

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

FÍSICA MODERNA I

AULA 14

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 114
rizzutto@if.usp.br**

**1o. Semestre de 2014
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos**

Página do curso:

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=2905>

23/04/2014

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Em 1916, Wilson e Sommerfeld enunciaram um conjunto de regra de quantização:
- “Para qualquer sistema físico no qual as coordenadas são funções periódica do tempo existe uma condição quântica para cada coordenada”

$$\oint P_q dq = n_q h$$

q é uma coordenada, p_q é o momento associado a esta coordenada e ,

n_q é o número quântico que toma apenas valores inteiros.

\oint significa que a integração é tomada sobre um período da coordenada q .

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

$$\oint P_q dq = n_q h$$

Exemplo: átomo de Hidrogênio

Um elétron se movendo em uma órbita de raio r tem momento angular constante $L = mvr$

A coordenada θ é uma função periódica do tempo (0 a 2π)

$$\oint L d\theta = nh$$

$$L \int_0^{2\pi} d\theta = nh$$

$$L2\pi = nh \Rightarrow L = n\hbar$$



Lei de quantização de Bohr

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Uma interpretação física da regra de quantização de Bohr foi dada em 1924 por de Broglie

$$L = mvr = n\hbar$$

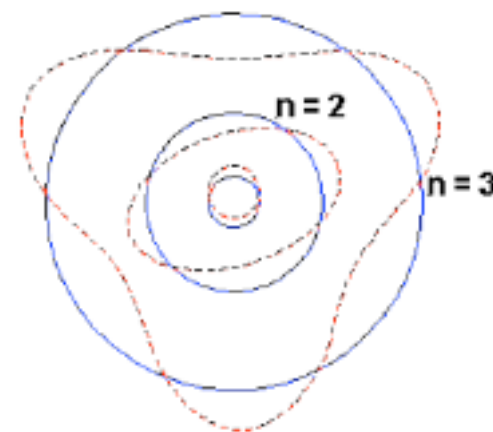
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$pr = \frac{nh}{2\pi}$$

Momento do elétron em uma órbita possível de raio r ,

$$\frac{h}{\lambda} r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$2\pi r = n\lambda$$

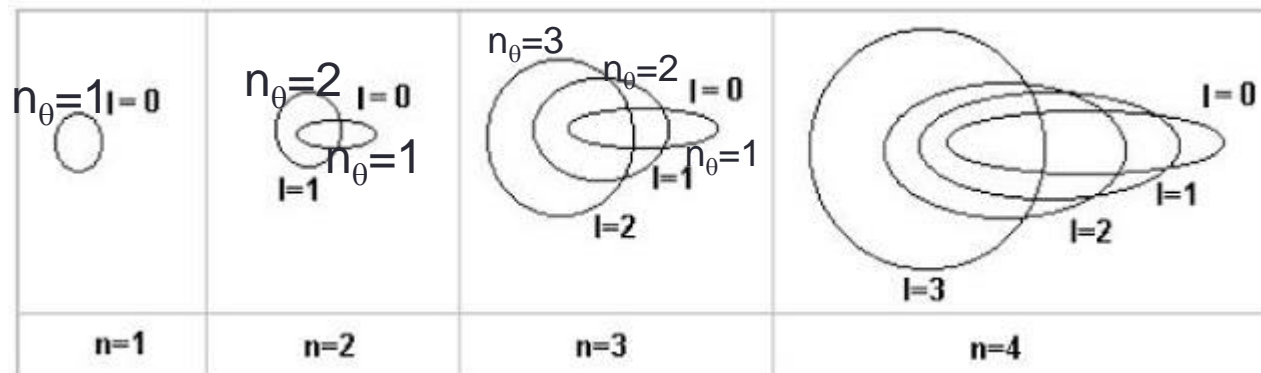


As órbitas possíveis são aquelas nas quais as circunferências podem conter exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de de Broglie

Sommerfeld trabalhou com órbitas elípticas para o átomo de H e também levou em conta as correções relativísticas para a energia do elétron. Usou isto como tentativa de explicar a estrutura fina do hidrogênio (**Estrutura fina é uma separação das linhas espectrais em várias componentes diferentes**).

Órbitas elípticas de Sommerfeld

Órbitas elípticas para o átomo de H. Classicamente sabemos que órbitas circulares e elípticas com o mesmo eixo maior tem a mesma energia. No entanto as correções relativísticas para a energia cinética nos dá pequenas diferenças entre as energias das órbitas circulares e elípticas.



