

CAPÍTULO 1: IDEIAS FUNDAMENTAIS
DA MECÂNICA QUÂNTICA

IMPASSES DA MECÂNICA CLÁSSICA

1) RADIAÇÃO DE CORPO NEGRO

TODO CORPO EM EQUILÍBRIO TÉRMICO IRRADIA ONDAS ELETROMAGNÉTICAS A PARTIR DE SUA SUPERFÍCIE. ALÉM DISSO, ELAS REFLETEM PARTE DA RADIAÇÃO QUE INCIDE SOBRE ELAS E ABSORVEM OUTRA PARTE. "CORPOS NEGROS" SÃO IDEALIZAÇÕES DE CORPOS QUE NÃO REFLETEM NADA DA RADIAÇÃO INCIDENTE. CORPOS NEGROS, PORTANTO, ABSORVEM TODA A RADIAÇÃO INCIDENTE, ALÉM DE EMITIREM RADIAÇÃO TAMBÉM. EM EQUILÍBRIO, TODA A ENERGIA ABSORVIDA É IGUAL À IRRADIADA

UMA REALIZAÇÃO PRÁTICA DE UM CORPO NEGRO É UMA CAVIDADE DE MATERIAL OPACO QUE "RETEM" DENTRO DELA TODA A RADIAÇÃO EMITIDA POR SUAS PAREDES. UM PEQUENO ORIFÍCIO NA PAREDE ABSORVE PRATICAMENTE TODA A RADIAÇÃO INCIDENTE E PODEMOS TOMAR O ORIFÍCIO COMO UM CORPO NEGRO.

A RADIAÇÃO EMITIDA PELO ORIFÍCIO NADA MAIS É QUE UMA "AMOSTRA" DA RADIAÇÃO DENTRO DA CAVIDADE.

A **RADIÂNCIA ESPECTRAL** DE UM CORPO NEGRO À TEMPERATURA T É $R_T(\nu)$

$R_T(\nu) d\nu$ = POTÊNCIA IRRADIADA TOTAL COM FREQUÊNCIA ENTRE ν E $\nu + d\nu$ POR UNIDADE DE ÁREA DE SUPERFÍCIE DO CORPO NEGRO

A **RADIÂNCIA TOTAL** R_T É A INTEGRAL

$$R_T = \int_0^{\infty} R_T(\nu) d\nu$$

SE SOBERMOS A **DENSIDADE DE ENERGIA** DA RADIAÇÃO DENTRO DA CAVIDADE ENTRE ν E $\nu + d\nu$, $\rho_T(\nu)$, PODEMOS OBTER $R_T(\nu)$

$$R_T(\nu) = \frac{c}{4} \rho_T(\nu)$$

c = VELOCIDADE DA LUZ

POR OUTRO LADO, $\rho_T(\nu)$ PODE SER
CALCULADO COM A FÍSICA CLÁSSICA,
ESSENCIALMENTE:

$$\rho_T(\nu) = m(\nu) \langle E \rangle(T, \nu)$$

$m(\nu)$ = NÚMERO DE MODOS ELETROMAGNÉTICOS
(ONDAS ESTACIONÁRIAS) EM $[\nu, \nu + d\nu]$
POR UNIDADE DE VOLUME

$$m(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2$$

$\langle E \rangle(T, \nu)$ = ENERGIA MÉDIA DA RADIAÇÃO
COM FREQUÊNCIA ν À
TEMPERATURA T

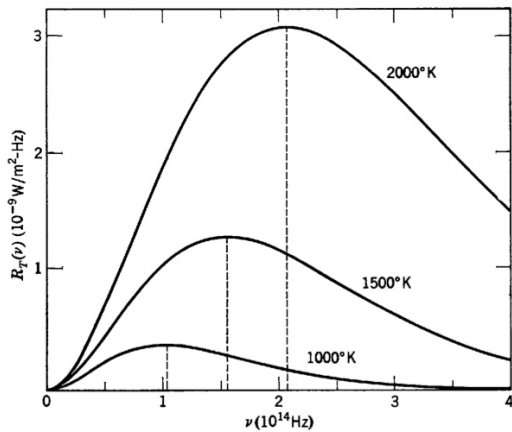
DA FÍSICA CLÁSSICA (TEOREMA DE EQUI-
PARTIÇÃO DE ENERGIA)

