O modelo quântico do átomo

Um bom modelo deve ser capaz de explicar propriedades atômicas, propriedades periódicas, ligação química...

Mecânica quântica - mecânica ondulatória

Elétrons descritos através de propriedades ondulatórias

Energia quantizada e fótons

- **Planck (1900)**: a energia só pode ser liberada (ou absorvida) por átomos em certos "pedaços de tamanhos mínimos", chamados quanta (*quantum*, no singular).

- A relação entre a energia e a frequência é $\mathbf{E} = \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{\nu}$, onde h é a constante de Planck ($6{,}626 \times 10^{-34}$ J s).

- Para entender a quantização, considere a subida em uma rampa *versus* a subida em uma escada: para a rampa, há uma alteração constante na altura, enquanto na escada há uma alteração gradual e quantizada na altura.

Energia quantizada e fótons

$$E = h\nu$$

Quanto maior a frequência de uma radiação, maior sua energia.

$$c = \nu\lambda \rightarrow \nu = c/\lambda$$

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

Quanto menor o comprimento de onda de uma radiação, maior sua energia.

Energia quantizada e fótons

O efeito fotoelétrico e os fótons

- O efeito fotoelétrico fornece evidências para a natureza de partícula da luz - “quantização”.

- Se a luz brilha na superfície de um metal, elétrons podem ser arrancados do metal.

- Os elétons somente serão expelidos se uma energia (ou frequência) mínima da luz é alcançada ($E = h \cdot \nu$).

- Abaixo da frequência mínima, nenhum elétron é expelido.

→ Aumentando a frequência (ENERGIA) da radiação: **?**

Energia quantizada e fótons

O efeito fotoelétrico e os fótons

- O efeito fotoelétrico fornece evidências para a natureza de partícula da luz - “quantização”.

- Se a luz brilha na superfície de um metal, elétrons podem ser arrancados do metal.

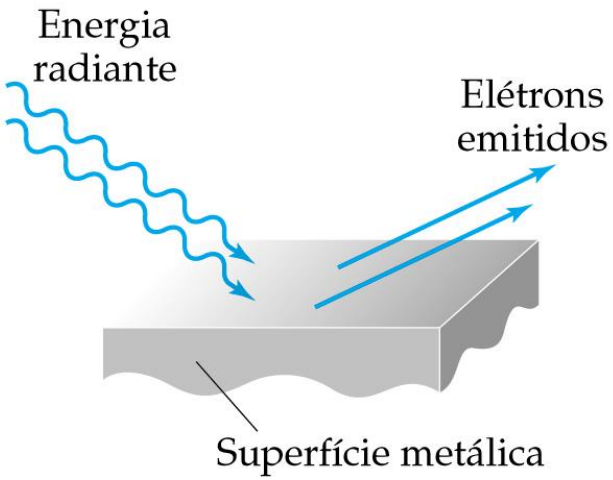
- Os elétons somente serão expelidos se uma energia (ou frequência) mínima da luz é alcançada.

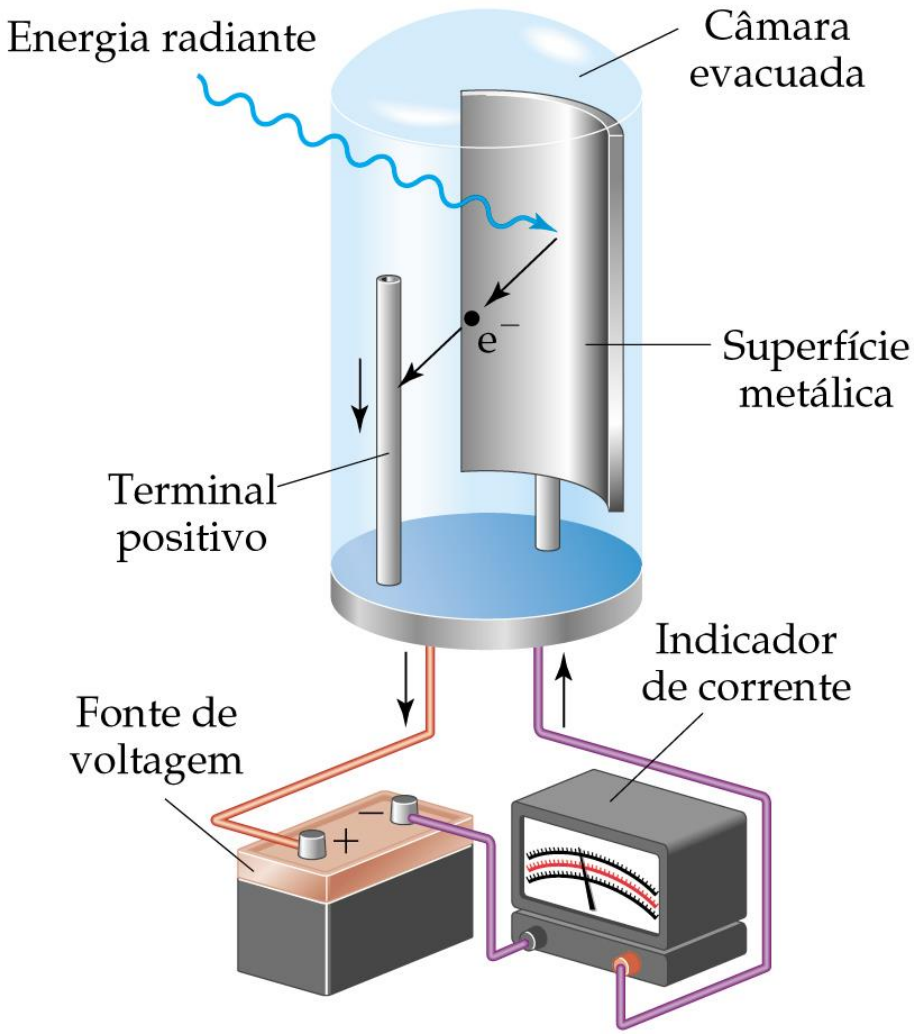
- Abaixo da frequência mínima, nenhum elétron é expelido.

→ Aumentando a frequência (ENERGIA) da radiação:
<u>o número de elétrons expelidos NÃO AUMENTA</u>!