A cada valor do número quântico principal n há n diferentes órbitas possíveis

$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

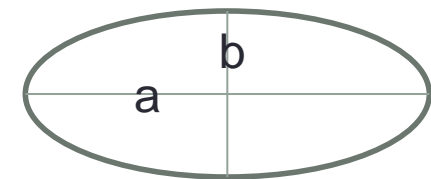
$$E = E_4$$

Número quântico azimutal

Usou coordenadas polares

$$\oint L d\theta = n_\theta h$$

$$\oint P_r dr = n_r h$$



As várias órbitas caracterizadas por um mesmo valor de n são ditas degeneradas

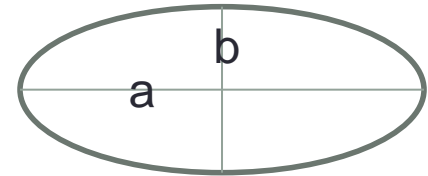
Órbitas elípticas de Sommerfeld

Número quântico
azimutal

Usou coordenadas polares

$$\oint L d\theta = n_{\theta} h$$

$$\oint P_r dr = n_r h$$



As várias órbitas caracterizadas por um mesmo valor de n são ditas degeneradas

1) A primeira condição dá a mesma restrição para o momento angular orbital

$$L = n_{\theta} \hbar \quad n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots$$

Que era obtida para a teoria da órbita circular

2) A segunda condição (que não era aplicável a órbita puramente circular)

$$L(a/b - 1) = n_r \hbar \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Que era obtida para a teoria da órbita circular

Órbitas elípticas de Sommerfeld

Sommerfeld calculou os valores dos semi-eixos maior (a) e menor (b) que dão a forma e o tamanho das órbitas elípticas e a energia total E do elétron nessa órbita

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2}$$

$$b = a \frac{n_\theta}{n}$$

$$E = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2}$$

μ é a massa reduzida

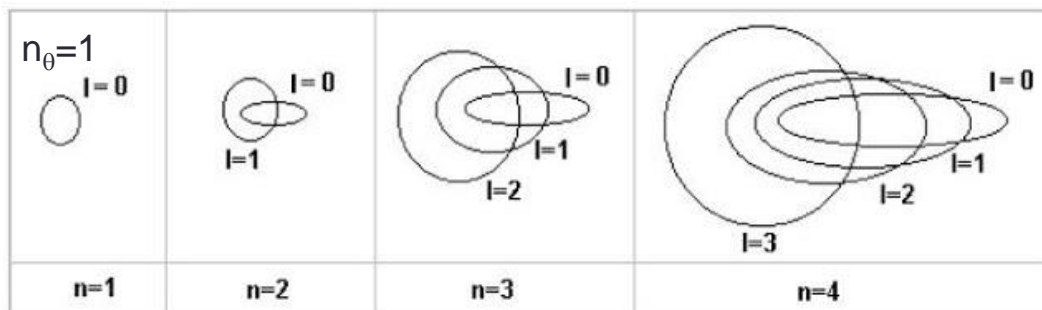
n é o número quântico:

$$n_\theta = 1, 2, 3, \dots$$

$$n \equiv n_\theta + n_r \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

As energias são degeneradas

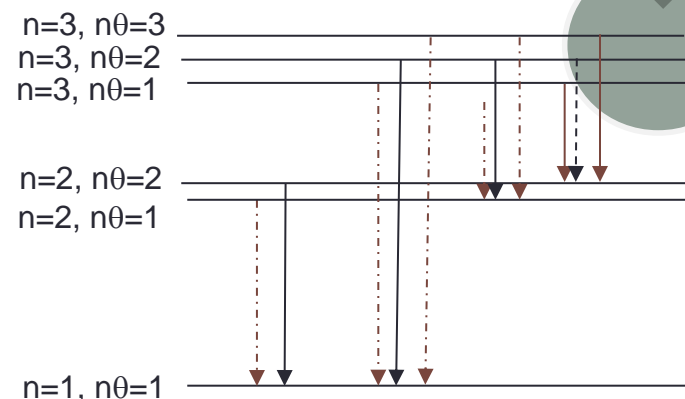


$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

$$E = E_4$$



Órbitas elípticas de Sommerfeld tratadas relativisticamente

O tamanho real da correção depende da velocidade média do elétron que por sua vez depende da excentricidade da órbita, correções da ordem de v^2/c^2 , era provável que a maior correção fosse na órbita muito excêntrica, porque v aumenta à medida que o elétron se aproxima do núcleo

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{mr} \quad (n=1)$$

$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

$$v = \frac{\hbar}{mr_1} = \frac{\hbar}{m\left(\frac{\hbar^2}{mke^2}\right)} = \frac{ke^2}{\hbar}$$

$$\frac{v}{c} = \frac{ke^2}{\hbar c} = \frac{1,44\text{ev.nm}}{197,3\text{ev.nm}}$$