$$\langle E \rangle(T, \nu) = k_B T$$

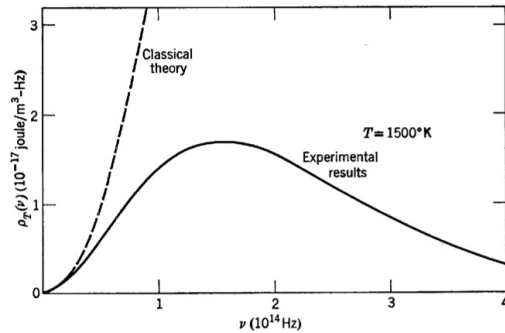
k_B = CONSTANTE DE BOLTZMANN

$$\Rightarrow \rho_T(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2 \Rightarrow \rho_T(\nu) = \frac{2\pi}{c^2} k_B T \nu^2$$

ESSA PREVISÃO CLÁSSICA NÃO ESTÁ EM ACORDO COM OS EXPERIMENTOS:



$R_T(\nu)$ PARA 3 TEMPERATURAS



$S_T(\nu)$ COMPARADO COM A PREVISÃO CLÁSSICA

RESOLUÇÃO DE PLANCK: (1900)

$E = m h \nu =$ ENERGIA DE CADA MODO DE FREQUÊNCIA ν É QUANTIZADA

NESSE CASO, USANDO A PRESCRIÇÃO DA FÍSICA ESTATÍSTICA:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (n h \nu) e^{-\frac{n h \nu}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n h \nu}{k_B T}}} = \frac{h \nu}{e^{\frac{h \nu}{k_B T}} - 1}$$

("PLANCKIANA")

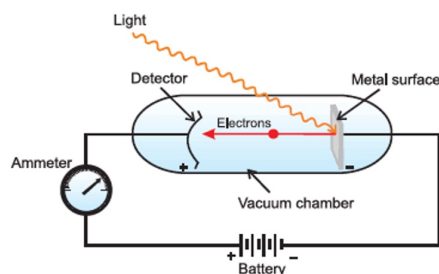
ASSIM :

$$R_T(\nu) = \frac{2\pi h}{c^2} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

O QUE ESTÁ EM GRANDE ACORDO COM OS EXPERIMENTOS SE:

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

2) EFEITO FOTOELÉTRICO



<https://zapsience.com/what-is-photoelectric-effect/>

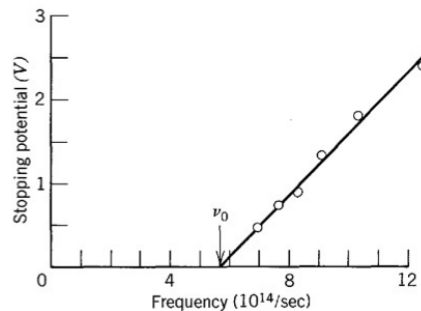
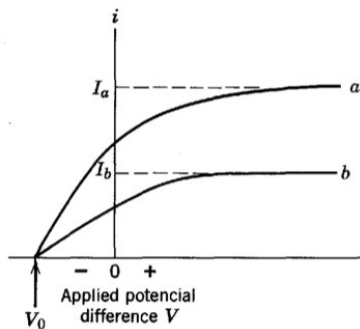
O EFEITO FOTOELÉTRICO É OBSERVADO COMO A EMISSÃO DE ELÉTRONS DA SUPERFÍCIE DE METAIS SOBRE OS QUAIS INCIDE RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA.

ALGUMAS OBSERVAÇÕES EMPÍRICAS NÃO PODIAM SER EXPLICADAS PELA FÍSICA CLÁSSICA:

- a) OS FOTOELÉTRONS EMITIDOS SÃO ACELERADOS ($V > 0$) OU DESACELERADOS ($V < 0$) POR UMA DIFERENÇA DE POTENCIAL V ENTRE A SUPERFÍCIE DO METAL E O "DETECTOR". PARA UMA DADA INTENSIDADE DA LUZ INCIDENTE, A CORRENTE FOTOELÉTRICA SATURA PARA ($V > 0$) GRANDE
- b) A CORRENTE DE SATURAÇÃO É PROPORCIONAL À INTENSIDADE DA LUZ

