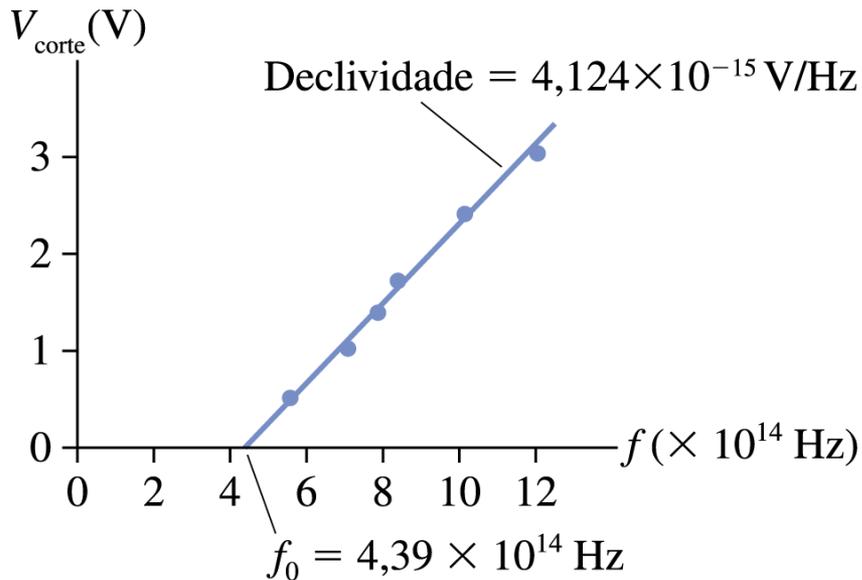
$$E_{\text{elétron}} = hf \text{ (quântico)}$$

$$K_{\text{max}} = hf - E_0$$

$$V_{\text{corte}} = (hf - E_0)/e$$

# Efeito Fotoelétrico

Alguns dados experimentais para um cátodo de césio  
(R. Millikan, 1916) :



Confirma a previsão  
de Einstein:

$$V_{\text{corte}} = (f - f_0)h/e$$

Como conhecia  $e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$ , Millikan obteve o valor da constante de Planck

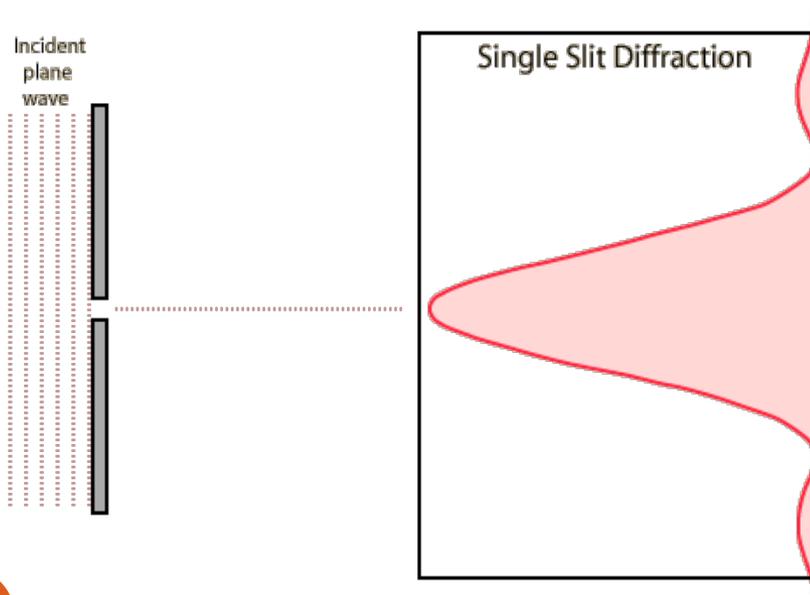
$$h \sim 6,61 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Valor concorda com o estimado de forma independente pelas medições da radiação térmica de corpos negros

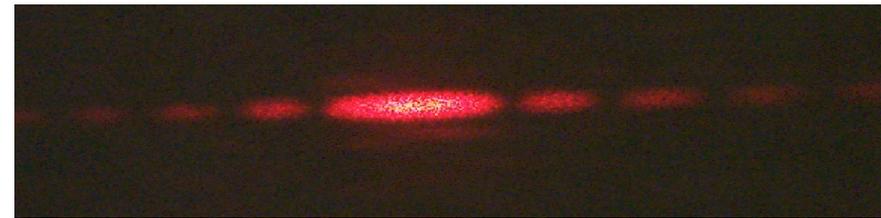
# Luz: onda ou partícula?

O efeito fotoelétrico parece indicar que a luz é composta de **partículas**. Porém, quando falamos em frequência, comprimento de onda, estamos falando nas propriedades de uma **onda**. De fato, a luz apresenta propriedades típicas de ondas, como a **difração** e a **interferência**.

## Difração por uma Fenda simples:



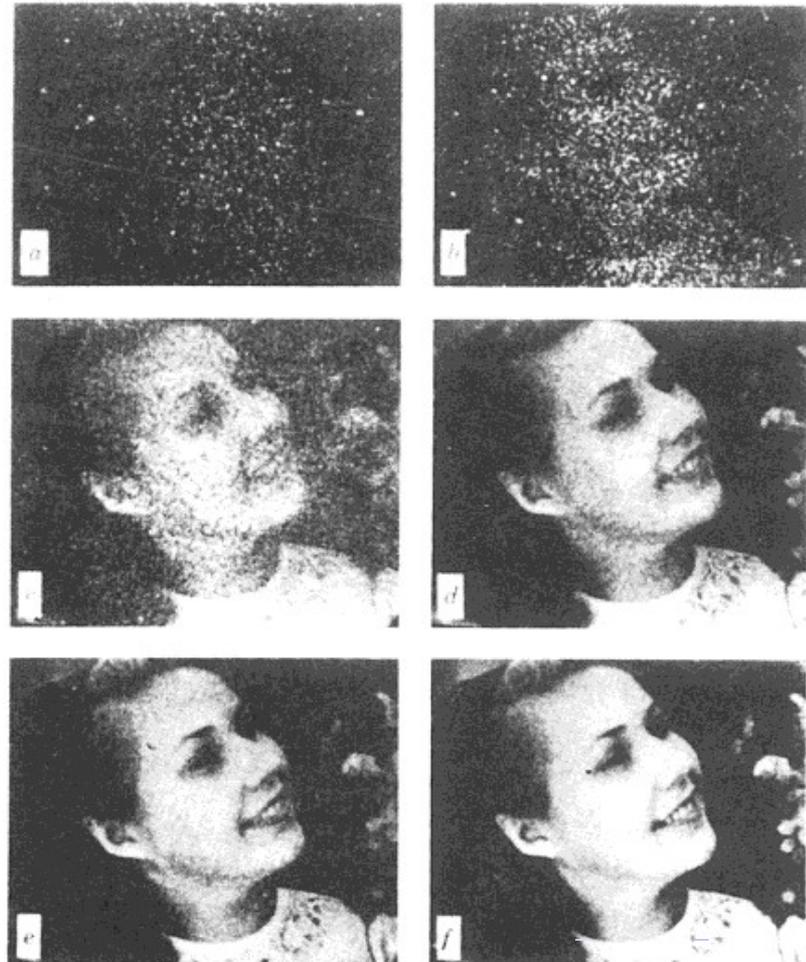
## Equivalente: Difração por um fio de cabelo:



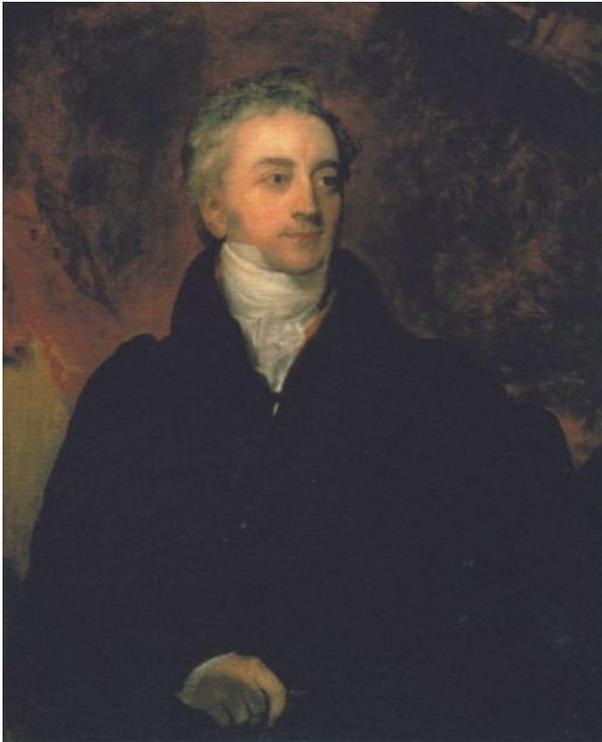
# Luz: onda ou partícula?

Por outro lado, experiências fotográficas cuidadosas feitas com **luz muito atenuada** mostram que ela é, de fato, **detectada de forma granular – fóton a fóton!**

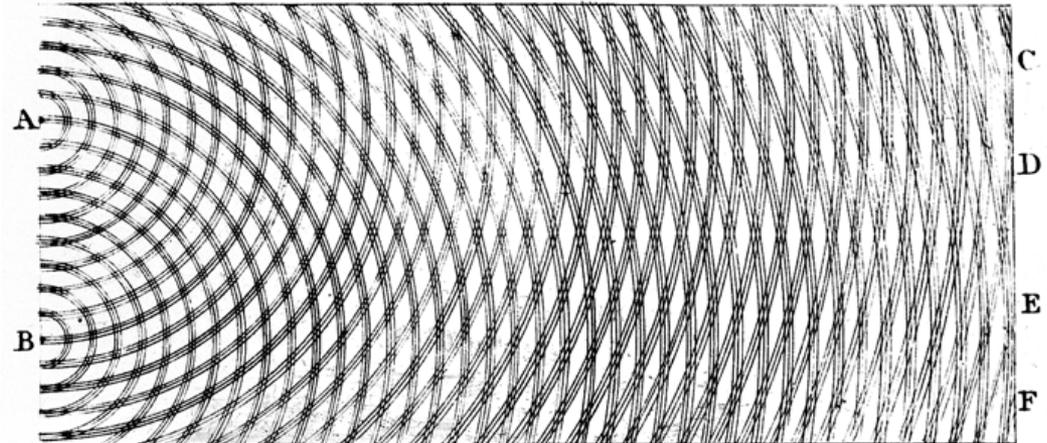
*Fig. 2-22 Series of photographs showing how the quality of an image improves as the number of photons contributing to it increases. The approximate numbers of photons involved in each exposure were: (a)  $3 \times 10^3$  (b)  $1.2 \times 10^4$  (c)  $9.3 \times 10^4$  (d)  $7.6 \times 10^5$  (e)  $3.6 \times 10^6$  (f)  $2.8 \times 10^7$  [Figure reproduced from A. Rose, J. Opt. Sci. Am. 43, 715 (1953).]*



# Interferência com duas fendas

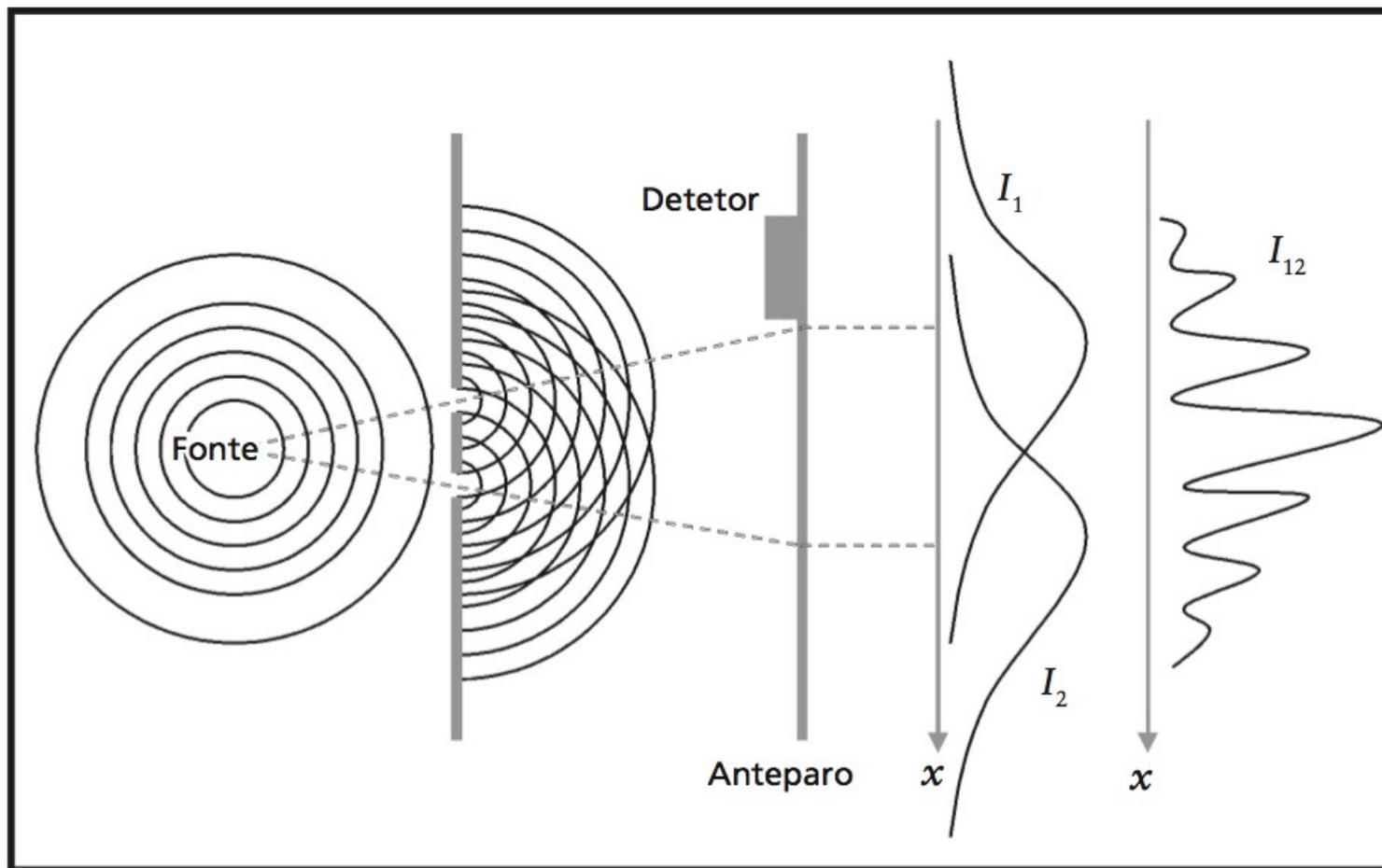


Em 1801, Thomas Young descobriu que uma onda (seja de água, de luz, ou qualquer outra) produz um **padrão de interferência** característico ao passar por duas frestas



