

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

FÍSICA MODERNA I

AULA 17

**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>

07/05/2014

Vimos que o princípio de incerteza de Heisenberg, diz: que é impossível determinar (fazer medidas) simultaneamente da posição e momento de uma partícula) (x e p_x , por exemplo) apresentam uma relação entre suas incertezas dada por

$$\Delta k \Delta x \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

Quanto mais bem definida a posição de uma partícula (pacote de onda mais estreito), menos definido será o momento dessa partícula (uma combinação maior de comprimentos de onda, e portanto de momentos será necessário)

O princípio de incerteza também pode ser enunciado em termos da energia e do tempo:

Das propriedades do pacote de onda, tem-se que:

$$E = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

$$\Delta\omega \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta\nu \cdot \Delta t \geq \frac{1}{4\pi}$$

Exercício:

3) Um elétron se move na direção x com velocidade de $3,6 \times 10^6 \text{ m/s}$.
Podemos medir sua velocidade com precisão de 1%

- a) Com que precisão podemos medir simultaneamente sua posição
b) o que podemos dizer sobre o movimento na direção y

$$p_x = mv_x = 9,1 \times 10^{-31} \times 3,6 \times 10^6 \quad \Delta p_x = m \Delta v_x = 1\% p_x$$

$$p_x = 3,3 \times 10^{-24} \left(\text{kg} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}} \right) \quad \Delta p_x = 3,3 \times 10^{-26} \left(\text{kg} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}} \right)$$

Do princípio de incerteza

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2 \Delta p_x} \geq \frac{1,05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{2 \times 3,3 \times 10^{-26} \text{ kg} / \text{ms}}$$

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \geq 0,16 \times 10^{-8} \text{ m} = 1,6 \text{ nm} = 16 \times 10^{-10} \text{ m}$$

sobre o movimento na direção y:
Se o elétron se move na direção x
temos que

$$\Delta p_y = 0$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar / 2$$

Não sabemos nada sobre y

$$\Delta y = \infty$$

↓

O que é aproximadamente 10
distâncias atômicas (distância
atômica $\lambda \sim 1 \text{ \AA} \sim 10^{-10} \text{ m}$)

Exercício:

4) Qual a energia cinética que os nêutrons devem ter se forem difratados por cristais?

As difrações ocorrem se o comprimento de onda de de Broglie do nêutron for da mesma ordem de magnitude da distância interatômica. $\lambda \sim 1\text{Å} \sim 10^{-10}\text{m}$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{1 \times 10^{-10} \text{ m}} = 6,63 \times 10^{-24} \text{ kgm/s}$$

$$E_c = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{(6,63 \times 10^{-24})^2}{2 \times 1,66 \times 10^{-27}} \left(\frac{\text{kg}^2 \text{m}^2}{\text{s}^2 \text{kg}} \right)$$

A energia cinética

$$E_c = 1,32 \times 10^{-20} \text{ J} = 0,0825 \text{ eV}$$

Note que são nêutrons não relativísticos, $E_c \ll m_n c^2 = 939,6 \text{ MeV}$
 Energia menor que a massa de repouso do nêutron

A energia cinética da partícula a T_{amb}

$$E_c = \frac{3}{2} kT = 0,0388 \text{ eV}$$

Justifico o uso de $E_c = p^2/2m$

Exercício:

5) Determine o comprimento de onda de de Broglie para elétrons de 54eV?

$$E_c = \frac{p^2}{2m_e}$$

$$p^2 = 2m_e E$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{1240eV \cdot nm}{\sqrt{2mc^2 E}}$$

$$\lambda = \frac{1240eV \cdot nm}{\sqrt{2 \times 0,511 \times 10^6 \times 54}} = 0,167nm$$

Exercício:

6) Nós aprendemos inicialmente que a partícula (gás ideal) em equilíbrio térmico com o ao redor tem energia cinética de $3/2kT$. Calcule o comprimento de de Broglie para:

a) Nêutron a temperatura ambiente (300K)

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

b) Nêutron frio a 77K (nitrogênio líquido)

$$p^2 = 2mE$$

$$m_n c^2 = 939,6 \text{ MeV}$$

$$p^2 = 2mE = 2m \frac{3}{2} kT$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{\sqrt{3mc^2 kT}}$$

$$p = \sqrt{3mkT}$$

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{\sqrt{3 \times 939,6 \times 10^6 \times 8,62 \times 10^{-5} T}}$$

a) T=300K

$$\lambda = 0,145 \text{ nm}$$

a) T=77K

$$\lambda = \frac{2,52}{\sqrt{T}} \text{ nm}$$

$$\lambda = 0,287 \text{ nm}$$

Aplicação do princípio de incerteza para o modelo atômico de Bohr

Podemos considerar que a incerteza na posição do elétron é da ordem de grandeza do raio atômico

A energia do elétron a uma distância r do núcleo é dado por:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Tenho que pensar em

$$\frac{\Delta p^2}{\Delta x}$$

$$\Delta p^2 = (p - \langle p \rangle)^2$$

$$\Delta p^2 = p^2 - 2p \langle p \rangle + \langle p \rangle^2$$

No entanto $\langle p \rangle$ quanto $\langle x \rangle$ são nulos para o movimento harmônico, pois a partícula executa um movimento em que a posição e a velocidade assumem valores simétricos em relação ao ponto central, com valor zero