Energia quantizada e fótons

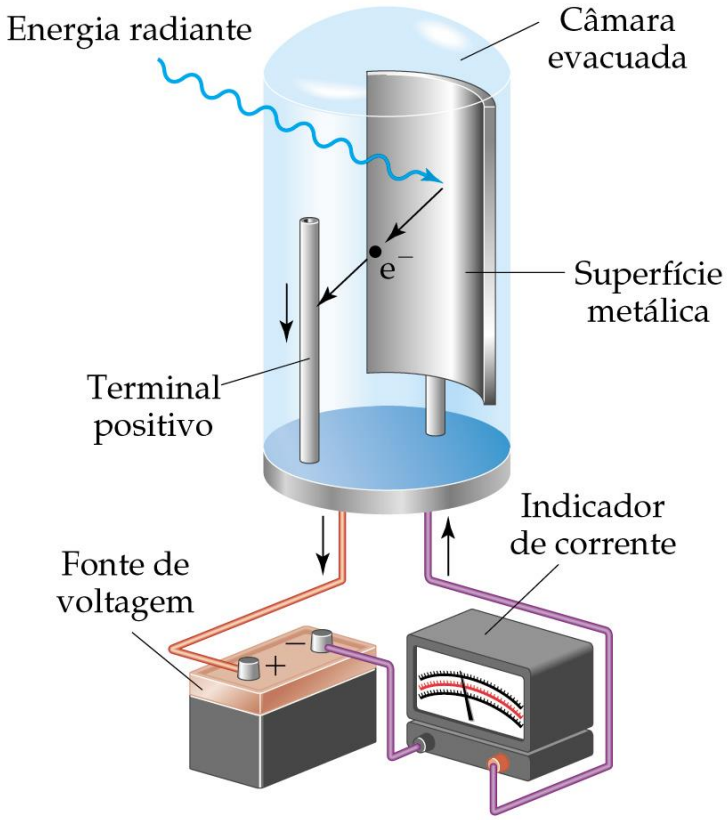
O efeito fotoelétrico e os fótons



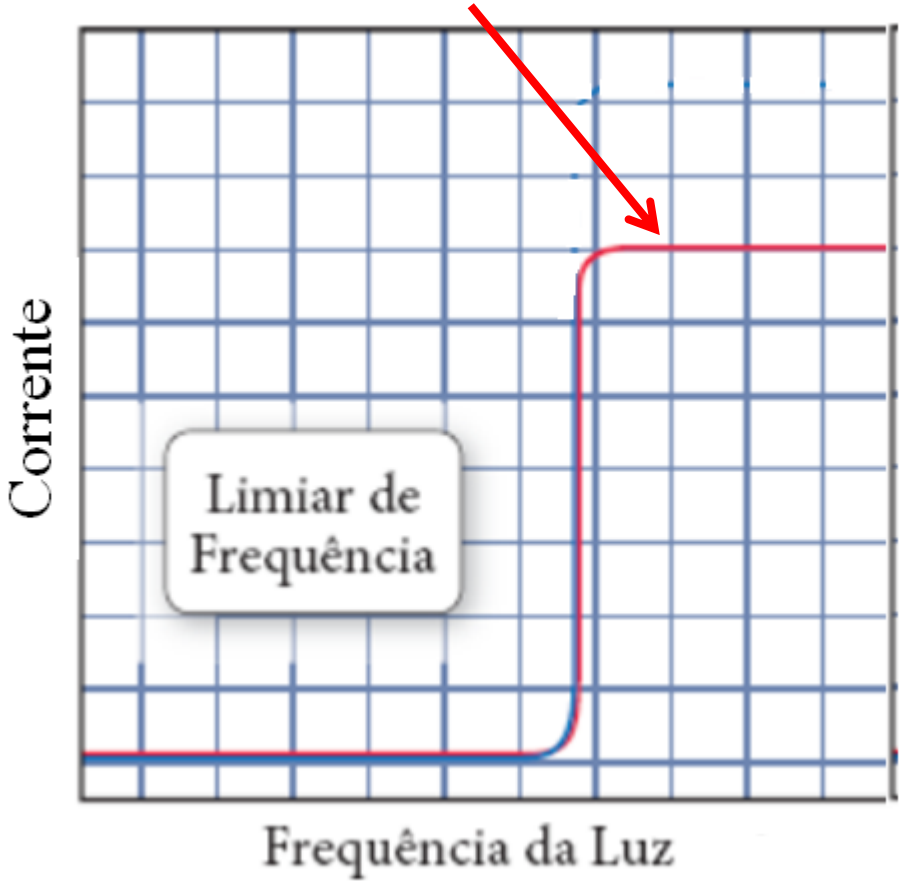


Energia quantizada e fótons

O efeito fotoelétrico e os fótons

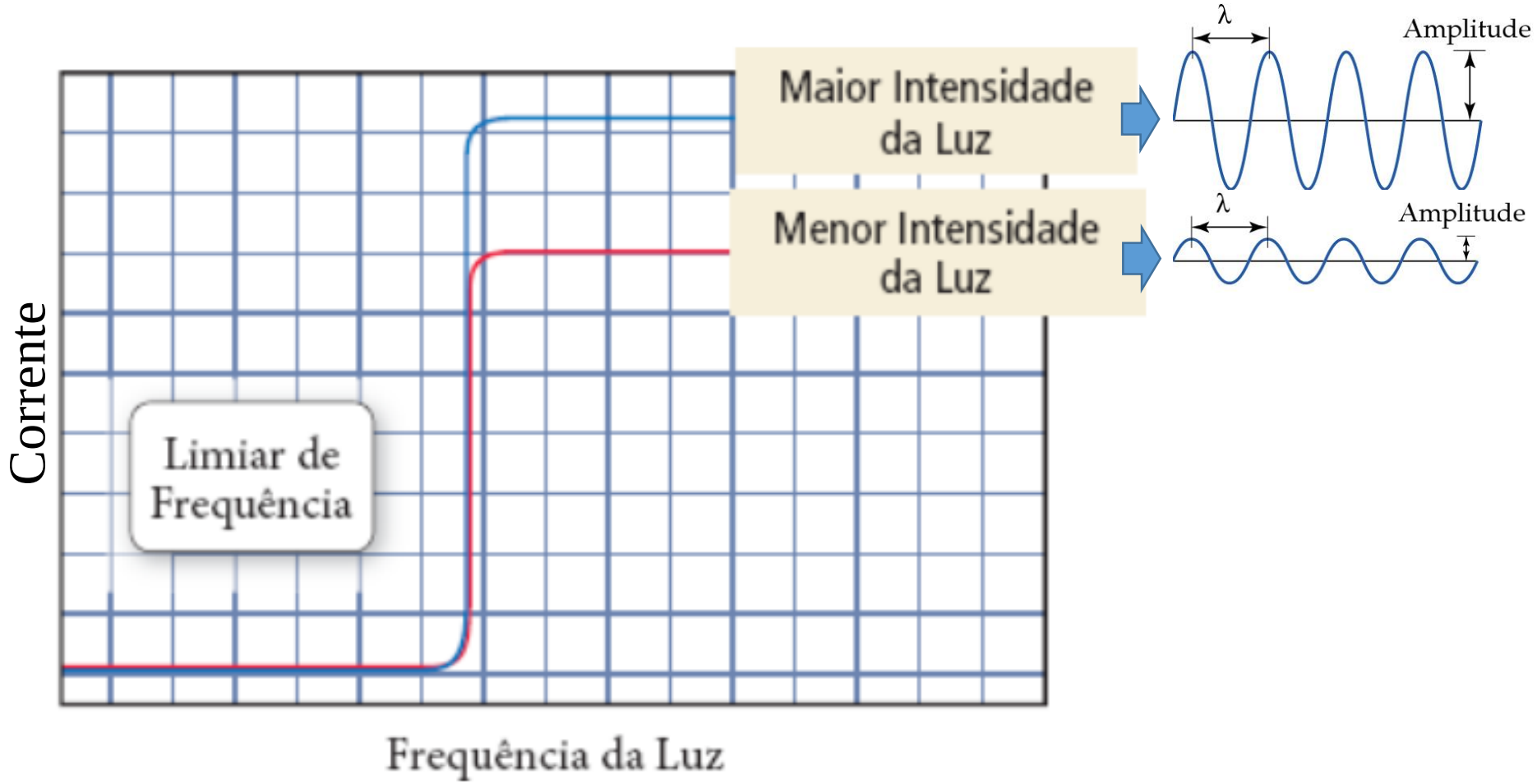


Aumentando a frequência (ENERGIA) da radiação
o número de elétrons expelidos NÃO AUMENTA!