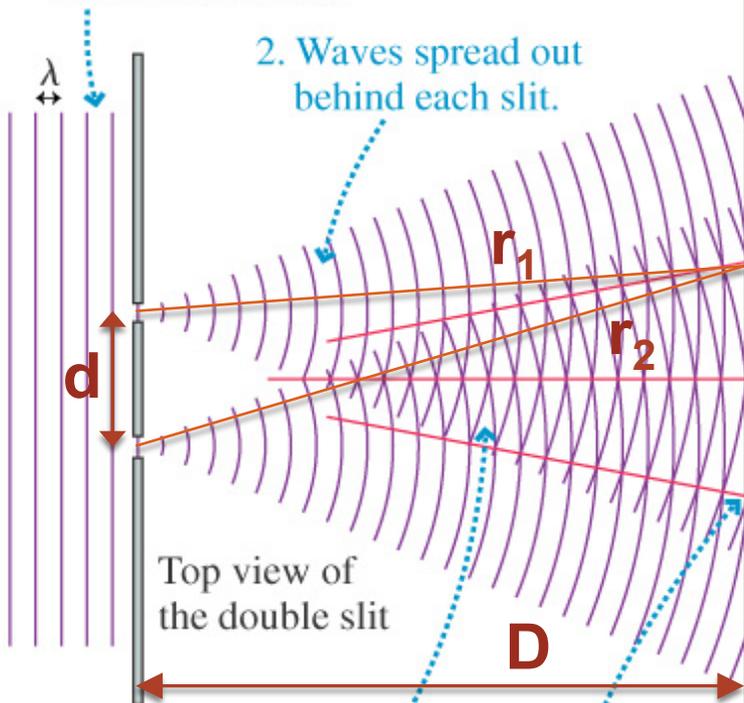
# Interferência com duas fendas

## Dupla fenda com ondas clássicas



# Interferência com duas fendas

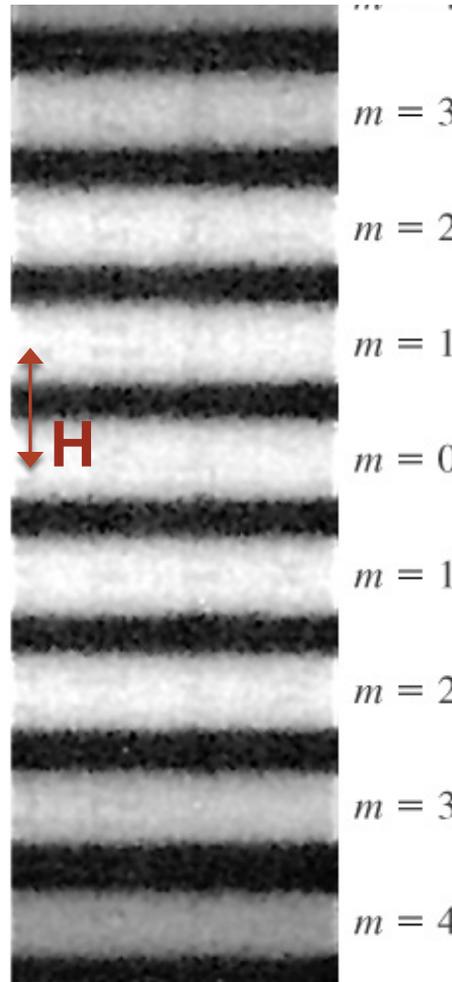
1. A plane wave is incident on the double slit.



2. Waves spread out behind each slit.

3. The waves interfere in the region where they overlap.

4. Bright fringes occur where the antinodal lines intersect the viewing screen.



**Interferência construtiva**

**máxima quando**  
 $|r_1 - r_2| = m\lambda$   
**(crista encontra crista)**

**Interferência destrutiva**

**máxima quando**  
 $|r_1 - r_2| = m + \frac{1}{2}\lambda$   
**(crista encontra vale)**

**Distância entre máximos consecutivos**

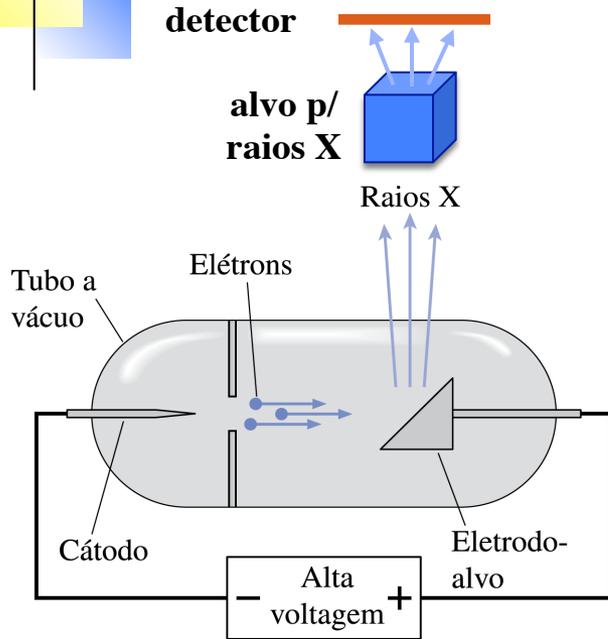
$$H = \lambda D / d$$

# Interferência com duas fendas



Link p/ vídeo: <http://bit.ly/1mhBtTU>

# Raios-X (Wilhelm Roentgen, 1895)

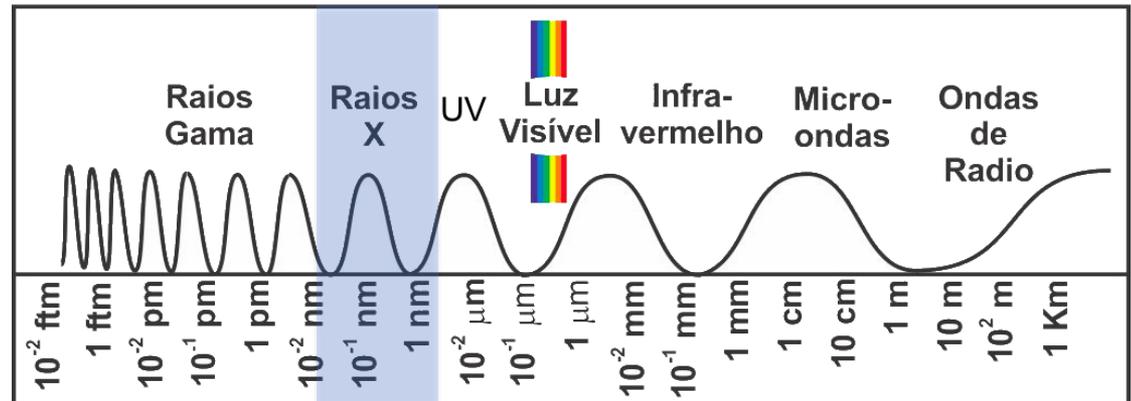


Roentgen: 1o premio Nobel de Física (1901)



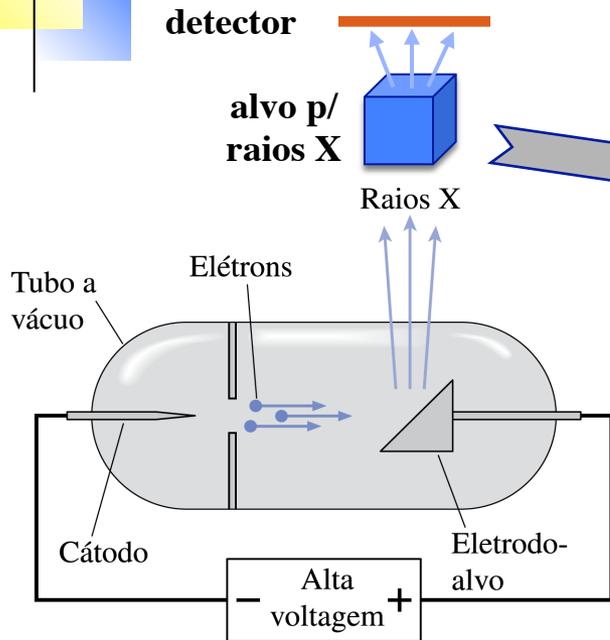
1a imagem do interior de um corpo humano (mão da esposa do Roentgen!)

**Fonte de raios-X:** tubo de raios catódicos de alta voltagem. Os raios-X são emitidos após a colisão dos elétrons com um alvo. Eles são direcionados para um segundo alvo, atrás do qual há uma placa detectora.

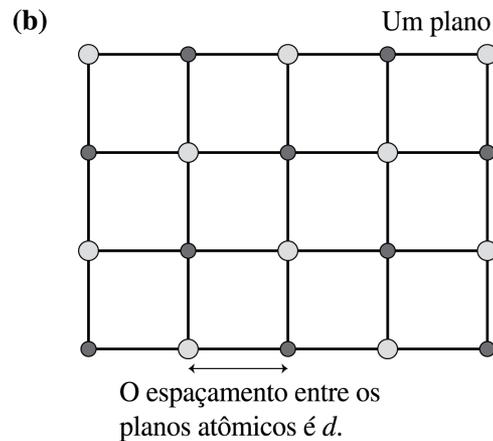
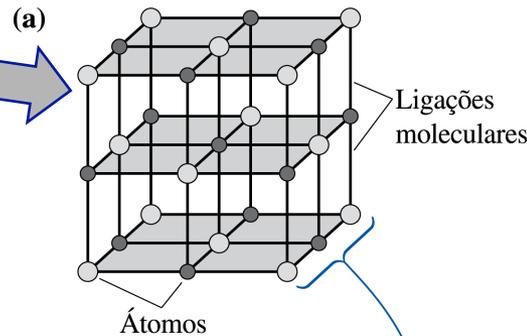


Comp. de onda:  $10^{-11}\text{m} - 10^{-8}\text{m} \leftrightarrow$  Energia  $hc / \lambda \sim 100 \text{ keV a } 100 \text{ eV}$

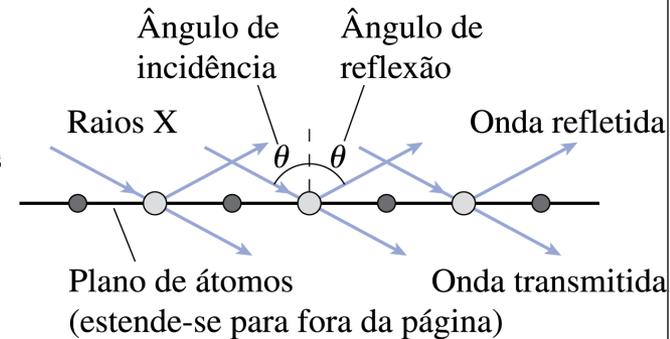
# Difração de raios-X (Bragg, 1912)



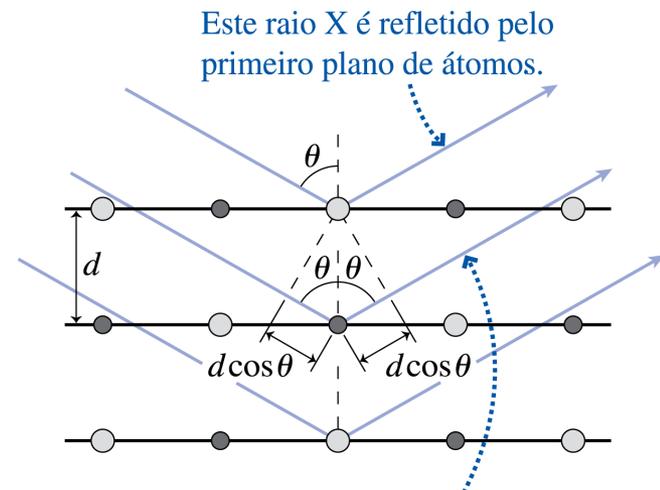
**William H. Bragg e William L. Bragg (pai e filho) observaram o padrão de raios difratados para frente, ou refletidos para trás, por 'alvos' de material cristalino.**



(a) Os raios X são transmitidos e refletidos em um plano de átomos.



(b) As reflexões provenientes de planos paralelos interferem.



O raio X refletido pelo segundo plano de átomos se propaga por uma distância extra  $\Delta r = 2d \cos \theta$ .

# Difração de raios-X (Bragg, 1912)

Lei de Bragg: Raios-X com comprimento de onda  $\lambda$  satisfazendo

$$2d \cos \theta = m \lambda$$

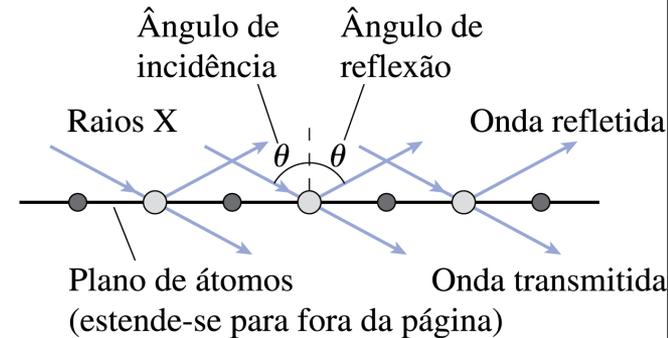
para algum inteiro  $m$  sofrem interferência construtiva

Observando os ângulos onde isto ocorre permite inferir informação sobre a estrutura dos materiais, por exemplo que tipicamente