Aplicação do princípio de incerteza para o modelo atômico de Bohr

Então:

$$\Delta p^2 = (p - \langle p \rangle)^2$$

$$\Delta p^2 = p^2 - 2p \langle p \rangle + \langle p \rangle^2 \quad \Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p^2 = p^2 \quad \Delta p \Delta x > \hbar$$

Analogamente

$$\Delta x^2 = x^2 \quad \Delta x = r \quad p \geq \frac{\hbar}{r}$$

$$E \geq \frac{\hbar^2}{4mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad \frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = 0$$

Derivando com respeito a r para encontrar o valor de energia mínima

$$\frac{\hbar^2}{mr^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$r = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} = \text{raio de Bohr} = 0,52 \text{ \AA}$$

Aplicação do princípio de incerteza para o modelo atômico de Bohr

Então para este raio mínimo:

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

$$r = \text{raio de Bohr} = 0,52\text{\AA}$$

Tenho a energia mínima

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{ke^2}{r}$$

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 k^2 e^4}{\hbar^4} - \frac{ke^2 m ke^2}{\hbar^2}$$

$$E_{\min} = -\frac{1}{2} \frac{mk^2 e^4}{\hbar^2}$$

$$E_{\min} = -13,6eV$$

Obtenho o valor correto da energia do elétron na primeira órbita de Bohr.

No entanto o conceito de órbita bem definida perde o sentido. O elétron está localizado em qualquer ponto dentro do volume do raio de Bohr, mas sua posição correta não pode ser conhecida.

Probabilidade

Em 1925-1926 Max Born propôs como relacionar a Ψ (função de onda) com o comportamento das partículas que ela descreve:

A probabilidade que a partícula seja encontrada no instante t em uma coordenada entre x e $x+dx$ é :

$$P(x)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

$$P(x)dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$$

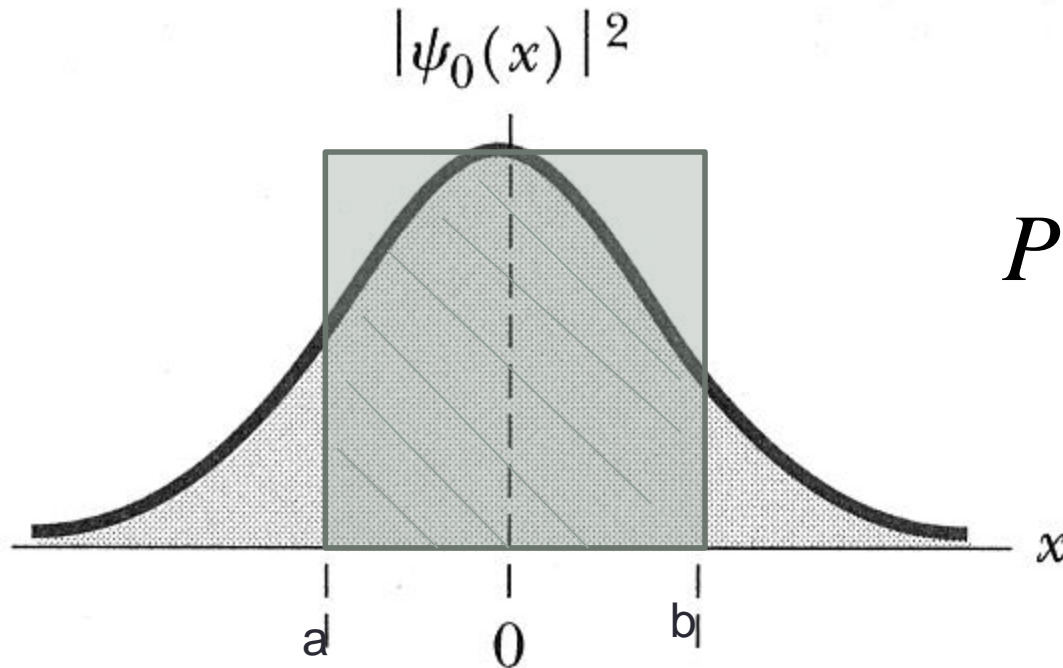
Ψ não é uma quantidade mensurável, mas o seu módulo ao quadro é mensurável e é justamente a probabilidade por unidade de comprimento ou densidade de probabilidade $P(x)$ para encontrar a partícula no ponto x no tempo t .

Já que a partícula deve ser encontrada em algum lugar ao longo do eixo x, a soma das probabilidade sobre todos os valores de x deve ser 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

A probabilidade de uma partícula estar no intervalo $a \leq x \leq b$ esta relacionado área embaixo da curva de a até b de uma função densidade de probabilidade $|\Psi(x, t)|^2$



$$P = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx =$$

o área embaixo da curva entre a e b

OBSERVÁVEIS:

Ψ não é uma quantidade mensurável

MAS como podemos relacionar a função de onda com grandezas observáveis????

COMO podemos obter a posição, o momento ou a energia de uma partícula a partir da função de onda (de maneira exata no mundo quântico)?????

VALORES ESPERADOS:

USANDO a interpretação probabilística de Bohr, podemos obter apenas os valores médios ou valores esperados das grandezas

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$