Energia quantizada e fótons

O efeito fotoelétrico e os fótons

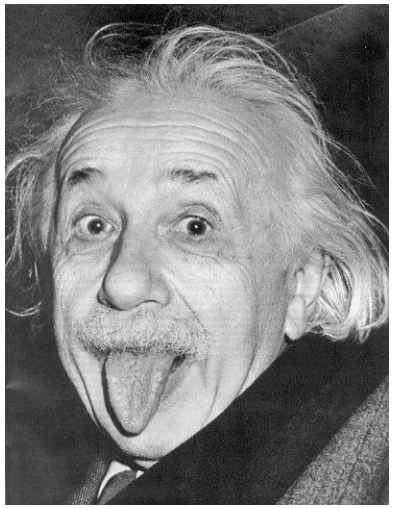


Acima da frequência mínima, o número de elétrons expelidos depende apenas da intensidade (amplitude) da luz.

Energia quantizada e fótons

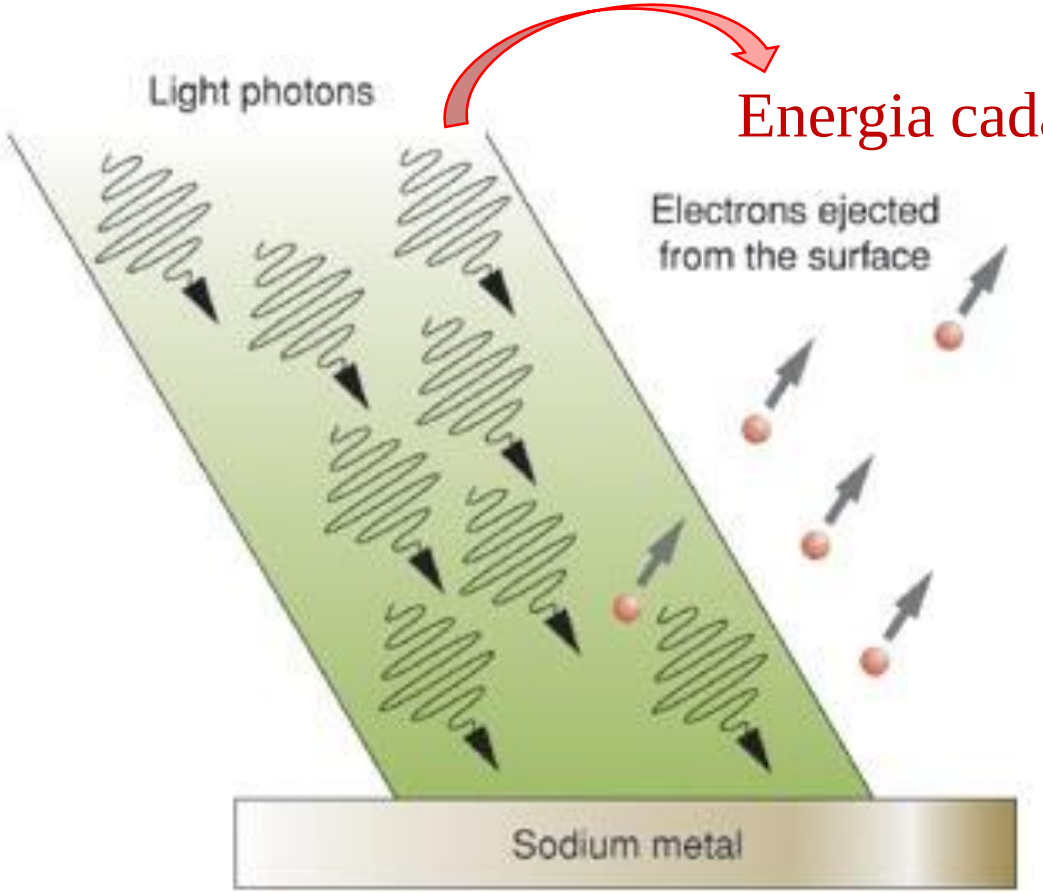
O efeito fotoelétrico e os fótons

- **Einstein (1905)** supôs que a luz trafega em pacotes de energia denominados fótons.
- A energia de um fóton: $E = h\nu = hc/\lambda$



Energia quantizada e fótons

O efeito fotoelétrico e os fótons



Energia cada fóton = $h\nu$

Cada elétron absorve a energia de um único fóton: se a energia (frequência) desse fóton for suficiente, o elétron é arrancado do átomo.

Energia quantizada e fótons

Qual a energia de um fóton cujo comprimento de onda seja de 337 nm?

$$E_{fóton} = hc/\lambda$$

$$E_{fóton} = (6{,}662\times10^{-34}\ \mathrm{J.\cancel{s}})(3{,}00\times10^{8}\ \mathrm{\cancel{m}.\cancel{s}^{-1}})/3{,}37\times10^{-7}\mathrm{\cancel{m}}$$

$$E_{fóton} = 5{,}90\times10^{-19}\mathrm{J}$$

Energia quantizada e fótons

Um pulso de laser de gás nitrogênio com um comprimento de onda de 337 nm contém 3,83 mJ de energia. Quantos fótons ele contém?

$$E_{fóton} = hc/\lambda = (6{,}662\times10^{-34}\ \mathrm{J.s})(3{,}00\times10^{8}\ \mathrm{m.s^{-1}})/3{,}37\times10^{-7}\mathrm{m} = 5{,}90\times10^{-19}\mathrm{J}$$

1 fóton ---------- $5{,}90 \times 10^{-19}$J

x fótons ---------- $3{,}83 \times 10^{-3}$J

$$\text{x fótons} \times 5{,}90\times10^{-19}\mathrm{J} = 1 \times 3{,}83\times10^{-3}\mathrm{J}$$

$$\text{x fótons} = 3{,}83\times10^{-3}\mathrm{J} / 5{,}90\times10^{-19}\mathrm{J}$$

Número de fótons no pulso = $6{,}49\times10^{15}$ fótons

Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons

- A energia é conservada.