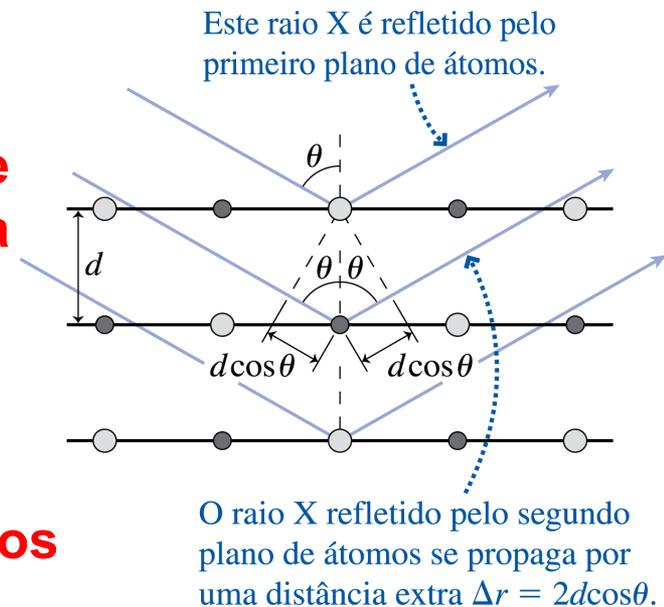
$$d \sim 10^{-10} \text{ a } 10^{-9} \text{ m}$$

distância interatômica  $\sim$  tamanho dos átomos

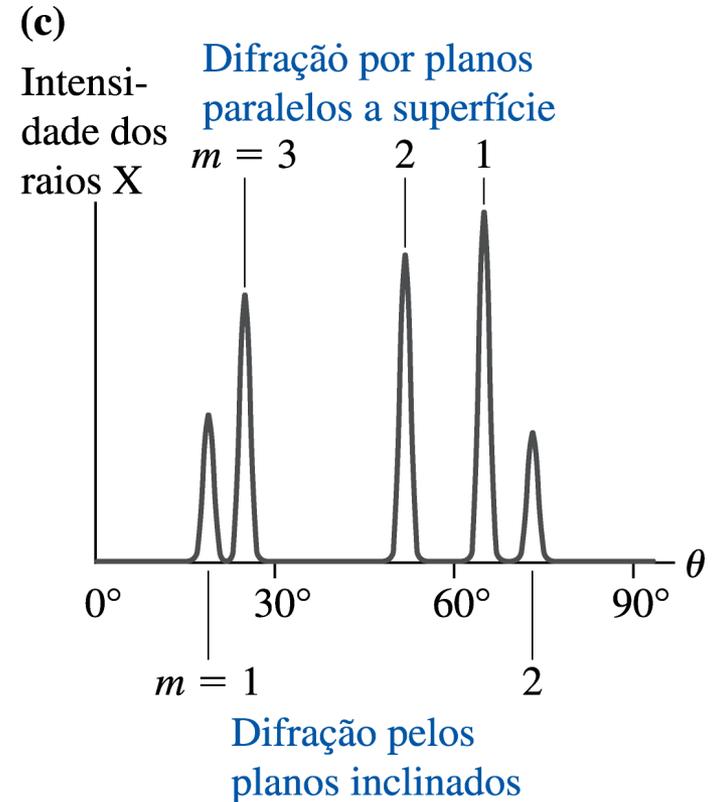
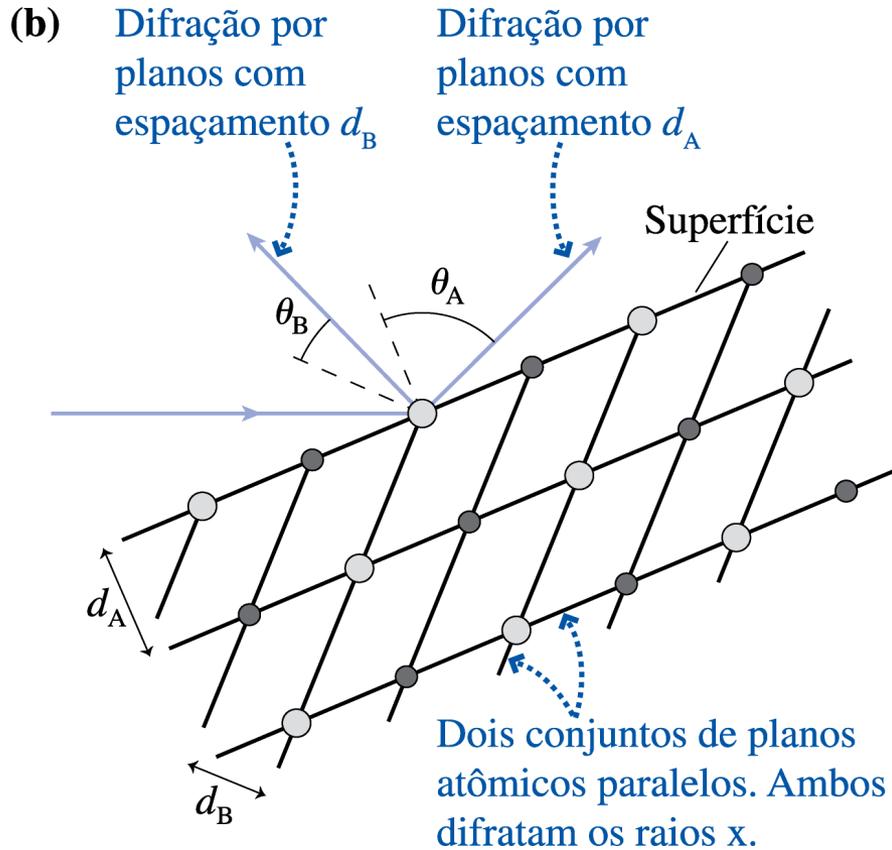
- (a) Os raios X são transmitidos e refletidos em um plano de átomos.



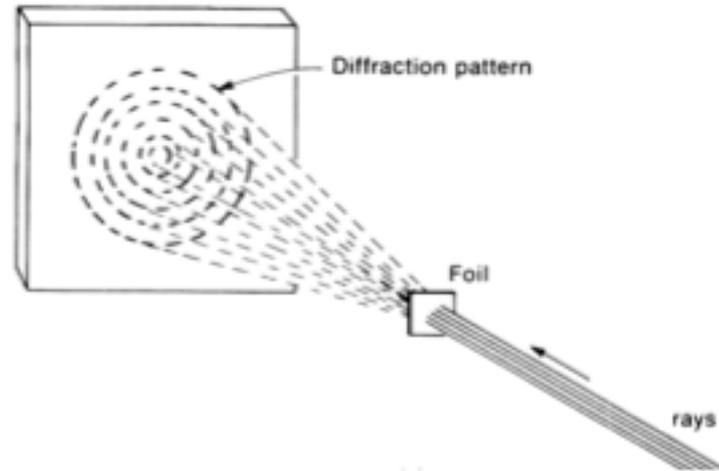
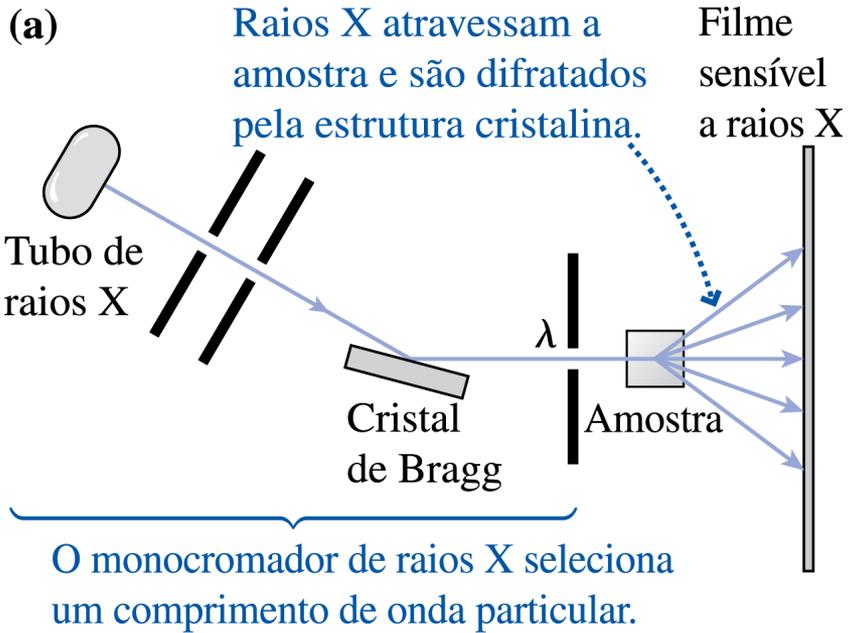
- (b) As reflexões provenientes de planos paralelos interferem.



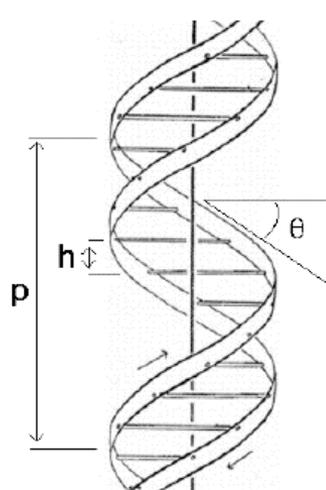
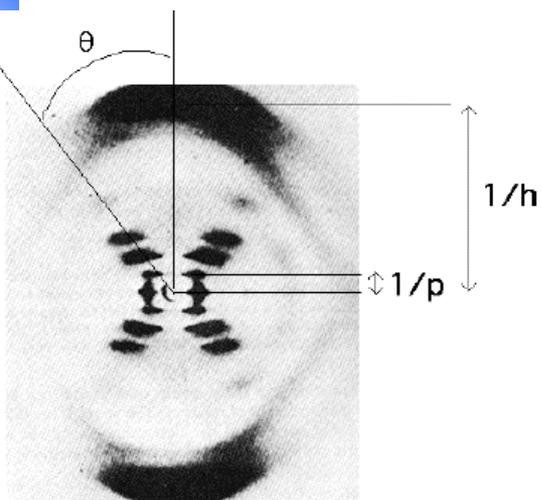
# Difração de raios-X



# Difração de raios-X



# Difração de raios-X



**Aplicação: identificar a estrutura espacial de moléculas complexas**  
**Ex: Dupla hélice do DNA (Watson, Crick, Franklin, 1953)**



**Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas / SP**

**Fonte de raios-X mais brilhante do Brasil, usado p/ estudos de metalurgia, biologia, química, materiais....**

# Ondas de Matéria (1924)

## Louis-Victor de Broglie – estudante francês

**IDÉIA:** Já que a luz apresenta comportamento de partícula, não poderia haver uma simetria e ‘partículas’ como o elétron também terem comportamento ondulatório?

P/ Fótons:  $E = h\nu$ , mas tb  $E = pc \rightarrow p = h\nu/c = h / \lambda$

**LdB sugere que partículas tb devem ter um comprimento de onda associado, dado por**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

obs: se  $v \sim c$  deve-se usar o  $p$  relativístico ( $\gamma mv$ )

Ex.: Qual o  $\lambda$  de deBroglie de uma pessoa caminhando com  $v = 5$  m/s e  $m = 80$  kg?

**R:  $1,6 \times 10^{-36}$  m - imperceptível!**

Ex. 39.5: Qual é o comprimento de onda de deBroglie de um elétron com energia cinética 1,0 eV? (Use:  $h = 4,14 \times 10^{-15}$  eV.s)

**R:  $1,2 \times 10^{-9}$  m = 1,2 nm – igual ou maior que um átomo!**



# Ondas de Matéria (1924)

**Louis-Victor de Broglie – estudante francês**

**IDÉIA:** Já que a luz apresenta comportamento de partícula, não poderia haver uma simetria e ‘partículas’ como o elétron também terem comportamento ondulatório?

P/ Fótons:  $E = h\nu$ , mas tb  $E = pc \Rightarrow p = h\nu/c = h / \lambda$

**LdB sugere que partículas tb devem ter um comprimento de onda associado, dado por**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

obs: se  $v \sim c$  deve-se usar o  $p$  relativístico ( $\gamma mv$ )

**Frente ao ceticismo de alguns, sugere que se tente realizar experiências de difração e interferência com partículas**



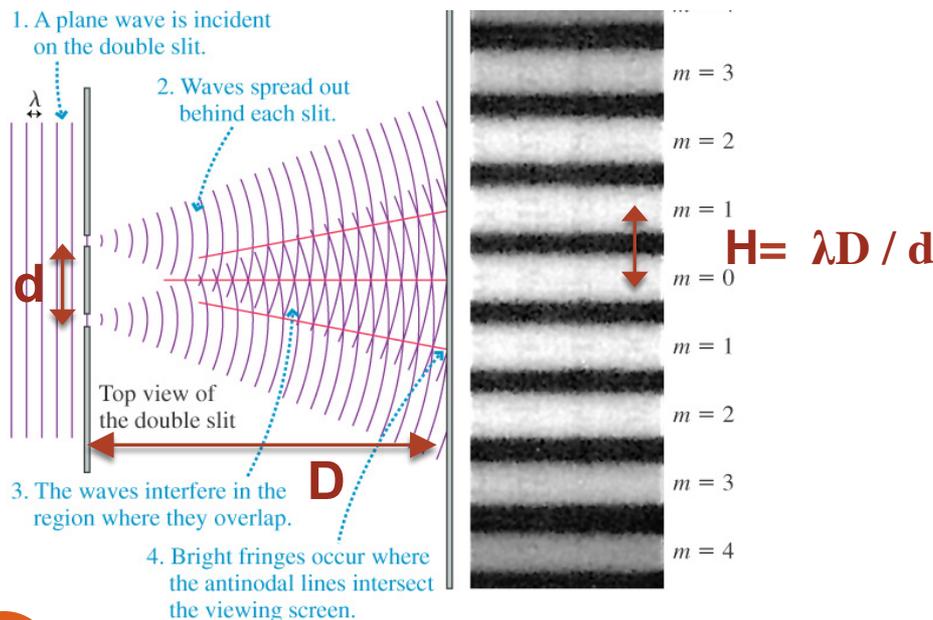
# Ondas de Matéria – como detectar?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{J.s} = 4,14 \times 10^{-15} \text{ eV.s}$$

Passo 1: vá no laboratório e crie feixes de elétrons com energia controlada. Na época era possível criar feixes com energias entre  $\sim 25 \text{ eV}$  e  $1000 \text{ eV}$

Passo 2: escolha um experimento típico de ondas e tente replicar com elétrons.



P: Melhor realizar o experimento com

- a. feixe eletrônico de alta energia
- b. feixe eletrônico de baixa energia**
- c. não faz diferença

Energia menor  $\Rightarrow$  momento menor  
 $\Rightarrow \lambda$  maior  
portanto espaçamento maior, mais fácil de ver.

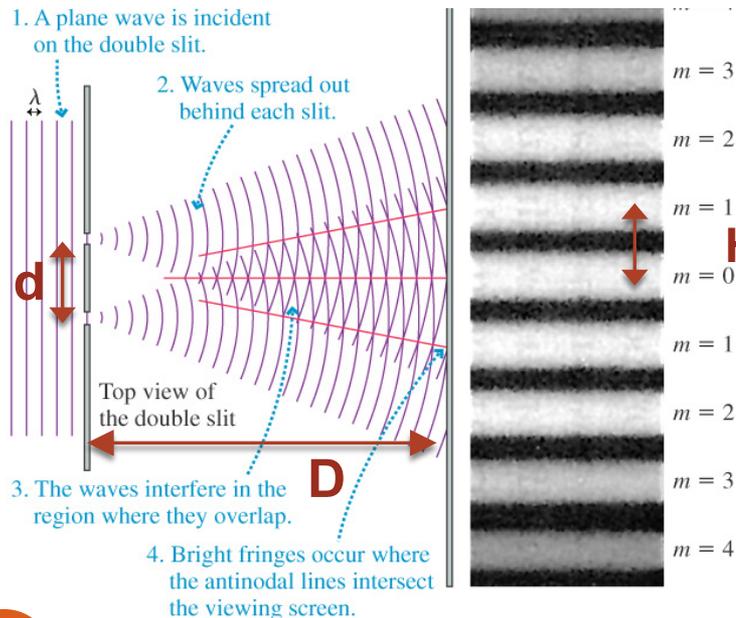
# Ondas de Matéria – como detectar?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,14 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

Passo 1: vá no laboratório e crie feixes de elétrons com energia controlada. Na época era possível criar feixes com energias entre  $\sim 25 \text{ eV}$  e  $1000 \text{ eV}$

Passo 2: escolha um experimento típico de ondas e tente replicar com elétrons.