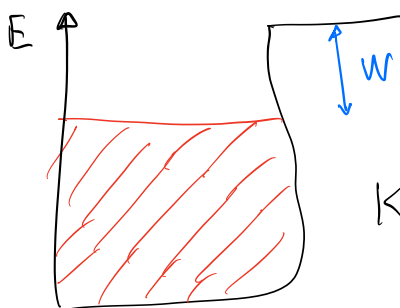
c) UM POTENCIAL DESACELERADOR ($V < 0$) CONSEGUE ZERAR A CORRENTE SE $|V| = V_0$. O VALOR V_0 DEPENDE DO METAL E DA FREQUÊNCIA DA LUZ MAS NÃO DA INTENSIDADE DA LUZ

d) EXISTE UMA FREQUÊNCIA MÍNIMA ν_0 ABAIXO DA QUAL O EFEITO NÃO É OBSERVADO.



EXPLICAÇÃO DE EINSTEIN (1905)

A LUZ É COMPOSTA DE QUANTA DE ENERGIA $E = h\nu$ (FÓTONS). OS FÓTONS SÃO ABSORVIDOS UM A UM PELOS ELÉTRONS. OS ELÉTRONS TEM ENERGIAS DE LIGAÇÃO:



$$E_{\text{lig}} \geq W$$

$$K = h\nu - E_{\text{lig}} = \text{ENERGIA CINÉTICA DOS ELÉTRONS}$$

K_{max} = ENERGIA CINÉTICA MÁXIMA
DOS FOTÓELETRONS

$$K_{max} = h\nu - W$$

ESSA ENERGIA MÁXIMA É IGUAL À
ENERGIA ELÉTRICA eV_0 QUE
DESTRÓI O EFEITO

$$K_{max} = h\nu - W = eV_0$$

$$\Rightarrow V_0 \times e \Rightarrow \boxed{V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W}{e}}$$

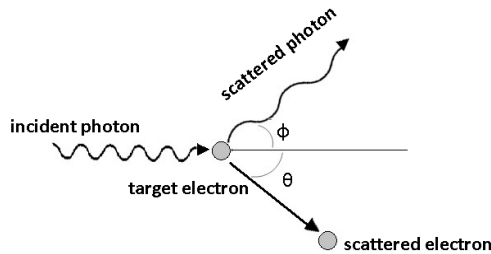
• RETA COM INCLINAÇÃO $\frac{h}{e}$

• $V_0 = 0 \Rightarrow h\nu_0 = W \Rightarrow \boxed{V_0 = \frac{W}{h}}$

A INTENSIDADE DA LUZ ALTERA O
NÚMERO DE FÓTONS INCIDENTES, MAS
NÃO A SUA ENERGIA

\Rightarrow O AUMENTO DO NÚMERO DE FÓTONS
AUMENTA A FOTOCORRENTE DE SATURAÇÃO

3) ESPALHAMENTO COMPTON (1923)



O ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE RAIOS-X PELA MATÉRIA, O CHAMADO ESPALHAMENTO COMPTON, FORNECE UMA DEMONSTRAÇÃO DIRETA DO CARÁTER CORPUSCULAR DA MATÉRIA. OS RESULTADOS DO EXPERIMENTO PODEN SER EXPLICADOS COMO UM PROCESSO DE ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE FÓTONS COM ENERGIA:

$$E = h\nu$$

E MOMENTO LINEAR:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

POR ELÉTRONS COM ENERGIA (RELATIVÍSTICA):

$$E_e = \gamma mc^2 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

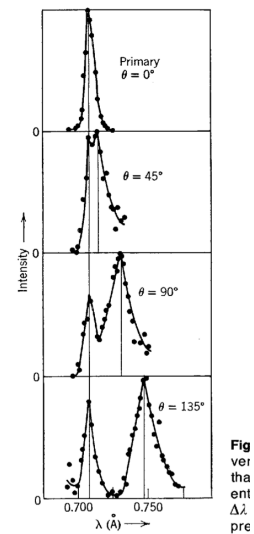
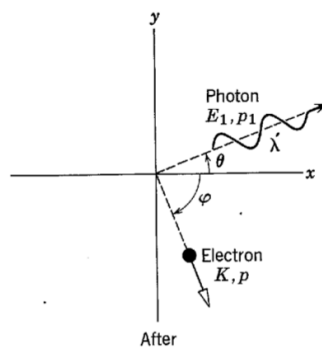
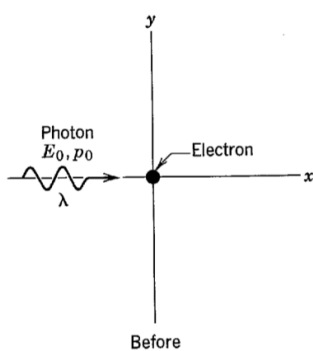
E MOMENTO LINEAR (RELATIVÍSTICO)