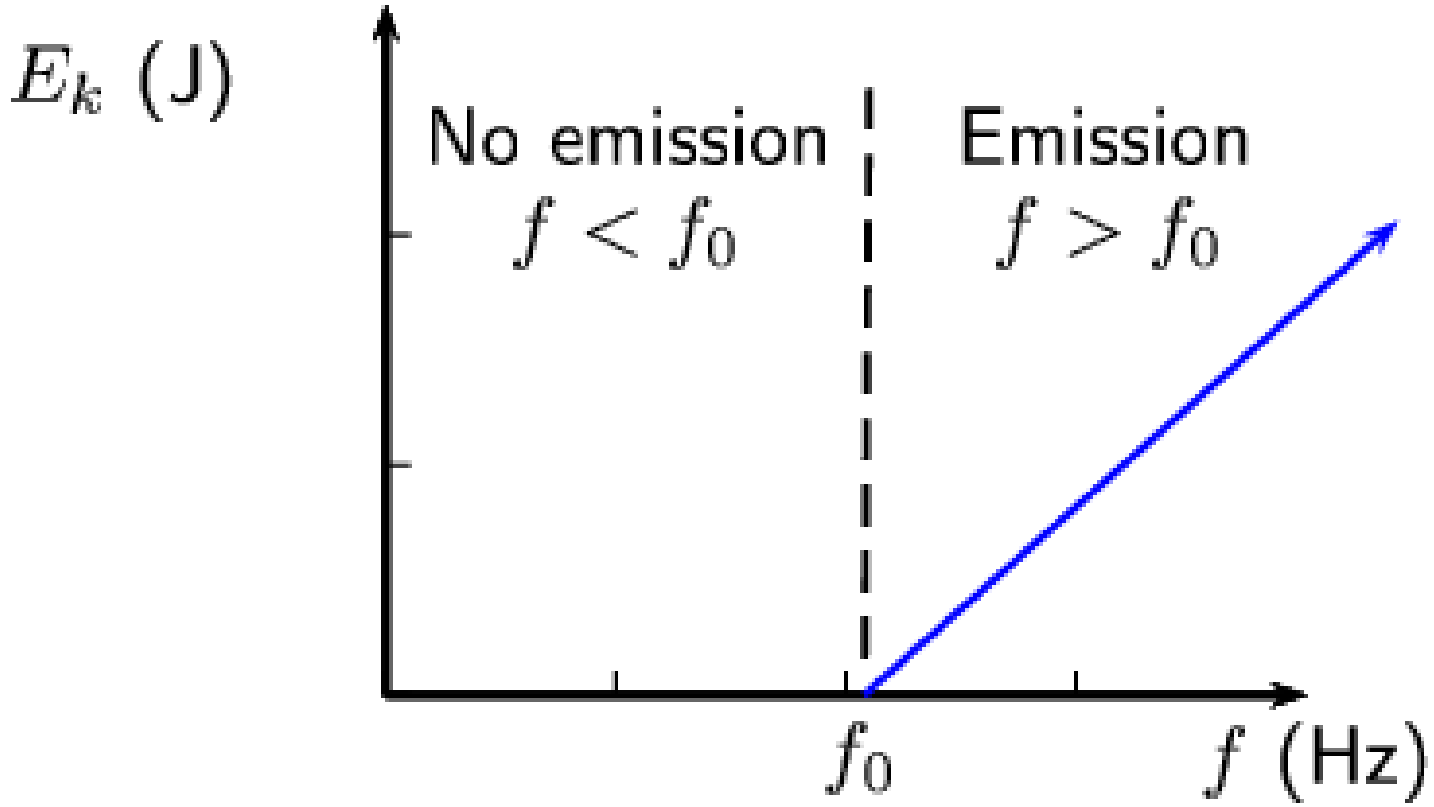
- A energia necessária para arrancar o elétron do átomo é igual à energia de ligação elétron – núcleo.

- Quando um fóton de energia maior do que aquela necessária para arrancar o elétron é absorvido, o elétron sai com uma "energia extra", na forma de energia cinética.

- A energia cinética do elétron ejetado, portanto, é a diferença entre a energia do fóton incidente ($h\nu$) e a energia de ligação do elétron (ϕ): **energia cinética = $h\nu - \phi$**

Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons



Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons

Lista de exercícios – Questão 5

- É necessário um fóton com energia mínima de $4{,}41\times10^{-19}$J para emitir elétrons do metal sódio.

1) Qual a energia de ligação do elétron?

2) Qual a frequência mínima de luz necessária para emitir elétrons do sódio pelo efeito fotoelétrico?

3) Qual o comprimento de onda dessa luz?

4) Se o sódio é irradiado com luz de 439 nm, qual é a possível energia cinética máxima dos elétrons emitidos?

Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons

• É necessário um fóton com energia mínima de $4{,}41\times10^{-19}$J para emitir elétrons do metal sódio = energia de ligação do elétron

2) Qual a frequência mínima de luz necessária para emitir elétrons do sódio pelo efeito fotoelétrico?

$E = h\nu \rightarrow 4{,}41\times10^{-19}\text{J} = 6{,}626\times10^{-34}\ \text{J.s} \times \nu$

$\nu = 4{,}41\times10^{-19}\text{J} / 6{,}626\times10^{-34}\ \text{J.s}$

$\boldsymbol{\nu = 6{,}656 \times10^{14}\ s^{-1}}$

Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons

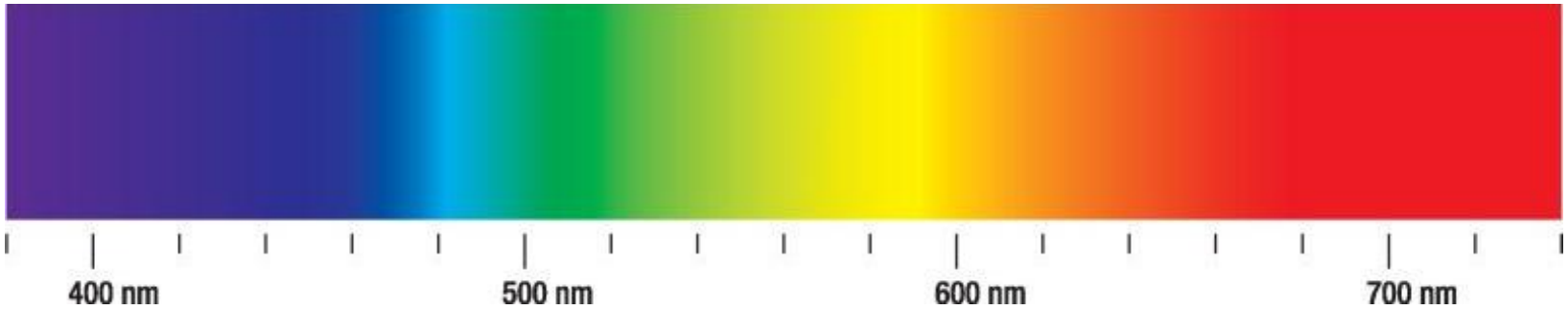
• É necessário um fóton com energia mínima de $4{,}41\times10^{-19}$J para emitir elétrons do metal sódio.

3) Qual o comprimento de onda dessa luz?

$c = \lambda\nu \rightarrow 3{,}00\times10^{8}\ ms^{-1} = \lambda \times 6{,}656 \times10^{14}\ s^{-1}$

$\lambda = 3{,}00\times10^{8}\ ms^{-1} / 6{,}656 \times10^{14}\ s^{-1}$

$\lambda = 4{,}51\times10^{-7}$ m = 451 nm (luz violeta)



Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons

•É necessário um fóton com energia mínima de $4{,}41\times10^{-19}$J para emitir elétrons do metal sódio.

4) Se o sódio é irradiado com luz de 439 nm, qual é a possível energia cinética máxima dos elétrons emitidos?

$E = h\nu$; $c = \lambda\nu \rightarrow E = hc/\lambda$

$E = 6{,}626\times10^{-34}$ J.s $\times$ $3{,}00\times10^{8}$ ms^{-1} / $4{,}39\times10^{-7}$ m

$E = 4{,}53\times10^{-19}$ J

$E_c = h\nu - \phi$

$E_c = 4{,}53\times10^{-19}$ J - $4{,}41\times10^{-19}$J = **$1{,}18\times10^{-20}$J**

Energia quantizada e fótons

Energia cinética dos elétrons e os fótons

energia cinética = $h\nu - \phi$

Luz de três diferentes comprimentos de onda, 125 nm, 455 nm e 632 nm ilumina uma superfície metálica. As observações para cada comprimento de onda, marcadas como A, B e C, são as que seguem:

A: Não foram observados fotoelétrons.