Para o feixe eletrônico de menor energia ( $E = 25 \text{ eV}$ ), qual a ordem de grandeza do comprimento de onda?

- A.  $\lambda \sim 1 \text{ pm}$  ( $10^{-12} \text{ m}$ )    D.  $\lambda \sim 1 \text{ mm}$  ( $10^{-3} \text{ m}$ )  
**B.  $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$**  ( $10^{-10} \text{ m}$ )    E.  $\lambda \sim 1 \text{ m}$   
 C.  $\lambda \sim 1 \mu\text{m}$  ( $10^{-6} \text{ m}$ )

$$\lambda = h/p = h/(2Em_e)^{1/2}$$

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}}{(2 * 25 \text{ eV} * 1.6 \times 10^{-19} \text{ J/eV} * 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})^{1/2}}$$

$$\lambda = 2.4 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.24 \text{ nm}$$

Compare com luz visível:  
 $\lambda \sim 400\text{-}700 \text{ nm}$

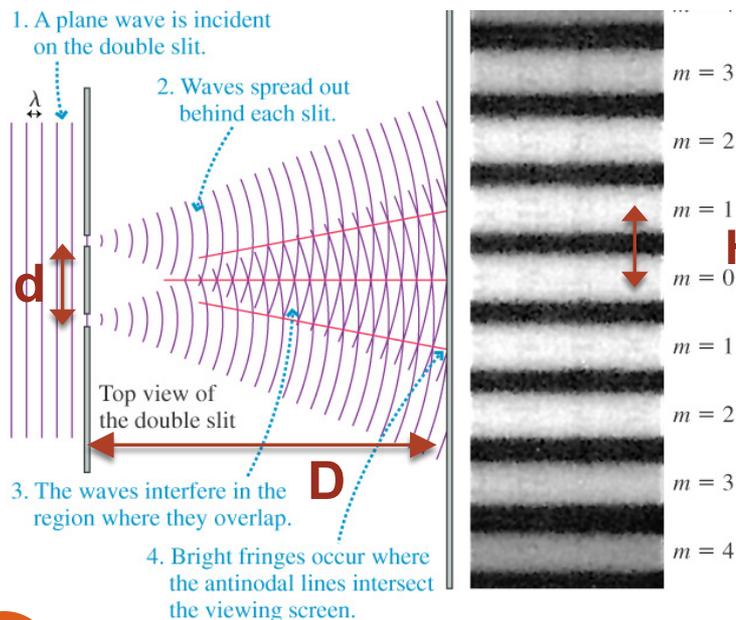
# Ondas de Matéria – como detectar?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,14 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

Passo 1: vá no laboratório e crie feixes de elétrons com energia controlada. Na época era possível criar feixes com energias entre ~ 25 eV e 1000eV

Passo 2: escolha um experimento típico de ondas e tente replicar com elétrons.



Para o feixe eletrônico de menor energia ( $E = 25\text{eV}$ ), qual a ordem de grandeza do comprimento de onda?

- A.  $\lambda \sim 1\text{pm}$  ( $10^{-12}\text{ m}$ )    D.  $\lambda \sim 1\text{mm}$  ( $10^{-3}\text{m}$ )  
**B.  $\lambda \sim 1\text{Å}$  ( $10^{-10}\text{ m}$ )**    E.  $\lambda \sim 1\text{m}$   
 C.  $\lambda \sim 1\mu\text{m}$  ( $10^{-6}\text{ m}$ )

$$H = \lambda D / d$$

## método alternativo de cálculo

$$\lambda = hc / (2Emc^2)^{1/2}$$

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eV nm}}{(2 * 25\text{eV} * .511 \times 10^6 \text{ eV})^{1/2}}$$

$$\lambda = \frac{1,24 \times 10^3 \text{ nm}}{(25 \times 10^6)^{1/2}} = \frac{1,24}{5} \text{ nm}$$

$$\lambda \sim 1/4 \text{ nm}$$

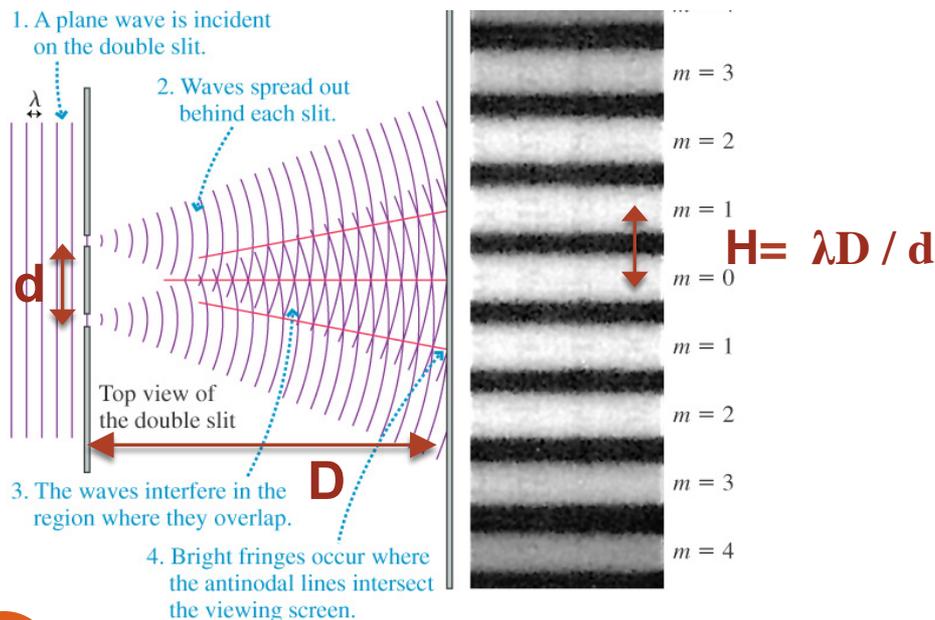
# Ondas de Matéria – como detectar?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,14 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

Passo 1: vá no laboratório e crie feixes de elétrons com energia controlada. Na época era possível criar feixes com energias entre  $\sim 25 \text{ eV}$  e  $1000 \text{ eV}$

Passo 2: escolha um experimento típico de ondas e tente replicar com elétrons.



Problema! Mesmo a baixas energias,  $\lambda \sim 2.4 \times 10^{-10} \text{ m}$  é MUITO PEQUENO

Com fendas separadas de  $d \sim 0,5 \text{ mm}$  e um equipamento de mesa ( $D \sim 1-2 \text{ m}$ ), as franjas de interferência ficam ainda a distâncias microscópicas:  $H \sim 1 \mu\text{m}$  (facilmente obscurecidas por perturbações).

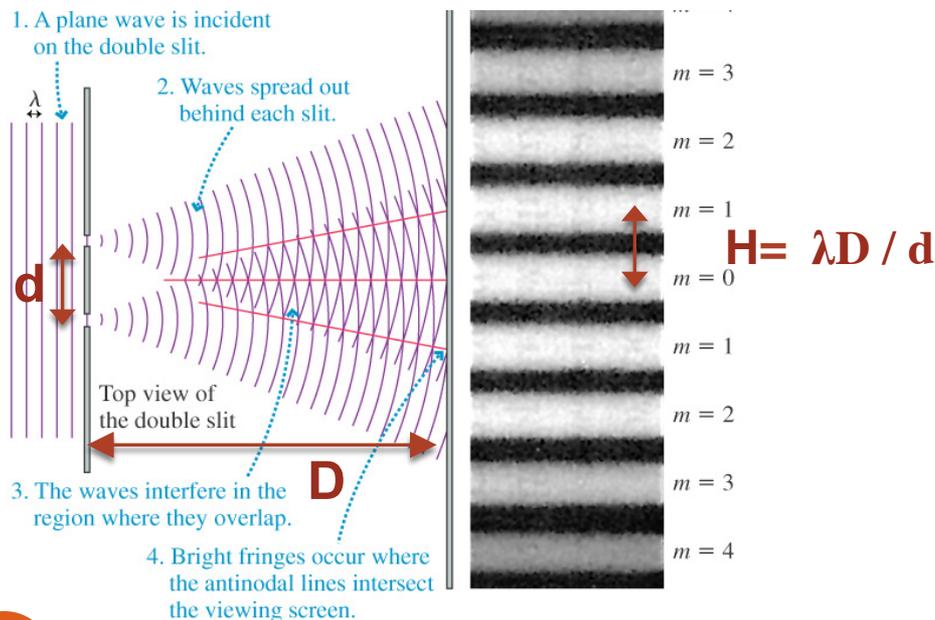
# Ondas de Matéria – como detectar?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,14 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

Passo 1: vá no laboratório e crie feixes de elétrons com energia controlada. Na época era possível criar feixes com energias entre  $\sim 25 \text{ eV}$  e  $1000 \text{ eV}$

Passo 2: escolha um experimento típico de ondas e tente replicar com elétrons.

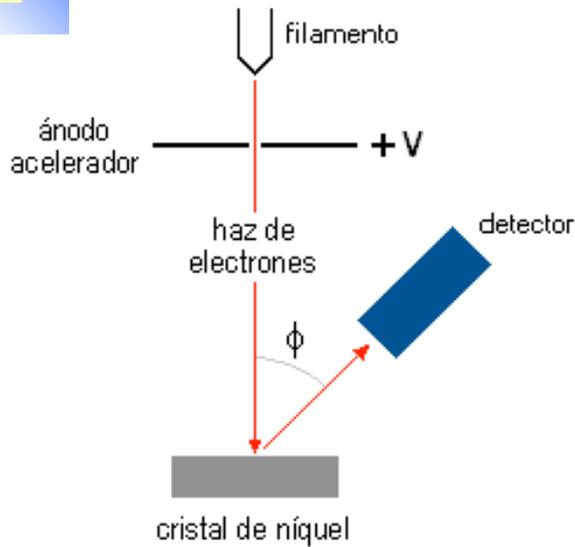
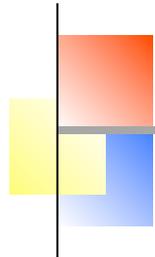


Problema! Mesmo a baixas energias,  $\lambda \sim 2.4 \times 10^{-10} \text{ m}$  é MUITO PEQUENO

Para aumentar  $H$ , poderíamos tentar reduzir a distância  $d$ ... difícil com a tecnologia de 1925!

Outra opção: usar como fontes átomos na superfície de um cristal – fazer difração de elétrons!

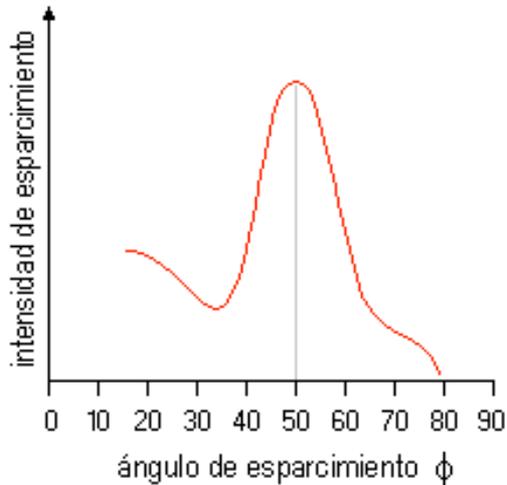
# Experimento: Difração de elétrons (Davisson e Germer 1927)



D & G estudaram a reflexão de um feixe de elétrons incidindo perpendiculares à superfície de um cristal puro de Níquel.



Observaram que, qdo os elétrons tinham energia **54eV**, o feixe era refletido preferencialmente a um ângulo  $\phi = 50^\circ$

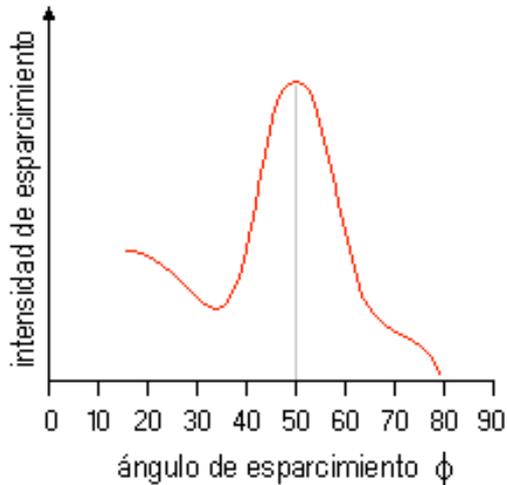
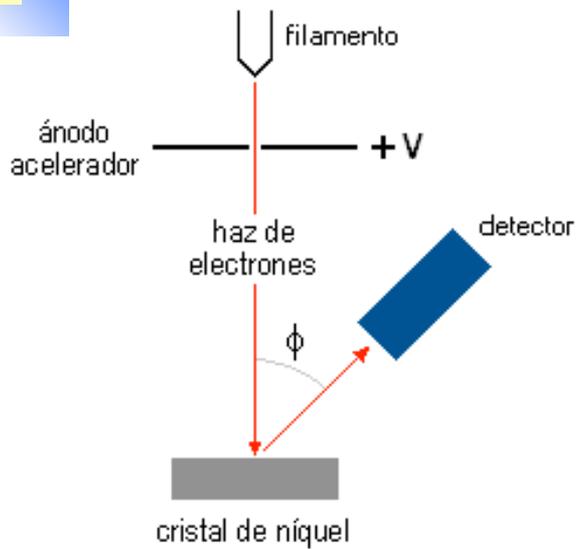


**P: será que isso pode ser explicado pelas ondas de deBroglie?**

Obs: já se sabia por difração de raios-X que o níquel tem espaçamento interatômico **D = 2,15Å**.