$$\vec{p}_e = \gamma m \vec{v} = \frac{m \vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

COMO SE FOSSE UMA COLISÃO DE PARTÍCULAS. A ANÁLISE NOS DÁ A RELAÇÃO ENTRE OS COMPRIMENTOS DE ONDA DOS FÓTONS ANTES (λ_0) E DEPOIS (λ_1) DA COLISÃO:

$$\lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_c (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} = 0.0243 \text{ \AA}$$



4) DIFRAÇÃO DE ELÉTRONS

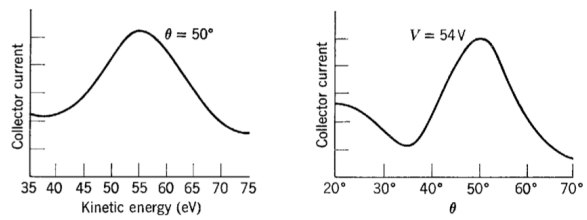
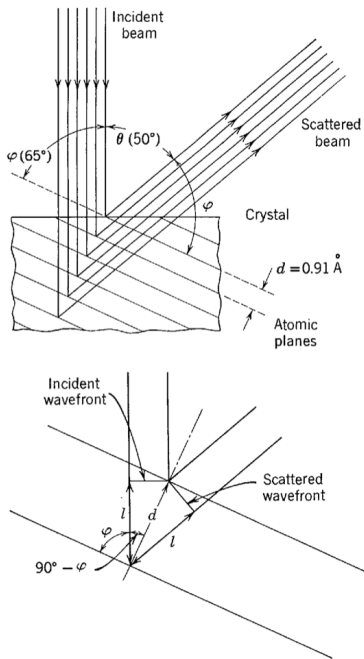
DO MESMO MODO QUE DEVEMOS CONSIDERAR O CARÁTER CORPUSCULAR DA LUZ, DE BROGLIE PROPÔS EM 1924 QUE TAMBÉM A MATÉRIA (ELÉTRONS, PRÓTONS,...) DEVERIA APRESENTAR COMPORTAMENTO ONDULATÓRIO. ELE ENTÃO PROPÔS QUE A "ONDA" DA MATÉRIA DEVERIA TER, COMO PARA A LUZ, AS SEGUINTE CARACTERÍSTICAS:

$$\text{FREQUÊNCIA } \nu = \frac{E}{h}$$

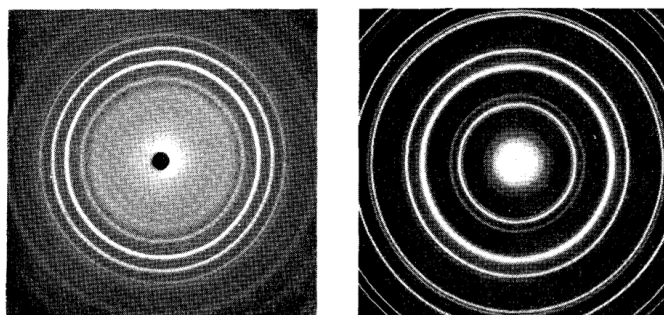
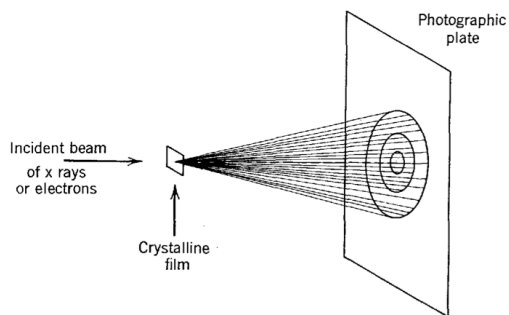
$$\text{COMPRIMENTO DE ONDA: } \lambda = \frac{h}{p}$$

ONDE E E p SÃO A ENERGIA E O MOMENTO LINEAR DA PARTÍCULA.