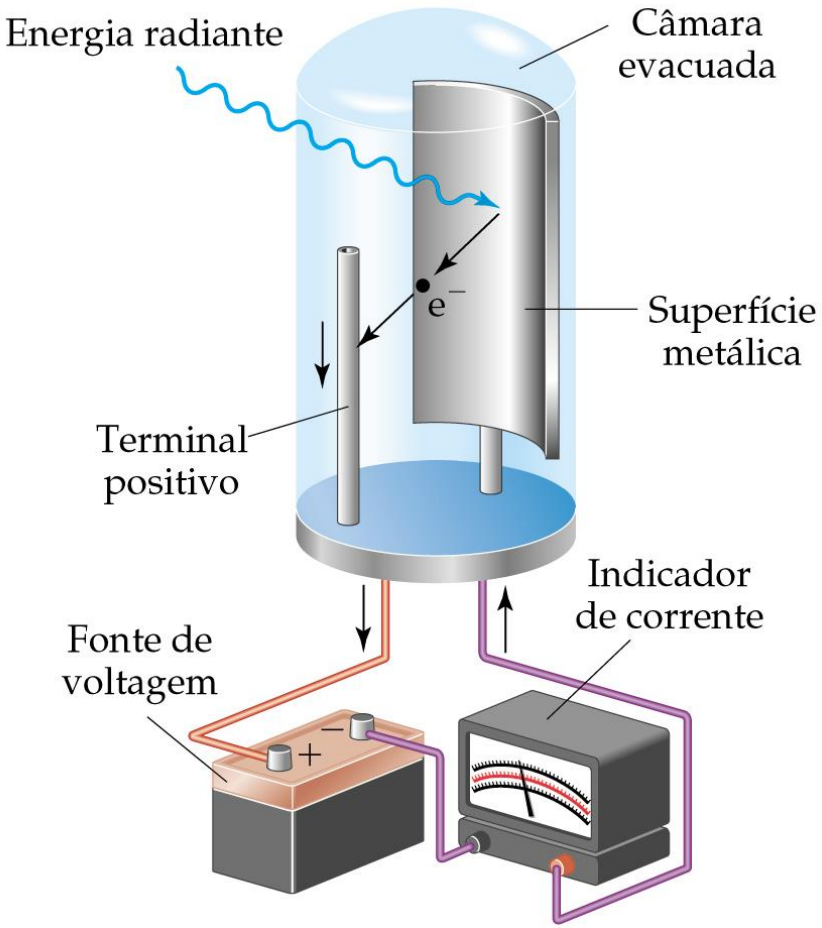
B: Foram observados fotoelétrons com uma energia cinética de 155 kJ.

C: Foram observados fotoelétrons com uma energia cinética de 51 kJ.

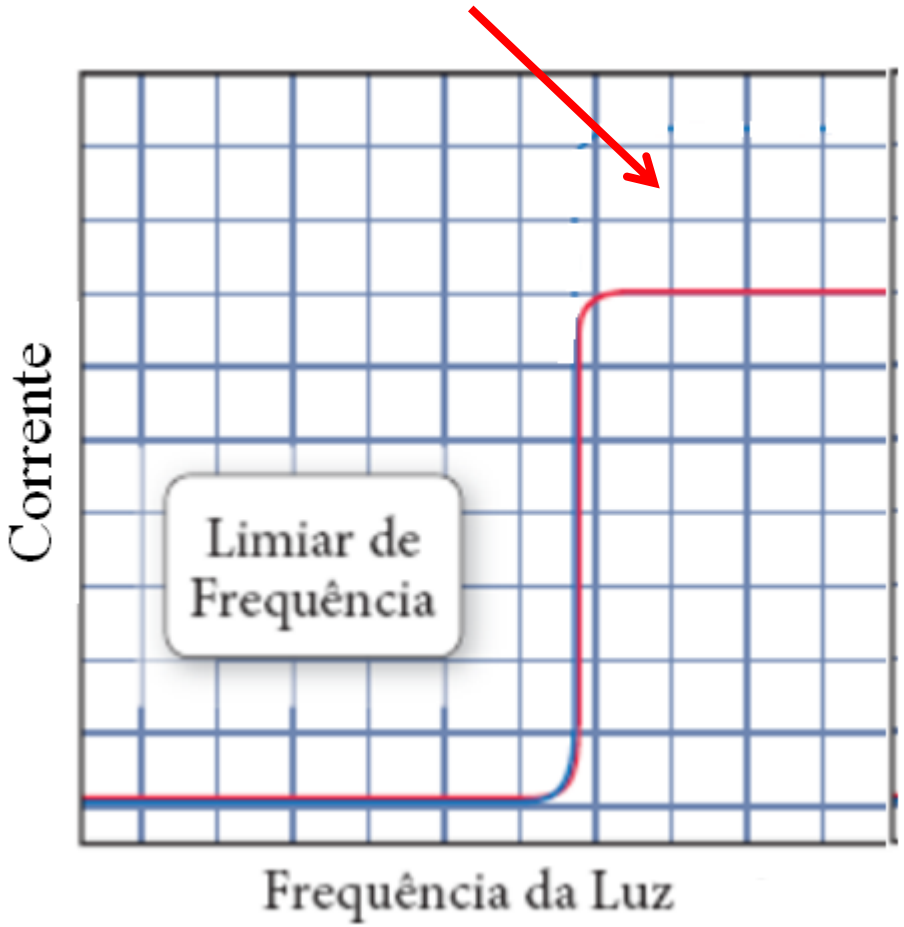
Qual a observação que corresponde a qual comprimento de onda da luz?

Energia quantizada e fótons

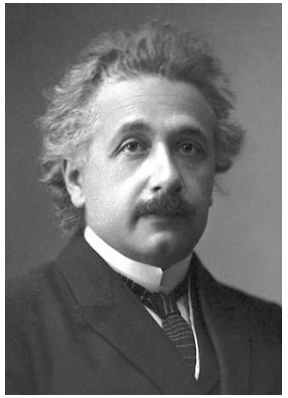
O efeito fotoelétrico e os fótons



Aumentando a frequência (ENERGIA) da radiação
o número de elétrons expelidos NÃO AUMENTA, mas sua energia cinética sim!



O modelo quântico do átomo



Einstein (prêmio Nobel de 1922)

A luz (radiação eletromagnética) pode “se comportar” como se fosse constituída por partículas (fótons).

Louis Victor De Broglie (prêmio Nobel de 1929)

Por que elétrons não poderiam “se comportar” como ondas??

O modelo quântico do átomo

De acordo com Planck e Einstein a energia de um "fóton", ou uma "partícula de radiação"

$$E = h\nu$$

Ainda de acordo com Einstein a energia de qualquer partícula é

$$E = mc^2$$

Igualando as duas expressões vem

$$mc^2 = h\nu = hc/\lambda \quad \text{ou} \quad mc = h/\lambda$$

Para uma velocidade v qualquer: $mv = h/\lambda$

Relação de De Broglie

A qualquer corpo de massa m está associado um comprimento de onda λ

Calcule o comprimento de onda de uma bola de golfe de 45,9g viajando a uma velocidade de $6{,}71.10^3$ cm/s (240 km/h)

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}626.10^{-27} g.cm^2/s}{(45{,}9g)(6{,}71.10^3 cm/s)} = 2{,}15.10^{-32} cm = 2{,}15.10^{-25} nm$$

Este é um comprimento impossível de ser medido

Calcule o comprimento de onda de um elétron viajando na primeira órbita de Bohr do átomo de hidrogênio ($v = 2{,}19.10^8$ cm/s)

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}626.10^{-27} g.cm^2/s}{(9{,}109.10^{-28} g)(2{,}19.10^8 cm/s)} = 3{,}32.10^{-8} cm = 0{,}33 nm$$