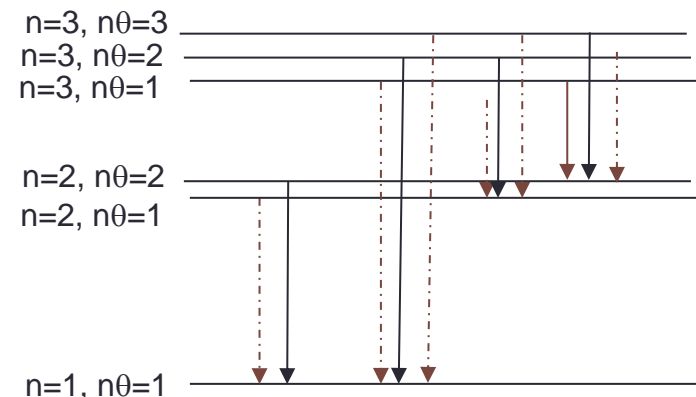
As linhas tracejadas não foram observadas nos espectros e estas transições não ocorrem (regras de seleção):

$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1$$

$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

α é chamada de “constante de estrutura fina”

$$\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$



Princípio de Correspondência

Um postulado auxiliar proposto por Bohr em 1923, pode auxiliar na justificativa das regras de seleção:

1) Para grandes números quânticos, os cálculos quânticos e os clássicos devem levar aos mesmos resultados

2) Uma regra de seleção é válida para todos os números quânticos possíveis. Portanto, todas as regras de seleção que são necessárias para obter a correspondência exigida no limite clássico (n grande) também se aplica no limite quântico

A partir de espectro vibracionais de moléculas $n_i - n_f = \pm 1$

pode-se dizer que os estados de energia vibracional para este sistema de moléculas são exatamente os mesmos de um oscilador harmônico simples, pois a força que leva a separação de equilíbrio de dois átomos tem a mesma forma de uma força de restauração harmônica

Crítica da Teoria de Bohr e da “velha” Mecânica quântica

Vimos que os fenômenos:

- 1) Radiação de corpo negro
- 2) Efeito fotoelétrico
- 3) Efeito Compton
- 4) Espectro ótico do hidrogênio
- 5) Espectros de raios X de muitos elementos

Puderam ser explicados pelas hipóteses de quantização



Soma de ideias clássicas e quânticas – conhecidas como ‘VELHA’ MECÂNICA QUANTICA

O SUCESSO da teoria de Bohr:

- 1) várias linhas espectrais desconhecidas foram previstas e mais tarde observadas
- 2) o raio da primeira órbita de Bohr do hidrogênio (0,053nm) era compatível com o diâmetro conhecido da molécula do hidrogênio
- 3) os comprimentos de onda dos espectros característicos dos raios X puderam ser calculados

O FRACASSO da teoria de Bohr:

- 1) Não era possível calcular as probabilidades das transições do espectro de H
- 2) A teoria não podia ser aplicada a sistema com mais de um elétron
- 3) Apresentava falha conceituais das validades das leis de Coulomb, de radiação e de Newton
- 4) Apenas certos momentos angulares poderiam ser permitidos

Durante a década de 1920 – proposta da mecânica ondulatória (de Broglie, Schrödinger, Heisenberg, Pauli, Dirac e outros)

Propriedades ondulatórias da matéria

- Vimos que as partículas que constituem a matéria (elétron) possuem propriedades ondulatórias

QUESTÕES:

- 1) Como podemos descrever este elétron então?
- 2) O que seria esta “onda” que constitui o elétron
- 3) O elétron é uma “onda” se propagando em que meio?
- 4) Como descrever esta “onda” matematicamente?

- Bohr elaborou o Princípio da complementaridade:

- “o caráter ondulatório e o corpuscular da natureza são complementares, isto é, ou se observa a manifestação do comportamento ondulatório de um sistema físico ou do comportamento corpuscular, nunca os dois simultaneamente”

Dualidade Onda-partícula

Associaremos uma função de onda ψ (probabilidade da partícula ser observada em uma certa posição em um certo instante de tempo)

Função de onda

$$\Psi(x, t)$$

que é solução da equação de onda

Uma solução simples é a chamada onda harmônica

Cujo nº de onda

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Velocidade de fase

$$v = f\lambda$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

$$\Psi(x, t) = A \cos k(x - vt)$$

$$\Psi(x, t) = A \sin k(x - vt)$$

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

v é a
velocidade
de fase

Curva que viaja na
direção de x positivo