ESSA PREVISÃO FOI CONFIRMADA NOS EXPERIMENTOS DE DIFRAÇÃO DE ELÉTRONS PELA SUPERFÍCIE DE CRISTAIS, QUE AGIRIA COMO UMA REDE DE DIFRAÇÃO, POR DAVISSON E GERMER (1926), E POR G.P. THOMSON (1927) (POR TRANSMISSÃO ATRAVÉS DE FILMES)



Observações de Davisson e Germer



Difração de raios-x (esq.) é de elétrons (dir.) por um policristal

MAIS RECENTEMENTE, A DIFRAÇÃO DE MOLECULAS, AS VEZES BEM GRANDES, JA FOI OBSERVADA TAMBEM.

EXPERIMENTO DE DUPLA FENDA COM ELETRONS

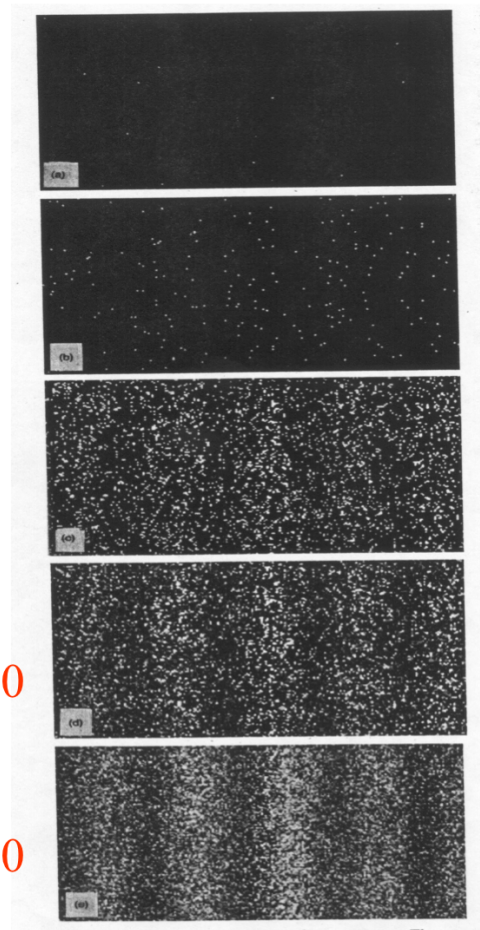
10

100

3000

20000

70000



A. TONOMURA, ET AL., AM. J. PHYS. 57, 117 (1989)
OS NUMEROS INDICAM O NUMERO DE ELECTRONS DETECTADOS

EXPERIMENTO DE DIFRAÇÃO COM C₆₀

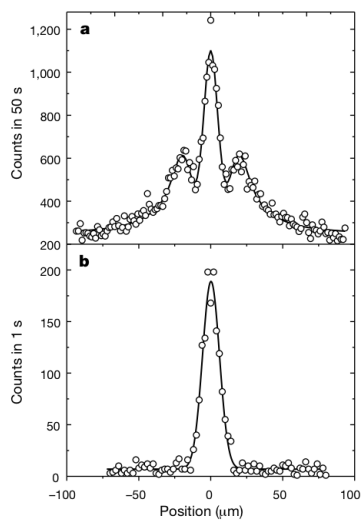


Figure 2 Interference pattern produced by C₆₀ molecules. **a**. Experimental recording (open circles) and fit using Kirchhoff diffraction theory (continuous line). The expected zeroth and first-order maxima can be clearly seen. Details of the theory are discussed in the text. **b**. The molecular beam profile without the grating in the path of the molecules.

Arndt, M., Nairz, O., Vos-Andreae, J. *et al.* Wave–particle duality of C₆₀ molecules. *Nature* **401**, 680–682 (1999)

INTERFERÊNCIA DE MACROMOLÉCULAS

Juffmann, T., Milic, A., Müllneritsch, M. *et al.* Real-time single-molecule imaging of quantum interference. *Nature Nanotech* **7**, 297–300 (2012).