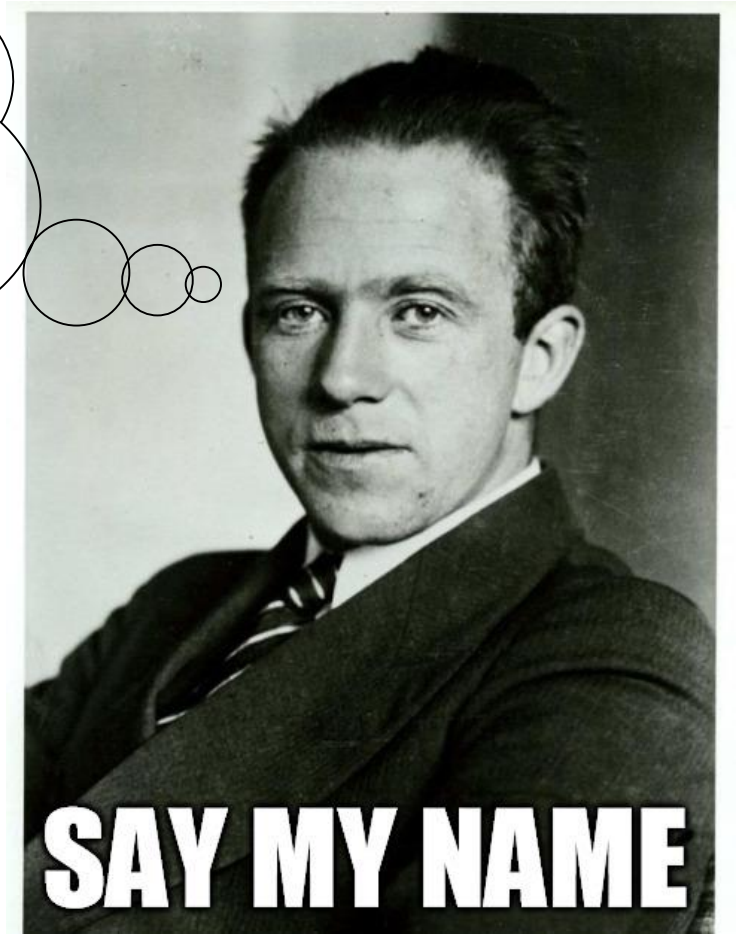
Que é mensurável e cai na região dos raios x !!!

O modelo quântico do átomo

O princípio da incerteza de Heisenberg (1927)

É impossível conhecer simultaneamente e com certeza a posição e o momento (*m.v*) de uma partícula microscópica como o elétron.

Werner Karl Heisenberg foi um físico teórico alemão que recebeu o Nobel de Física de 1932, "pela criação da mecânica quântica (...)"



O modelo quântico do átomo

O princípio da incerteza de Heisenberg (1927)

$$\mathbf{p \pm \Delta p \;\; ; \;\; x \pm \Delta x}$$

Momento Posição

$$\Delta p . \Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$$

p=m.v, portanto ***Δp=m.Δv***

$$[m.\Delta v]\Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$$

Não podemos conhecer exatamente posição e momento (e portanto velocidade) ao mesmo tempo.

Para uma massa de 1 mg teremos

$$(m.\Delta v)(\Delta x) = \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta v.\Delta x = \frac{h}{4\pi m} \approx \frac{10^{-27}}{10^{-3}} \approx 10^{-24}$$

$$(10^{-12} \cdot 10^{-12} = 10^{-24})$$

Se soubermos a posição com uma incerteza de 10^{-12} cm, a incerteza na velocidade estará limitada a 10^{-12} cm/s (o que na verdade significa uma grande precisão!!)

Ou seja, para corpos macroscópicos o princípio da incerteza não tem grande consequências!!

Para um elétron ($m \approx 10^{-27}$g) teremos

$$(m.\Delta v)(\Delta x) \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta v.\Delta x \geq \frac{h}{4\pi m} \approx \frac{10^{-27}}{10^{-27}} = 1$$

$$(10^{6} \cdot 10^{-6} = 1)$$

Se conhecemos a posição de um elétron com incerteza de 10^{-6} cm, não poderemos saber a velocidade com incerteza menor que 10^{6} cm/s **(ou seja , não saberemos a velocidade!!)**

O modelo quântico do átomo

Qual a consequência disso para o modelo de Bohr?