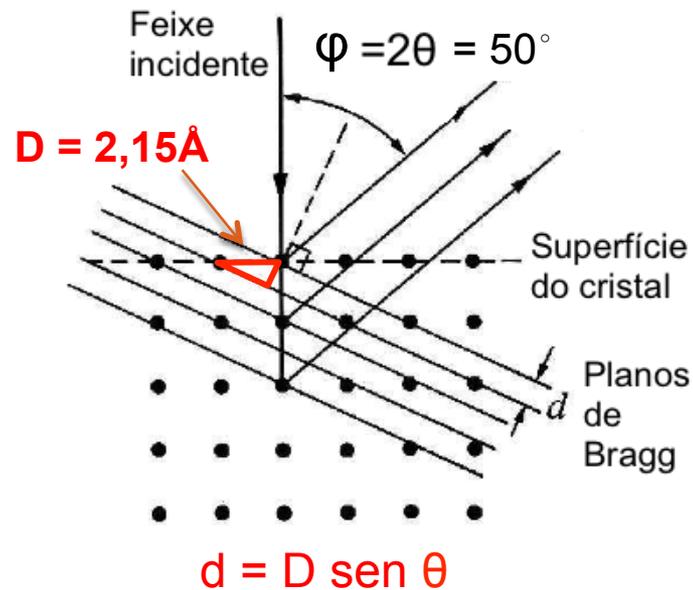


# Experimento: Difração de elétrons (Davisson e Germer 1927)



**Previsão de deBroglie:** um elétron de energia 54eV tem comprimento de onda

$$\lambda_{\text{teo}} = \frac{1,24 \text{ nm}}{(54 \cdot 1,02)^{1/2}} = 1,67 \text{ \AA}$$



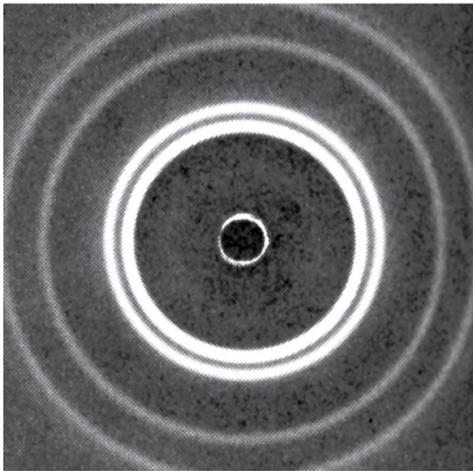
Lei de Bragg:  $\lambda = 2d \cos \theta = 2 D \cos \theta \text{ sen } \theta = D \text{ sen } \phi$

$$\lambda_{\text{exp}} = 1,65 \text{ \AA} !$$

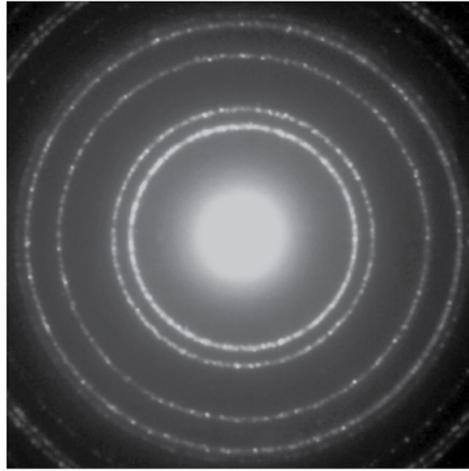
# Relação de deBroglie funciona para *todas* as partículas!

## Difração em alumínio: raios-x, elétrons, nêutrons

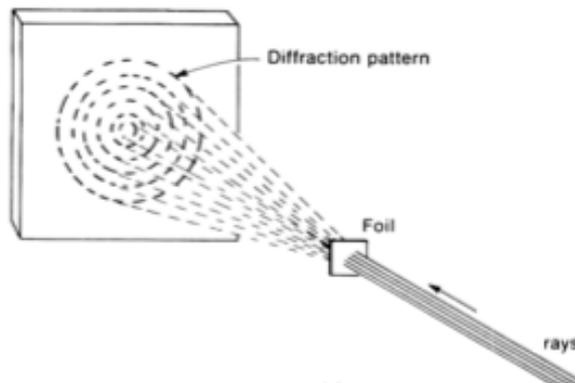
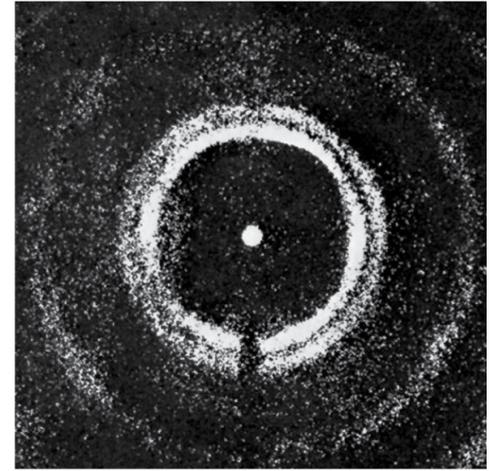
(a) Padrão de difração de raios X



(b) Padrão de difração de elétrons

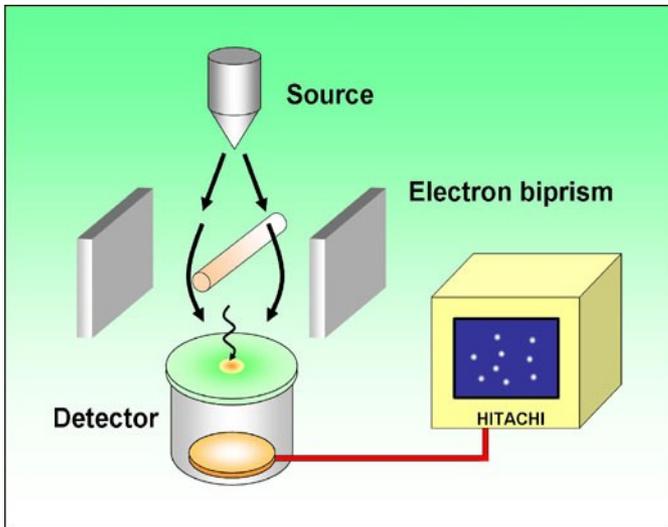


(c) Padrão de difração de nêutrons



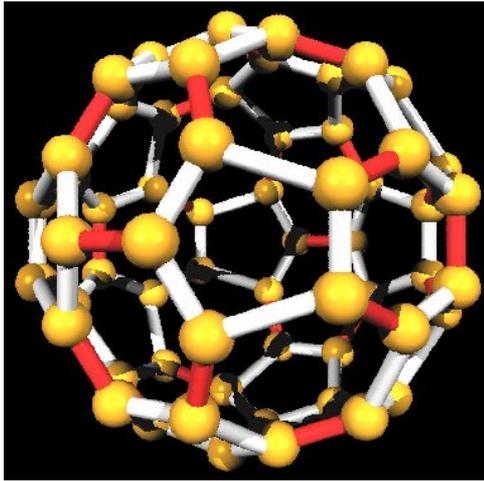
# Dupla fenda com elétrons (1989)

**Tomomura et al (Hitachi)**

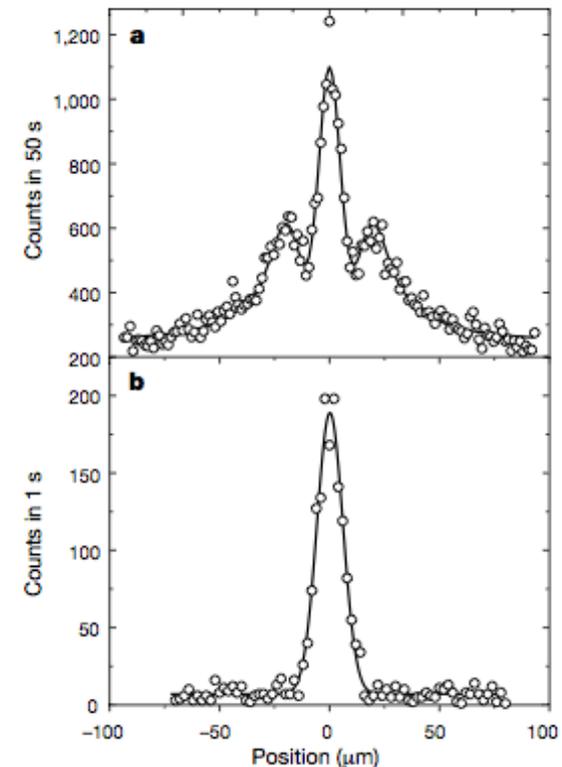
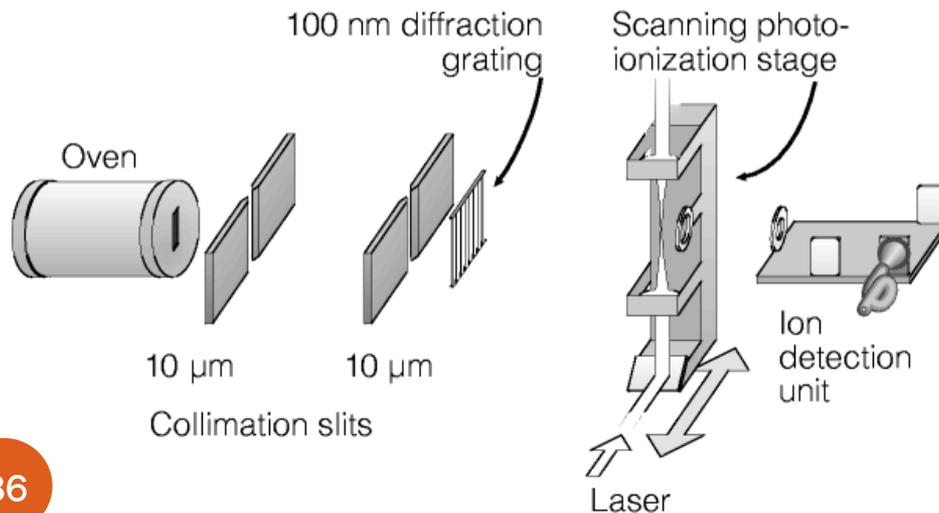


**Link p/ vídeo: <http://bit.ly/1g1mZnE>**

# Difração de moléculas!



Em 1999, pesquisadores na Áustria conseguiram demonstrar a difração de moléculas de  $C_{60}$  ('Buckybolas'), que pesam mais de  $10^6$  vezes mais do que um elétron!

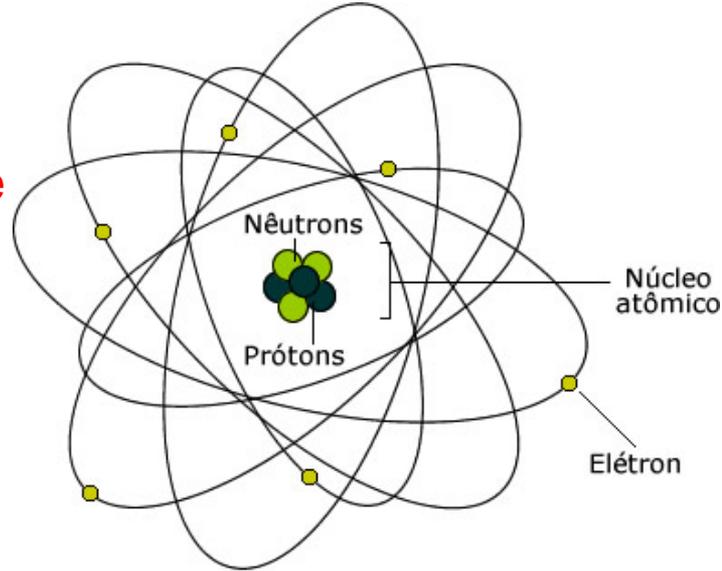


(a) Com fendas (b) Sem fendas

# Modelo atômico de Bohr (1913)

**Niels Bohr** (1885-1961) – físico dinamarquês, trabalhou com Rutherford

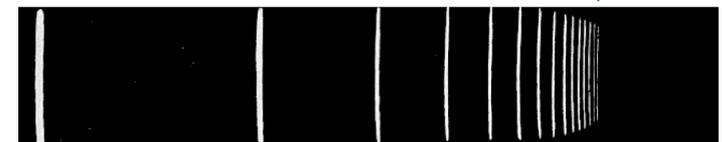
Modelo atômico de Rutherford



Lembrando: havia dificuldades para explicar:

- 1) Como um átomo assim poderia ser estável (partículas aceleradas irradiam)
- 2) Espectros discretos de emissão / absorção

Espectro de emissão do hidrogênio.



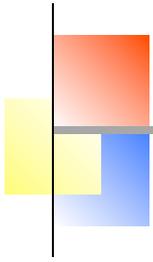
656,5 nm

486,3 nm

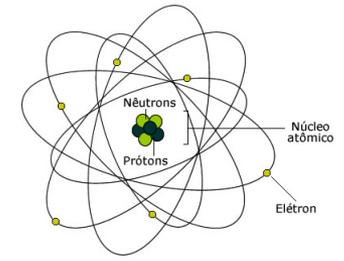
434,2 nm

410,3 nm

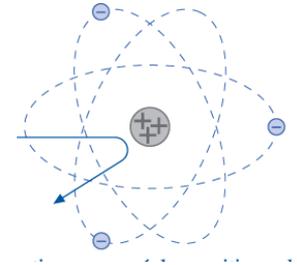
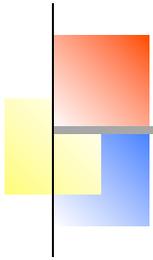
# Modelo atômico de Bohr (1913)



1) Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.

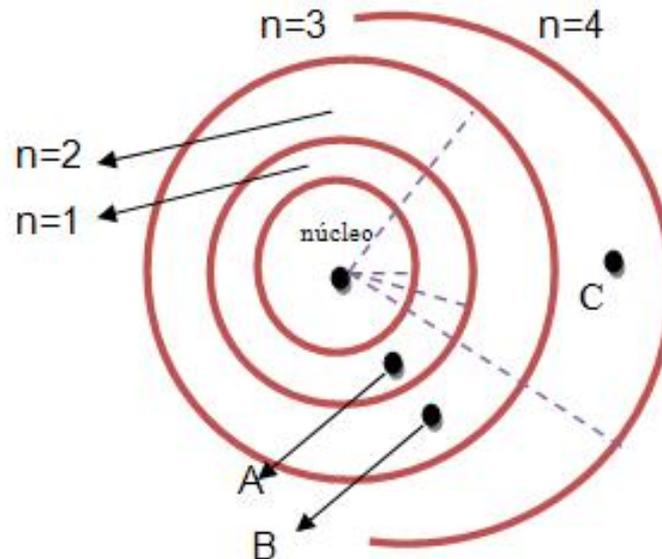


# Modelo atômico de Bohr (1913)

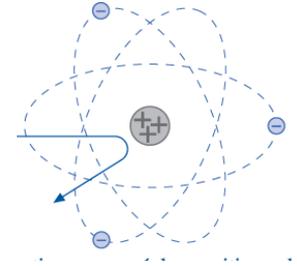
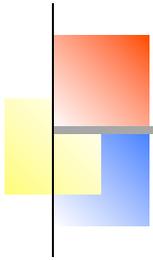


1) Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.