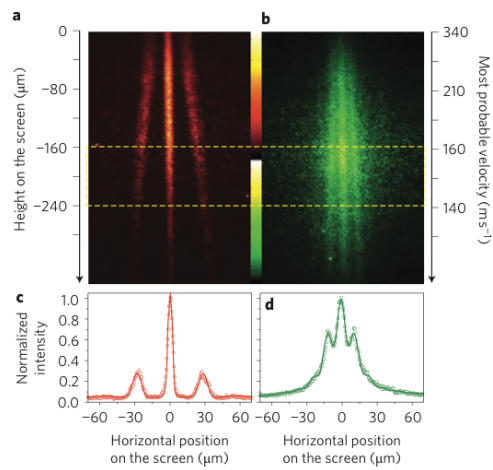
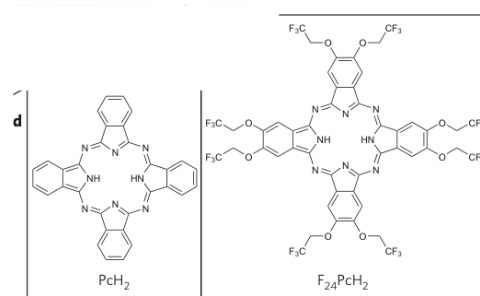


Figure 4 | Comparison of interference patterns for Pch₂ and F₂₄Pch₂. **a, b.** False-colour fluorescence images of the quantum interference patterns of Pch₂ (**a**) and F₂₄Pch₂ (**b**). We can deduce both the mass and the velocity



5) O ÁTOMO DE BOHR

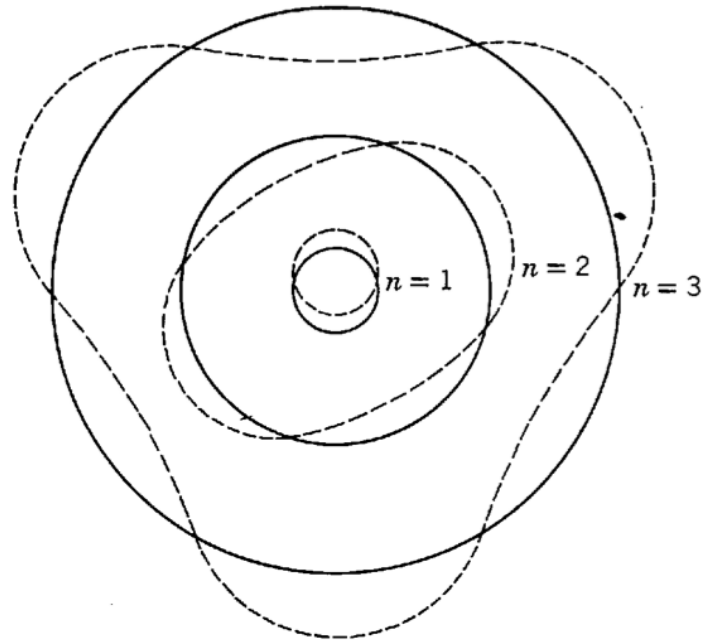
O MODELO DE RUTHERFORD PARA O ÁTOMO NÃO ERA COMPATÍVEL COM A FÍSICA CLÁSSICA. ELÉTRONS ORBITANDO EM TORNO DO NÚCLEO PESADO IRRADIARIAM ENERGIA ELETROMAGNÉTICA E "CAIRIAM" NO NÚCLEO AO PERDER ENERGIA.

BOHR PROPÓS UM "REMENDO" PARA ESSA SITUAÇÃO BASEADO NAS IDEIAS DE DE ONDAS. ELE SUPÔS QUE, NUM ÁTOMO DE UM ELÉTRON, ESTE FARIA MOVIMENTOS CIRCULARES EM ÓRBITAS QUANTIZADAS NAS QUAIS NÃO IRRADIARIAM. SÓ HAVERIA RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA QUANDO O ELÉTRON "PULASSE" ENTRE ÓRBITAS.