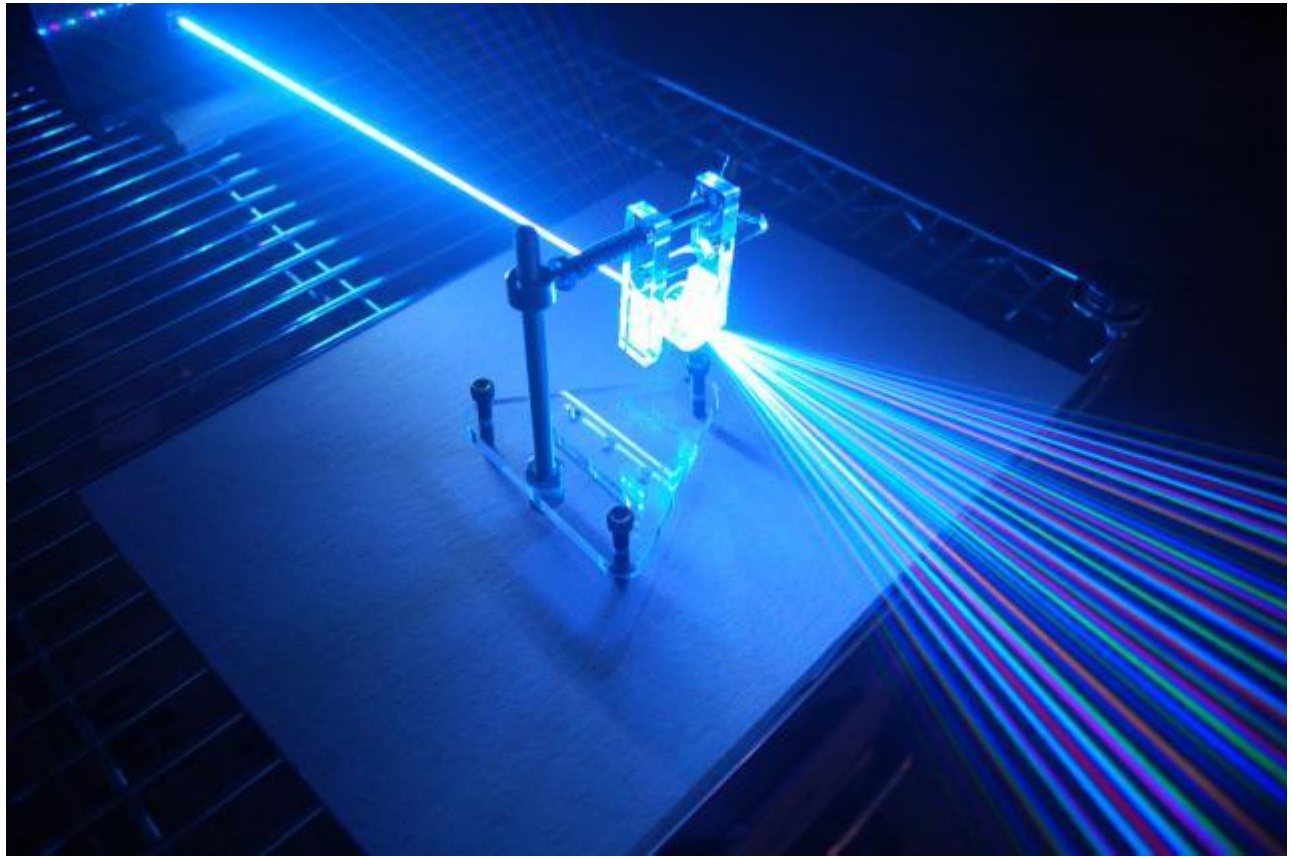
Podemos dizer que o

Princípio da Incerteza de Heisenberg

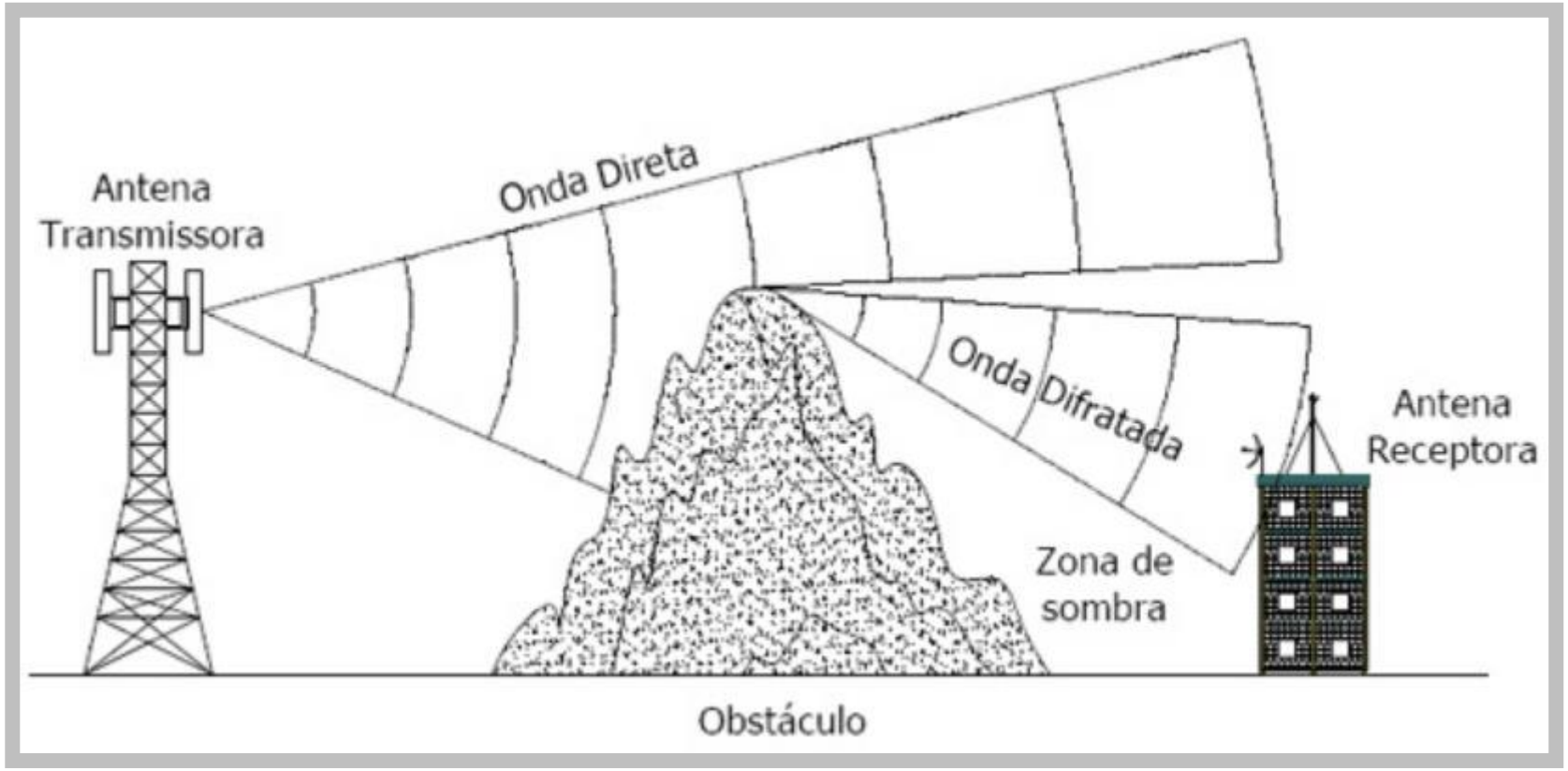
e a relação de De Broglie

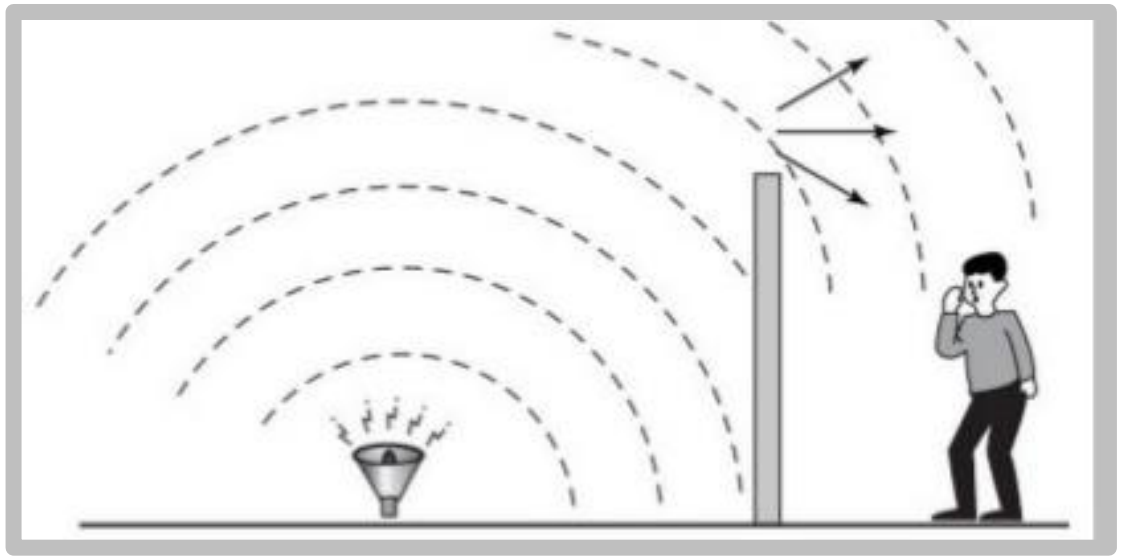
derrubaram de vez o Modelo Atômico de Bohr

Elétrons podem “se comportar” como ondas?