2) Os átomos existem apenas em certos estados estacionários. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas, indexadas por um número inteiro  $n = 1, 2, 3, 4 \dots$  (número quântico).

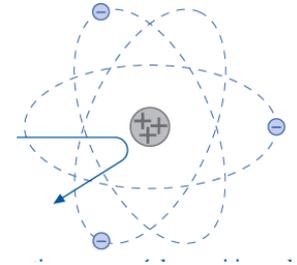
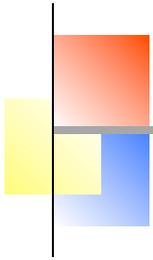


# Modelo atômico de Bohr (1913)

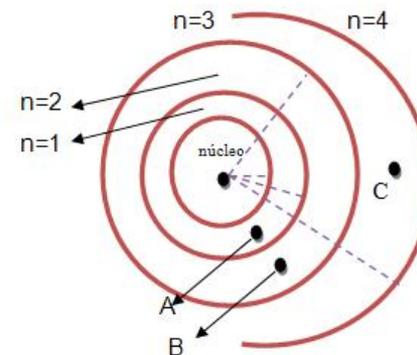
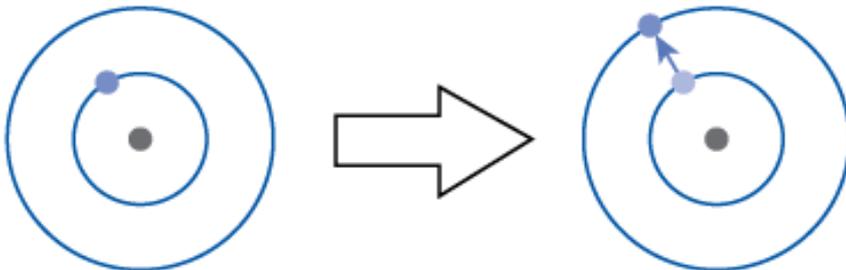


- 1) Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.
- 2) Os átomos existem apenas em certos estados estacionários. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas, indexadas por um número inteiro  $n = 1, 2, 3, 4 \dots$  (número quântico).
- 3) Cada estado estacionário possui uma energia discreta e bem definida  $E_m$ , ou seja, as energias são quantizadas.  $E_1, E_2, E_3, \dots$

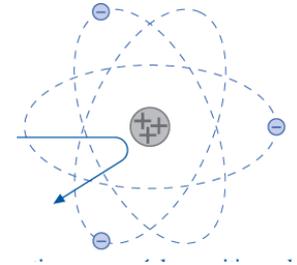
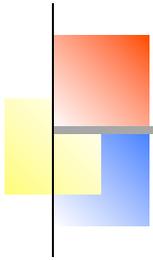
# Modelo atômico de Bohr (1913)



- 1) Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.
- 2) Os átomos existem apenas em certos estados estacionários. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas ao redor do número.  $n = 1, 2, 3, 4 \dots$  (número quântico).
- 3) Cada estado estacionário possui uma energia discreta e bem definida  $E_m$ , ou seja, as energias são quantizadas.  $E_1, E_2, E_3, \dots$
- 4) Existe um estado de energia mínima  $E_1$ , denominado **ESTADO FUNDAMENTAL**. Os demais estados  $E_2, E_3, E_4, \dots$  são os estados **EXCITADOS**.

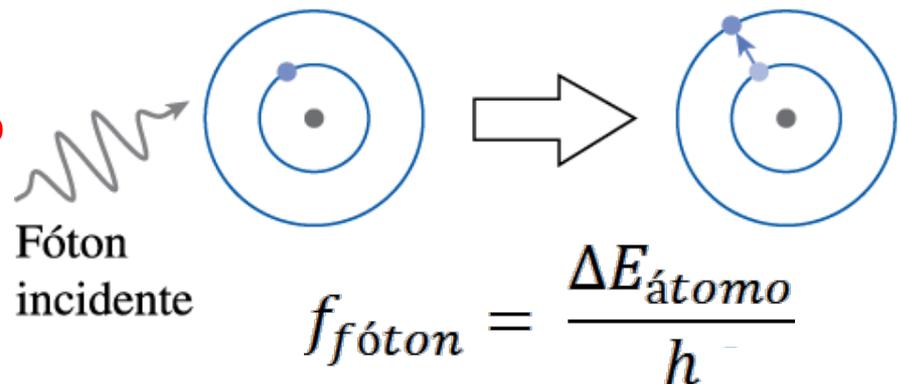


# Modelo atômico de Bohr (1913)



- 1) Um átomo consiste de elétrons negativos em órbita em torno de um núcleo positivo e muito pequeno – Rutherford.
- 2) Os átomos existem apenas em certos estados estacionários. Cada estado estacionário corresponde a um conjunto específico de órbitas eletrônicas ao redor do número.  $n = 1, 2, 3, 4 \dots$  (número quântico).
- 3) Cada estado estacionário possui uma energia discreta e bem definida  $E_m$ , ou seja, as energias são quantizadas.  $E_1, E_2, E_3, \dots$
- 4) Existe um estado de energia mínima  $E_1$ , denominado ESTADO FUNDAMENTAL. Os demais estados  $E_2, E_3, E_4, \dots$  são os estados EXCITADOS.

5) **Transições:** um átomo pode “saltar” de um estado estacionário inicial para outro final absorvendo ou emitindo um fóton com a energia necessária.

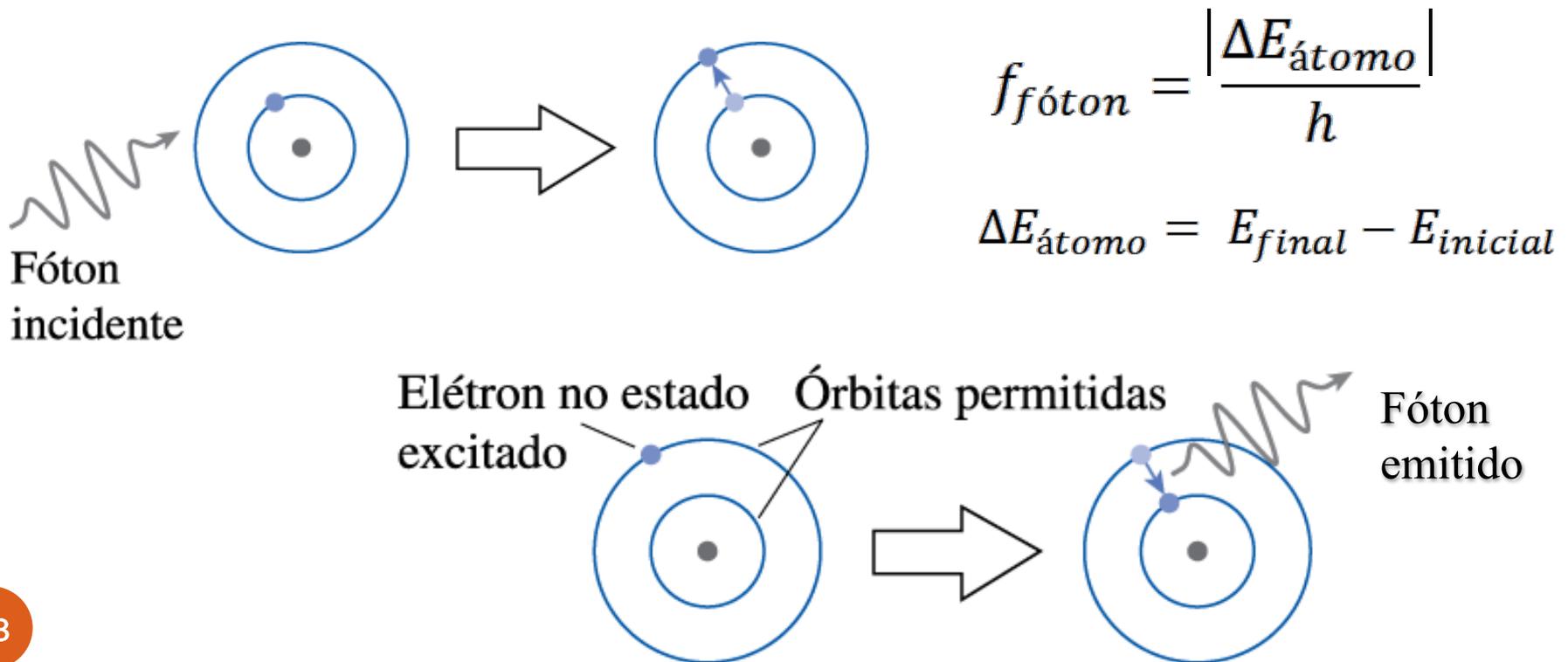


# Modelo atômico de Bohr (1913)

5) Transições: um átomo pode “saltar” de um estado estacionário inicial para outro final absorvendo ou emitindo um fóton com a energia necessária.

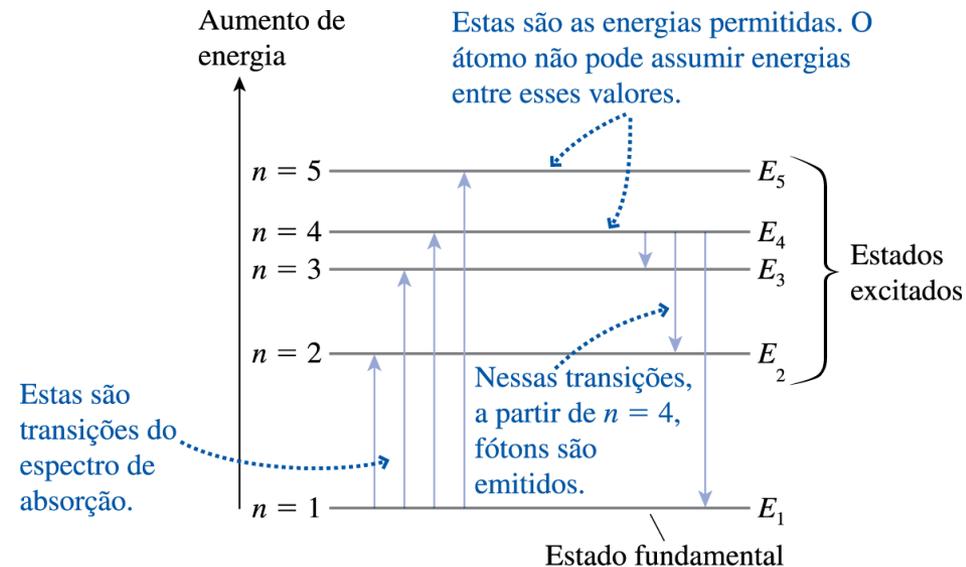
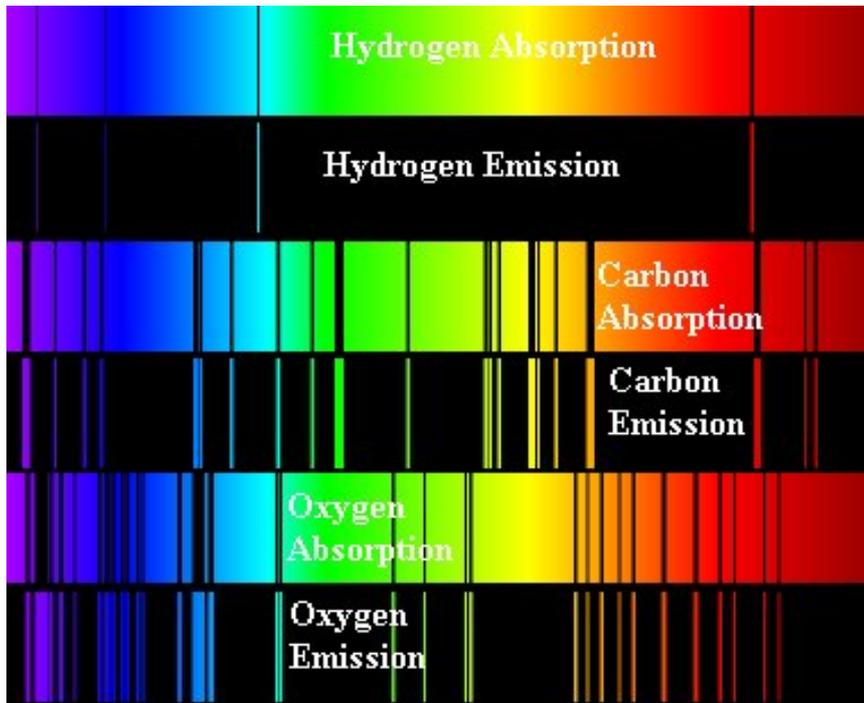
Absorção: sai do estado de menor energia para maior.

Emissão: sai do estado de maior energia para menor.



# Modelo atômico de Bohr (1913)

Espectro do átomo e diagrama de níveis de energia.



$$f_{\text{fóton}} = \frac{|\Delta E_{\text{átomo}}|}{h}$$

$$\Delta E_{\text{átomo}} = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}}$$

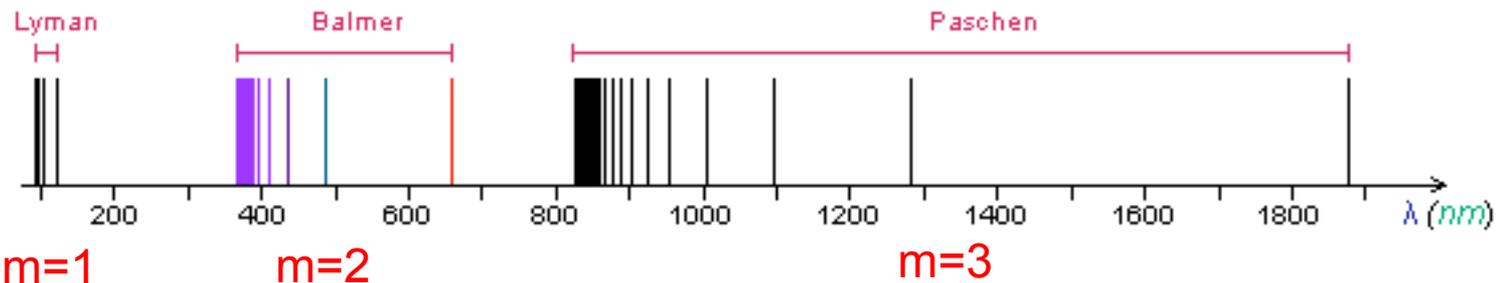
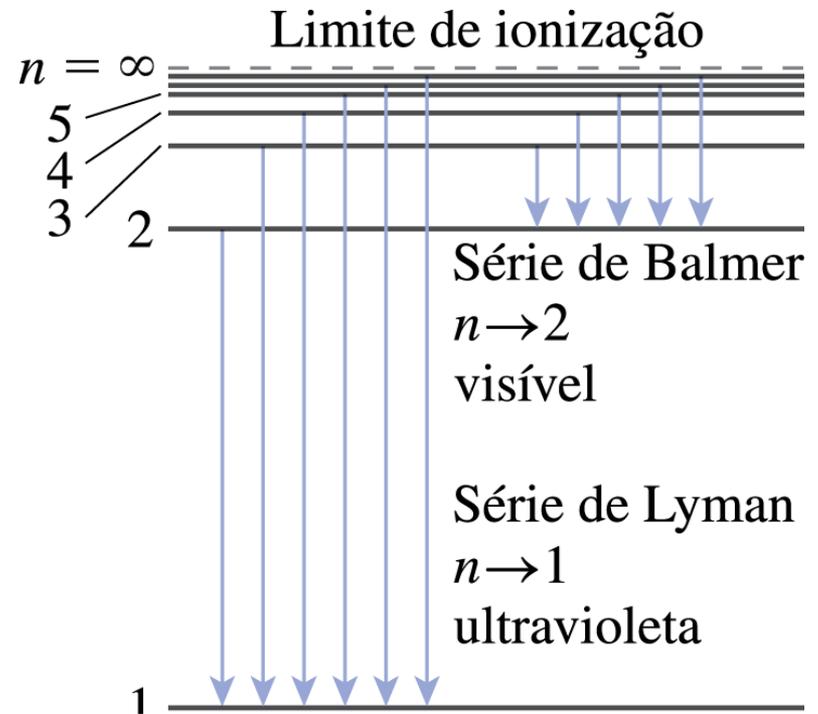
# Exemplo: espectro do Hidrogênio

## Fórmula de Rydberg

$$\lambda = \frac{91,8 \times 10^{-9} m}{\left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)}$$

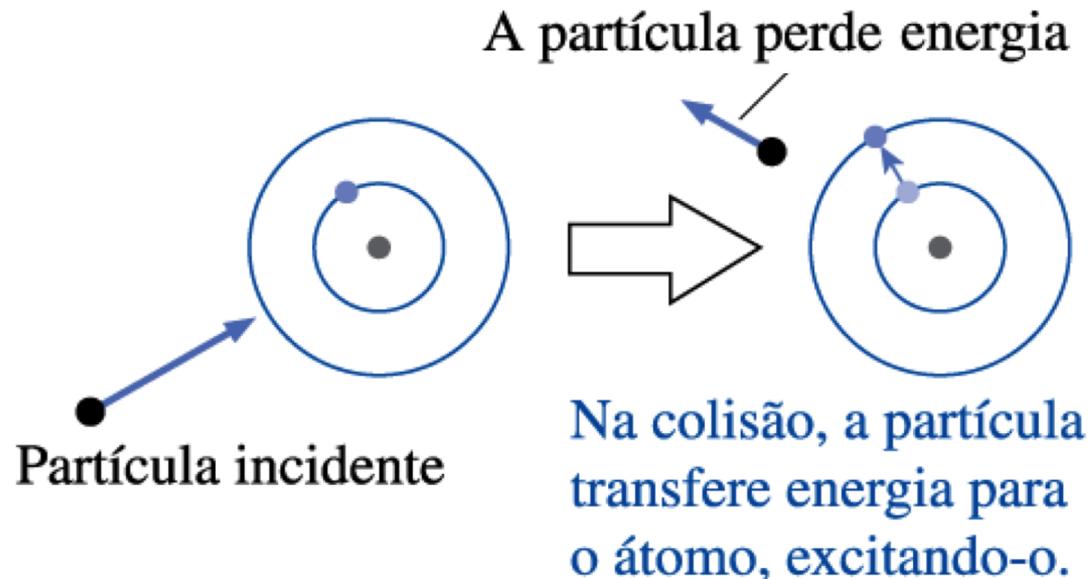
$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{13,6 eV}{\left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)}$$

## Interpretação



# Modelo atômico de Bohr (1913)

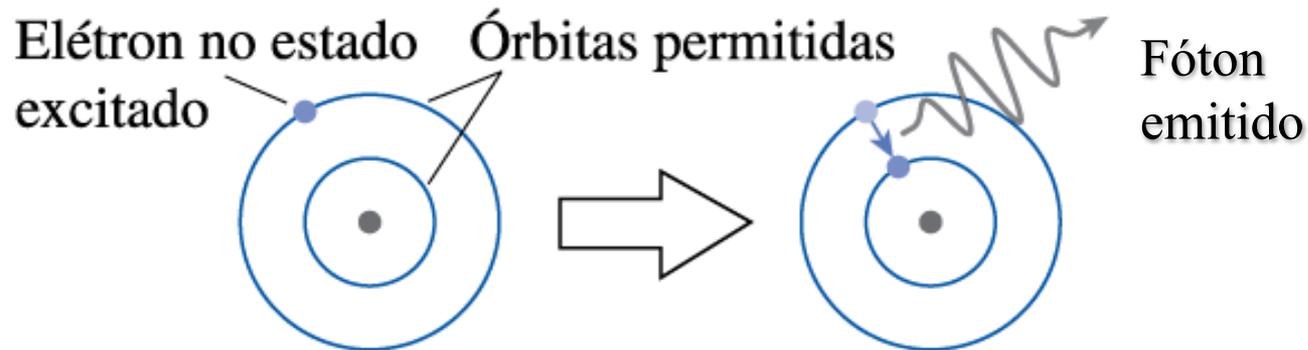
6) também pode ocorrer excitação por colisão: o átomo pode absorver energia ao colidir de forma inelástica com um elétron ou outro átomo, por exemplo.



$$\Delta E_{\text{átomo}} = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}} = -\Delta E_{\text{partícula}}$$

# Modelo atômico de Bohr (1913)

- 7) **Decaimento espontâneo:** um átomo num estado excitado tende *naturalmente* a perder energia, emitindo fótons e decaindo para níveis menos energéticos, até chegar ao estado fundamental.



# Modelo atômico de Bohr (1913)

Observações empíricas e suas explicações  
segundo o Modelo atômico de Bohr:

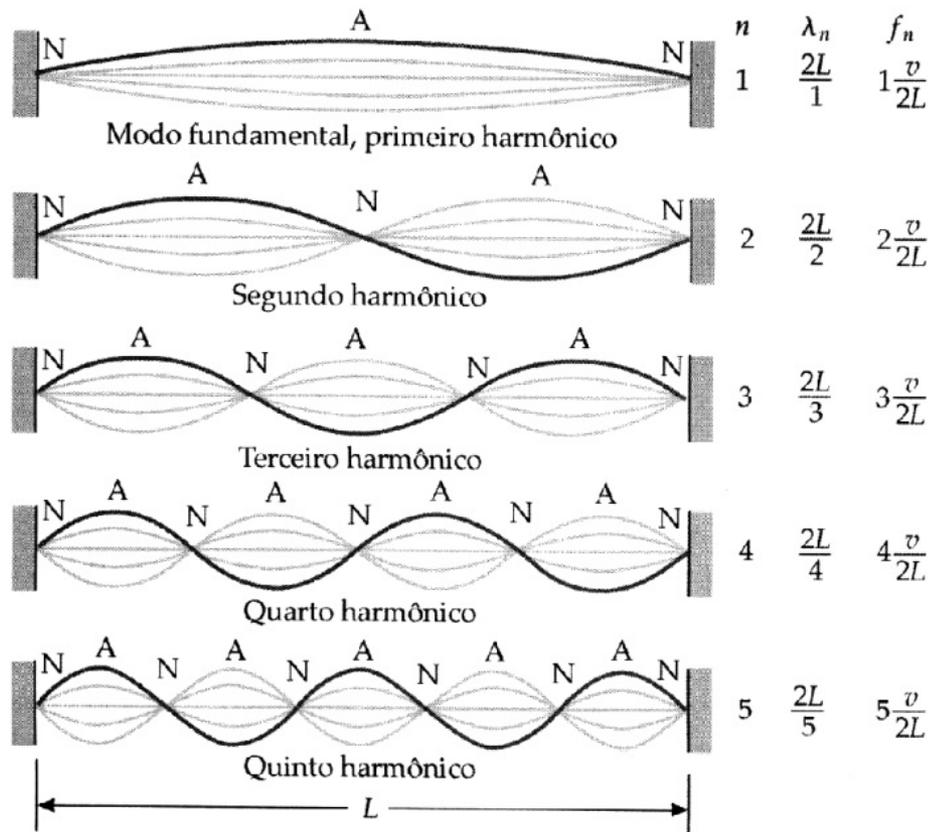
- 1) A matéria é estável pois não existe estado de energia mais baixo do que o fundamental
- 2) Os átomos emitem e absorvem um espectro discreto de luz pois só fótons com energias correspondendo às diferenças entre estados estacionários podem ser emitidos e absorvidos
- 3) Os espectros de emissão também podem ser observados quando um feixe de elétrons atravessa gás num tubo de raios catódicos pois os elétrons colidem com os átomos do gás, os quais são excitados para estados de maior energia e em seguida sofrem decaimento espontâneo.
- 4) As frequências tipicamente presentes nos espectros de absorção formam um subconjunto das que aparecem nos espectros de emissão correspondentes. Como os átomos tendem a estar no estado fundamental (devido aos decaimentos espontâneos), apenas linhas de absorção a partir deste estado serão tipicamente observadas na Natureza
- 5) Cada elemento da tabela periódica possui um espectro próprio.

**Não explicado !!**

**O que determina os estados estacionários de cada elemento?**

# Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Recordando: condições de contorno determinam os comprimentos possíveis de uma onda estacionária:



$$\lambda_n = 2L / n$$

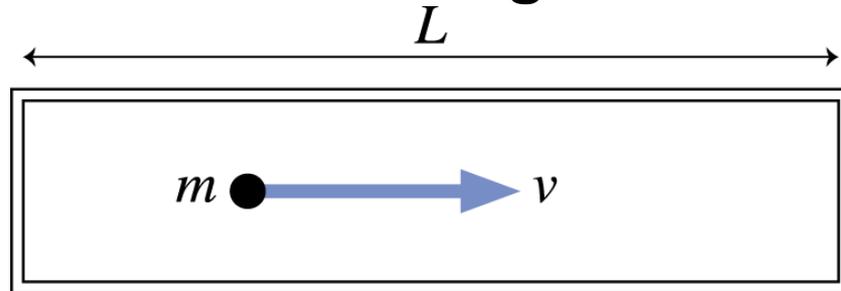
# Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

## Partícula em uma “caixa” rígida

**Partícula clássica:**

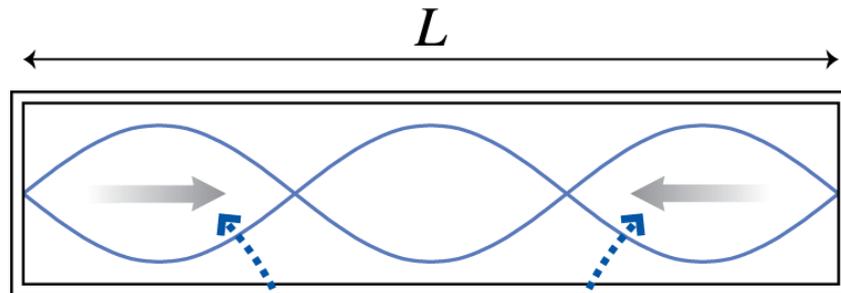
$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2$$

pode ter qq valor  $>0$



**Partícula quântica (onda de matéria):**

Para formar uma onda estacionária, a energia só pode assumir certos valores discretos, ou **quantizados**:



Ondas de matéria se deslocam em ambos os sentidos.

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

# Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Ex. 39.7 – Qual o menor valor de energia (nível fundamental) para uma gotícula de óleo como a usada por Millikan ( $1,0 \mu\text{m}$  de diâmetro), quando confinada em uma caixa de comprimento  $10 \mu\text{m}$ ? A densidade do óleo é de  $900 \text{ kg/m}^3$ .

R:  $E_1 = 1,2 \times 10^{-42} \text{ J} = 7,3 \times 10^{-24} \text{ eV}$ .

Energia muito pequena para conseguirmos perceber que não é zero.

P: Qual o menor valor de energia que essa gotícula pode absorver?

R:  $E_2 - E_1 = 3E_1 = 21,9 \times 10^{-24} \text{ eV}$

Novamente, muito pequeno para percebermos que  $E$  não assume um contínuo de valores.

# Ideia fundamental: Quantização da energia devido a condições de contorno

Ex. 39.8 – Quais são as duas primeiras energias permitidas para um elétron confinado em uma caixa unidimensional de 0,1 nm de comprimento, o tamanho aproximado de um átomo?

Ainda, qual a energia de transição do 1º nível excitado para o fundamental deste sistema?

R:  $E_1 = 38 \text{ eV}$        $E_2 = 4E_1 = 152 \text{ eV}$        $\Delta E_{12} = 114 \text{ eV}$

Agora obtemos valores substanciais – mas numericamente incorretos qdo comparados com o observado em átomos. (Não é surpreendente – átomos não são caixas rígidas!)

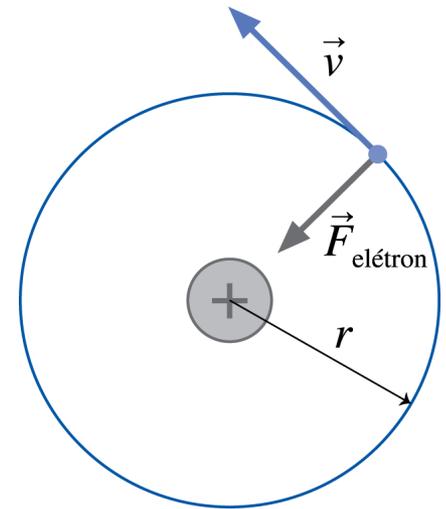
Vale pela lição geral: o confinamento de um partícula conduz diretamente à quantização de sua energia.

# Modelo Bohr-de Broglie do Hidrogênio

1) A energia para cada órbita continua sendo dada pela expressão clássica usando a Lei de Coulomb

$$E = K + U = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

(obs: podemos assumir o próton parado com boa aproximação, pois é muito mais pesado).



2) As órbitas são circulares, de modo que  $v$  e  $r$  estão ligados pela condição

$$F_{centripeta} = \frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

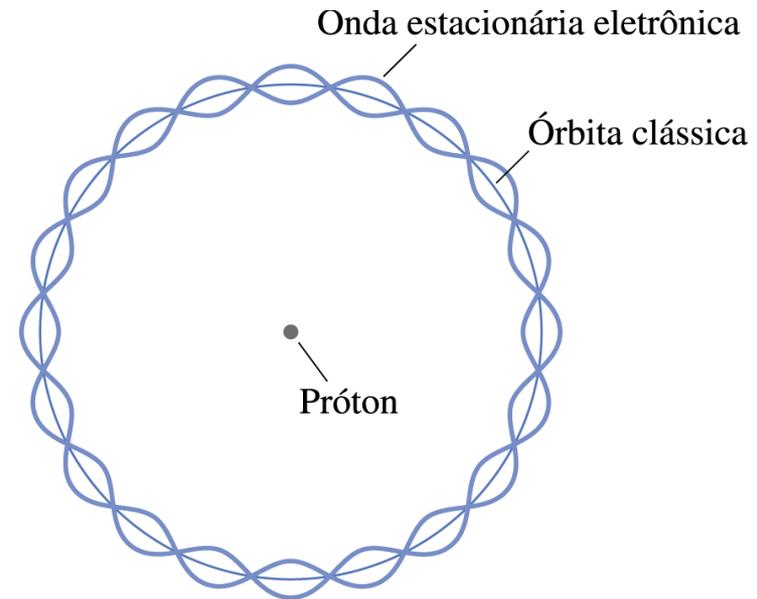
$$E(r) = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

**Energia para uma órbita de raio  $r$ .**  
**Mas por que só certos valores de  $r$  são permitidos?**

# Modelo Bohr-de Broglie do Hidrogênio

3) **Condição de quantização**: as órbitas permitidas são aquelas nas quais o elétron forma uma **onda estacionária**

$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mv}$$



**Substituindo na relação obtida em (2) acima, obtemos que só são permitidas órbitas com raios e energias dados por**

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \equiv n^2 a_B$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_B}$$

# Modelo Bohr-de Broglie do Hidrogênio

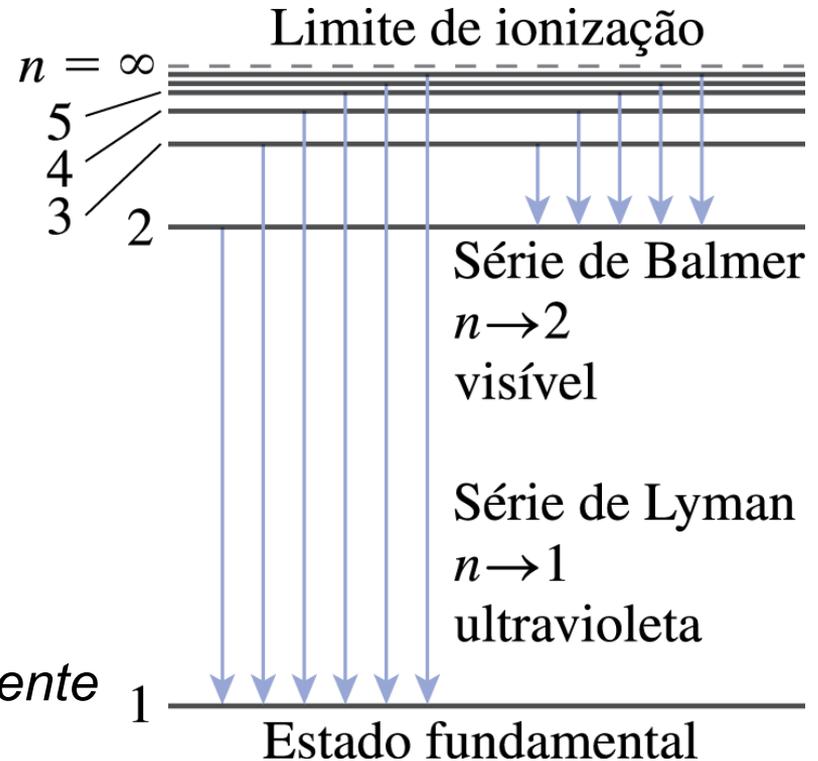
Calculando valores...

$$r_1 = a_B = 0.0529 \text{ nm}$$

$$E_1 = -13,6 \text{ eV !}$$

Como  $E_n = E_1 / n^2$ , deduzimos *exatamente* a fórmula de Rydberg!

$$E_n - E_m = \frac{13,6 \text{ eV}}{\left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)}$$

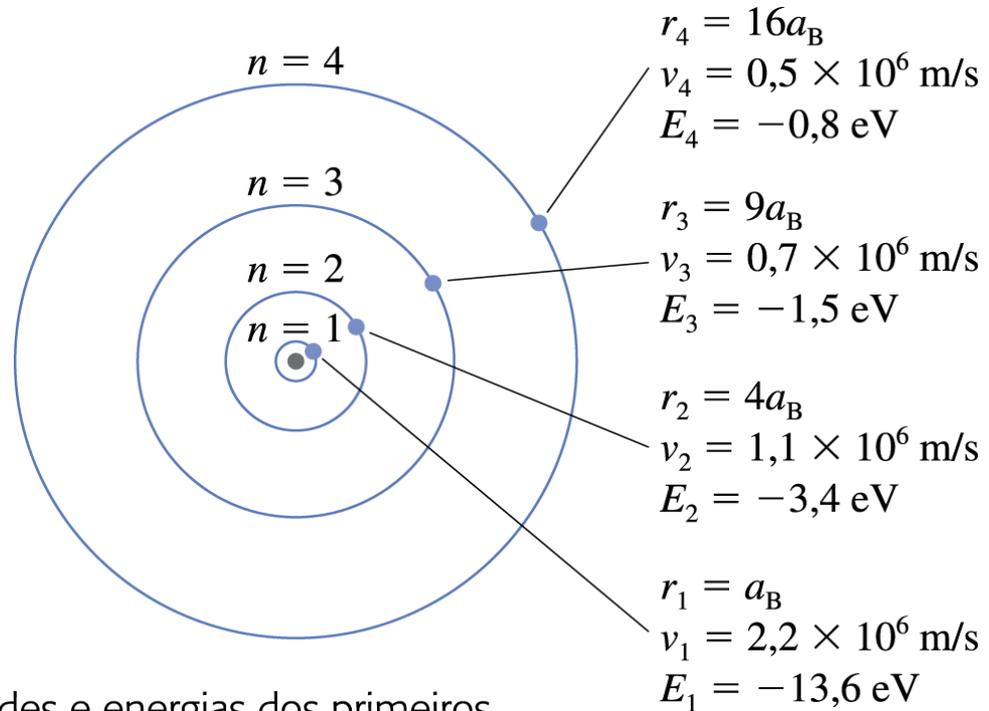


# Modelo Bohr-de Broglie do Hidrogênio

Calculando valores...

$$r_1 = a_B = 0.0529 \text{ nm}$$

$$E_1 = -13,6 \text{ eV !}$$



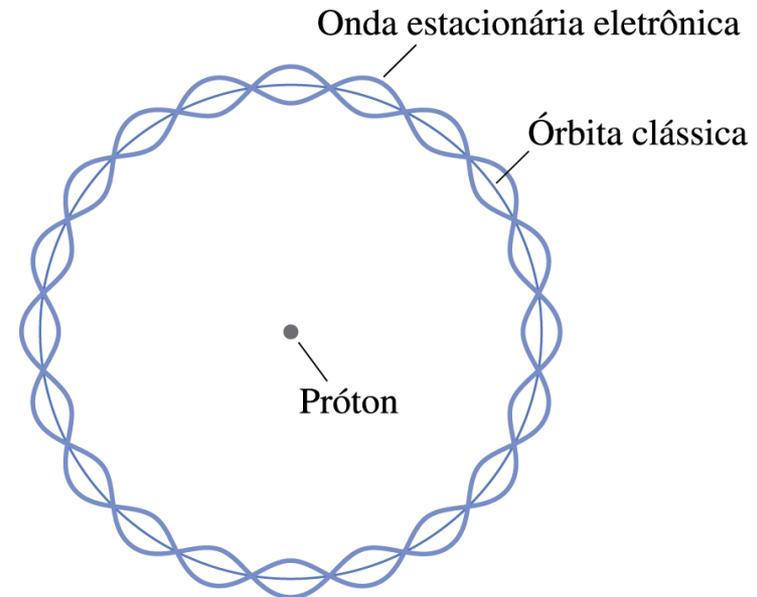
**TABELA 39.2** Raios, velocidades e energias dos primeiros cinco estados do átomo de hidrogênio de Bohr

$n$	$r_n$ (nm)	$v_n$ (m/s)	$E_n$ (eV)
1	0,053	$2,19 \times 10^6$	-13,60
2	0,212	$1,09 \times 10^6$	-3,40
3	0,476	$0,73 \times 10^6$	-1,51
4	0,846	$0,55 \times 10^6$	-0,85
5	1,322	$0,44 \times 10^6$	-0,54

# Quantização do momento angular

3) **Condição de quantização**: as órbitas permitidas são aquelas nas quais o elétron forma uma **onda estacionária**

$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mv}$$



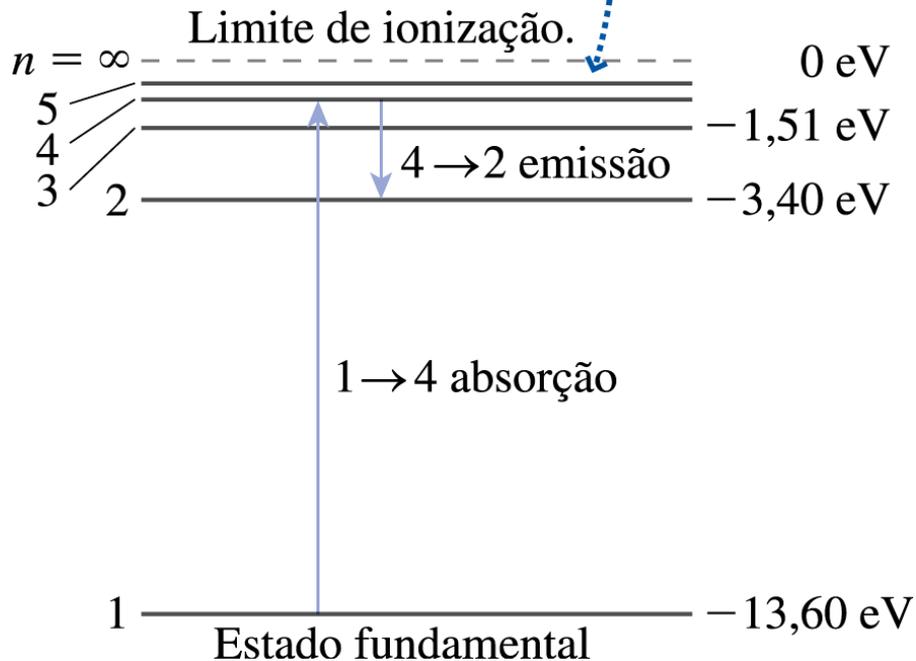
**Outra interpretação desta condição:**  $\overset{L}{\textcircled{mvr}} = n \frac{h}{2\pi} \equiv n\hbar$

**O momento angular orbital do elétron só pode ser um múltiplo inteiro de uma unidade básica,  $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$**

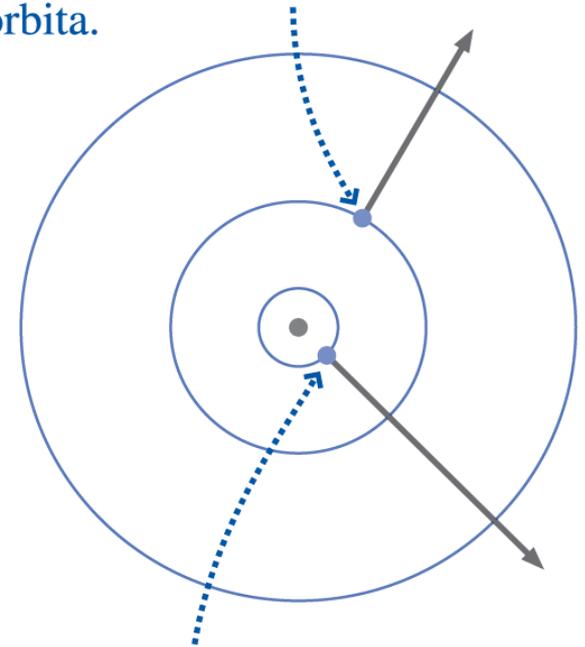
# Ionização do Hidrogênio

Previsão: Energia de ionização = 13,6 eV ( $n = 1 \rightarrow n = \infty$ )  
verificado em experimento

Muitos níveis de energia amontoados.



A energia de ligação é a energia necessária para remover um elétron de sua órbita.



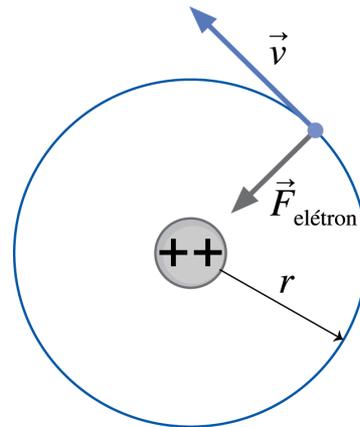
A energia de ionização é a energia necessária para gerar um íon através da remoção de um elétron do estado fundamental.

# Íons hidrogenóides

Átomos ionizados de forma a ficarem com um único elétron

A única diferença é a carga do núcleo, que é agora  $Z.e$

Ex:  $\text{He}^+$  ( $Z = 2$ )



**P:** como o espectro, a energia de ionização e o diâmetro deste íon se comparam com os de um Hidrogênio comum?

$$E = K + U = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{2\pi m_e e^2} \equiv n^2 a_B / 2$$

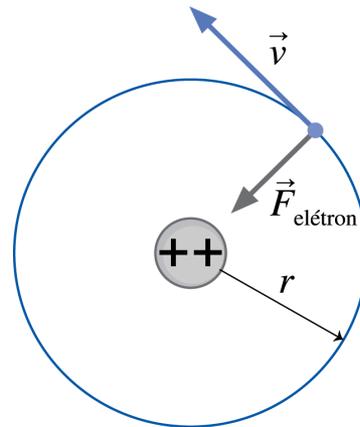
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_B}$$

# Íons hidrogenóides

Átomos ionizados de forma a ficarem com um único elétron

A única diferença é a carga do núcleo, que é agora  $Z.e$

Ex:  $\text{He}^+$  ( $Z = 2$ )



**P: como o espectro, a energia de ionização e o diâmetro deste íon se comparam com os de um Hidrogênio comum?**

**TABELA 39.3** Comparação entre íons hidrogenóides com  $Z = 1, 2,$  e  $3$

Íon	Diâmetro $2r_1$	Energia de ionização $ E_1 $	Comprimento de onda para $3 \rightarrow 2$
H ( $Z = 1$ )	0,106 nm	13,6 eV	656 nm
$\text{He}^+$ ( $Z = 2$ )	0,053 nm	54,4 eV	164 nm
$\text{Li}^{++}$ ( $Z = 3$ )	0,035 nm	125,1 eV	73 nm