PARA DETERMINAR ESSAS ÓRBITAS, ELE PROPÓS QUE SUA CIRCUNFERÊNCIA CORRESPONDESSE A UM NÚMERO INTEIRO DE COMPRIMENTOS DE ONDA DE DE BROGLIE:

$$2\pi r_n = n \lambda = \frac{nh}{p_n} \Rightarrow r_n p_n = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$

ONDE USAMOS $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ $n = 1, 2, 3, \dots$



$$2\pi R_n = n \lambda$$

MAS $L_p = mvr$ É O MOMENTO ANGULAR DA ÓRBITA, QUE É ENTÃO UM MÚLTIPLO INTEIRO DE \hbar .

USANDO OS RESULTADOS DA MECÂNICA CLÁSSICA (PARA UM NÚCLEO DE CARGA ze)

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r_n^2} = m \frac{v_n^2}{r_n} \quad (\text{FORÇA CENTRÍPETA})$$

$$E_n = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (\text{ENERGIA MECÂNICA})$$

PODE-SE OBTER:

$$E_n = - \frac{m z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -(13.6 \text{ eV}) \frac{z^2}{n^2}$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{ze^2} n^2 = (0.5 \text{ \AA}) n^2$$

$$v_n = \frac{ze^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar} \frac{1}{n} = \left(2.2 \times 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}\right) \frac{1}{n}$$

O ESPECTRO DO HIDROGÊNIO OU DE OUTROS ÁTOMOS DE UM ELÉTRON PODE SER MUITO BEM EXPLICADO PELA TEORIA DE BOHR

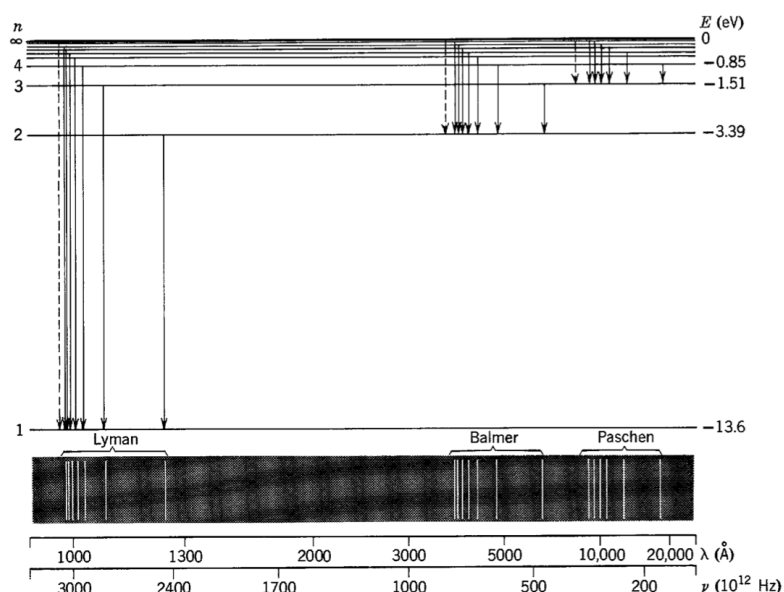


Figure 4-12 *Top:* The energy-level diagram for hydrogen with the quantum number n for each level and some of the transitions that appear in the spectrum. An infinite number of levels is crowded in between the levels marked $n=4$ and $n=\infty$. *Bottom:* The corresponding spectral lines for the three series indicated. Within each series the spectral lines follow a regular pattern, approaching the series limit at the shortwave end of the series. As drawn here, neither the wavelength nor frequency scale is linear, being chosen as they are merely for clarity of illustration. A linear wavelength scale would more nearly represent the actual appearance of the photographic plate obtained from a spectroscope. The Brackett and Pfund series, which are not shown, lie in the far infrared part of the spectrum.

MAS O MODELO DE BOHR ERA INSATIS-
FATÓRIO POR VÁRIAS RAZÕES:

- 1) ELE ERA UMA "MISTURA" DE IDEIAS
CLÁSSICAS E QUÂNTICAS
- 2) A TEORIA NÃO EXPLICA PORQUE
ALGUMAS TRANSIÇÕES SÃO OBSERVADAS
E OUTRAS NÃO
- 3) A TEORIA NÃO É GENERALIZÁVEL
PARA ÁTOMOS DE MUITOS ELÉTRONS

ESSAS QUESTÕES SÓ PUDERAM SER
SATISFATORIAMENTE RESOLVIDAS COM
A TEORIA FINAL DA MECÂNICA
QUÂNTICA, QUE VAMOS ESTUDAR.