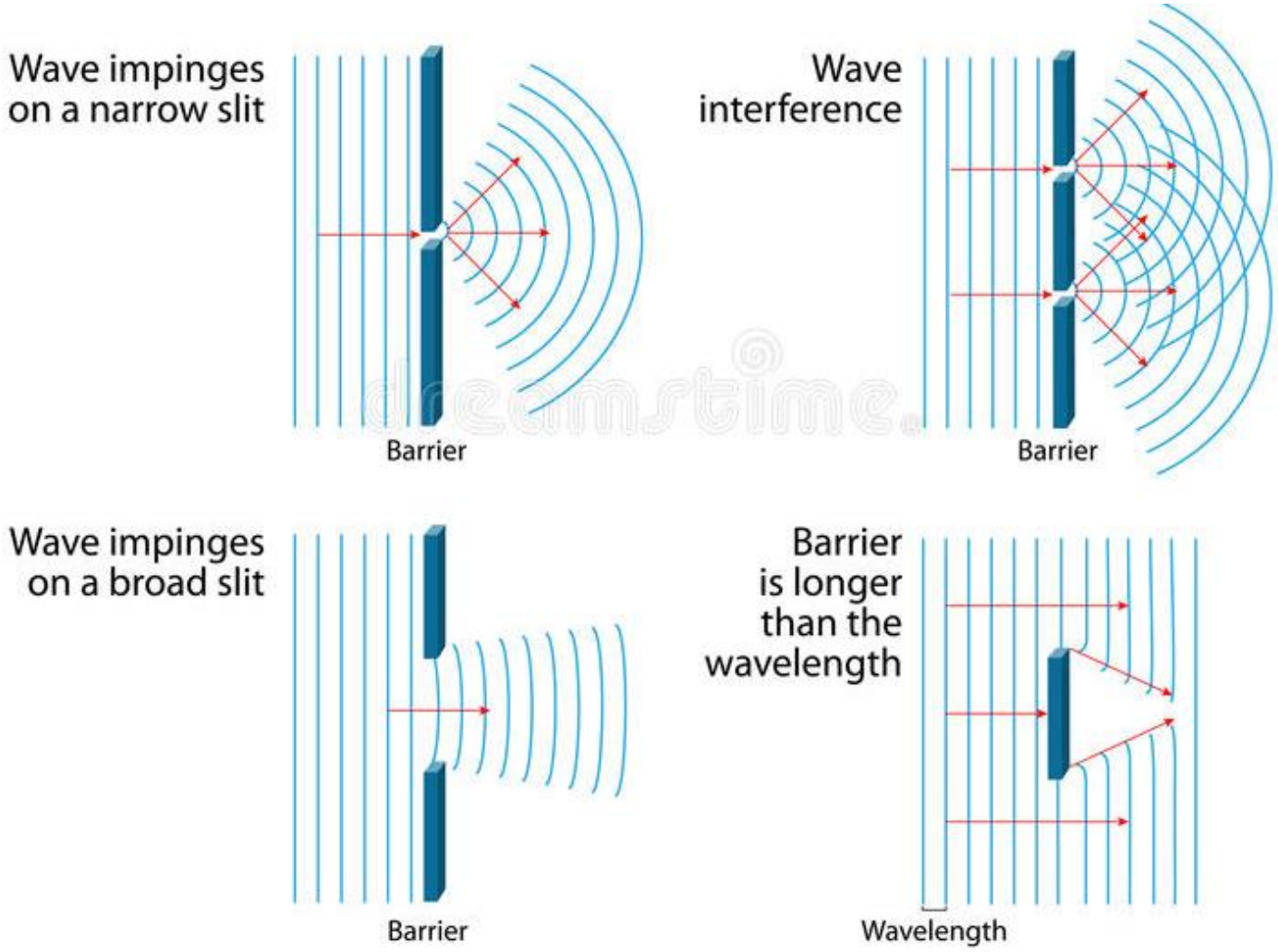


DIFRAÇÃO (propriedade de ondas eletromagnéticas)

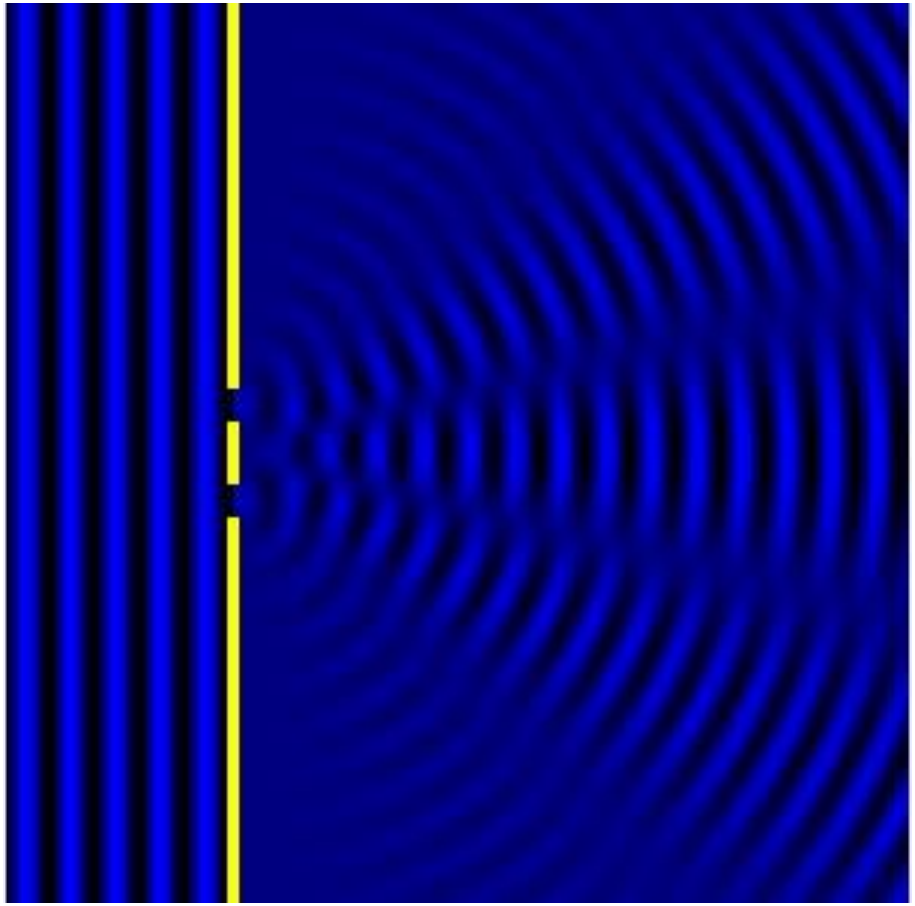

Antena
Transmissora
Onda Direta
Onda Difratada
Antena
Receptora
Zona de
sombra
Obstáculo



Elétrons podem “se comportar” como ondas?
DIFRAÇÃO DE ONDAS



Elétrons podem “se comportar” como ondas?
DIFRAÇÃO DE ONDAS

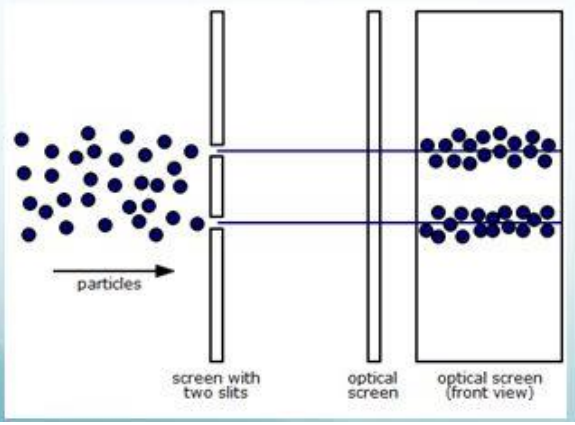
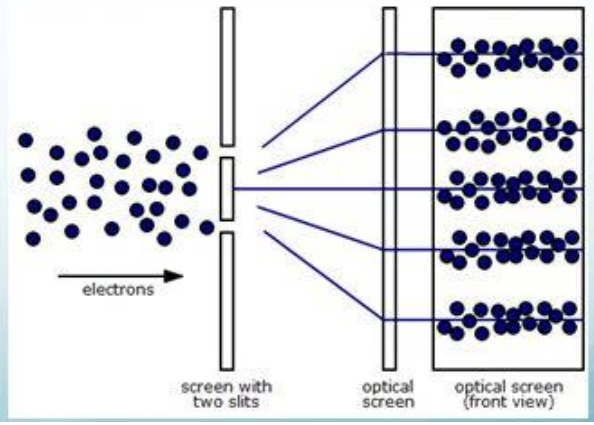


Elétrons podem “se comportar” como ondas?

SIM!

Difração de elétrons

- Experiência de Davisson-Germer (1927)
  - Elétrons apresentam difração!
- Experimento de dupla-fenda com elétrons:
  - Pozzi et al. 1976.
- Expectativa clássica:



Experimentalmente: