

Universidade de São Paulo Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 12

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

2o. Semestre de 2017

Página do curso:

<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=53869>

20/09/2017

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Para qualquer sistema físico no qual as coordenadas são funções periódicas 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
 n_q é o número quântico que toma apenas valores inteiros.

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

$$L = mvr = n\hbar$$

$$p = mv$$

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

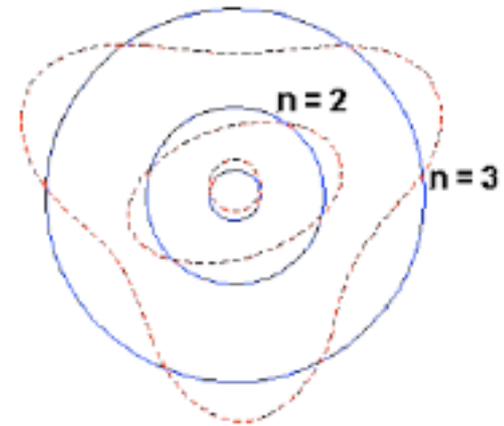
**Momento de De Broglie
Veremos em breve!!!!**

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

Momento do elétron em uma órbita possível de raio r ,

$$\cancel{h} r = \frac{n\cancel{h}}{2\pi}$$

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

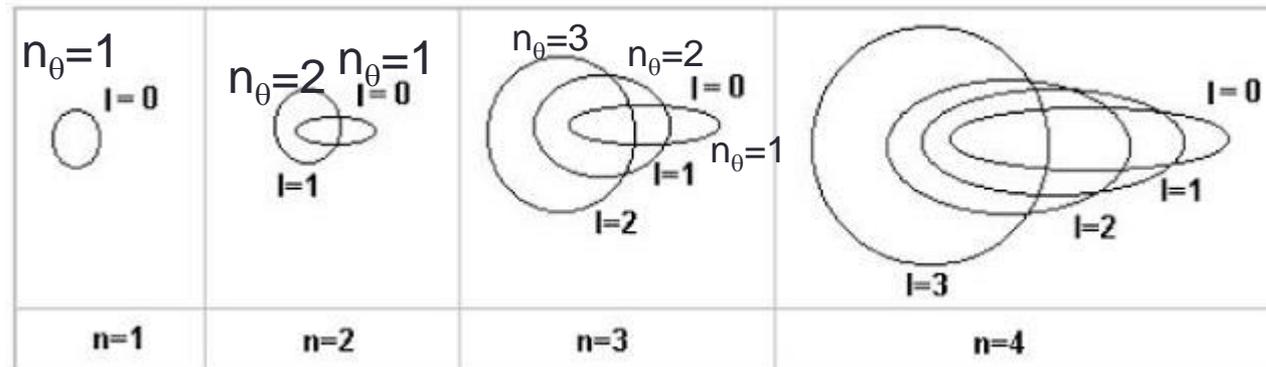


As órbitas possíveis são aquelas nas quais as circunferências podem conter exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de De Broglie

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

$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

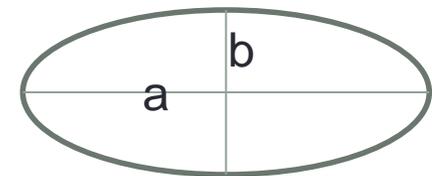
$$E = E_4$$

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

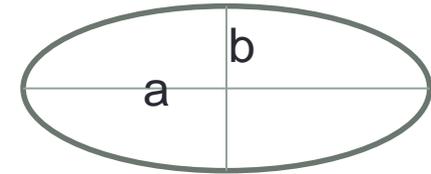
Órbitas elípticas de Sommerfeld

Usou coordenadas polares

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

$$\oint P_r dr = n_r h$$

Número quântico
azimutal



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

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

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

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

μ é a massa reduzida
n é o número quântico:

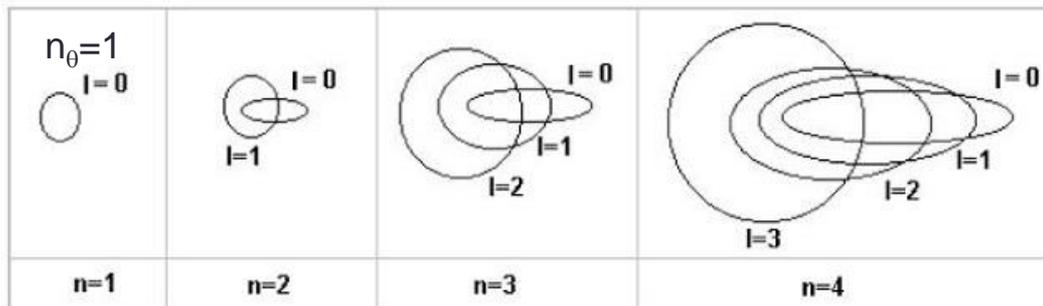
$$n \equiv n_\theta + n_r$$

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

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

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

As energias são degeneradas

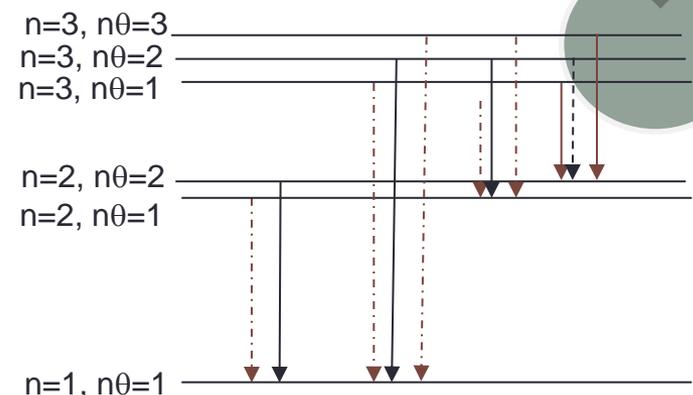


$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

$$E = E_4$$



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

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

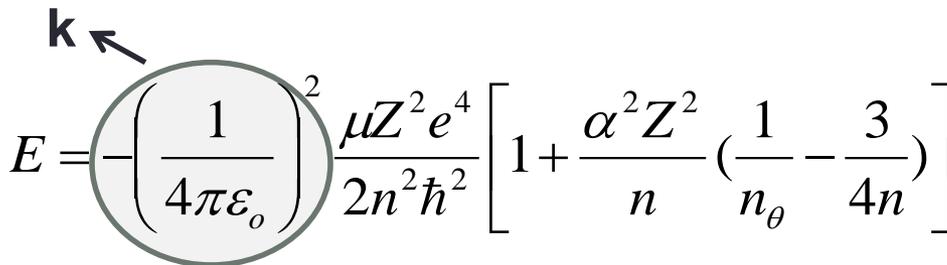
$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

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

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

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

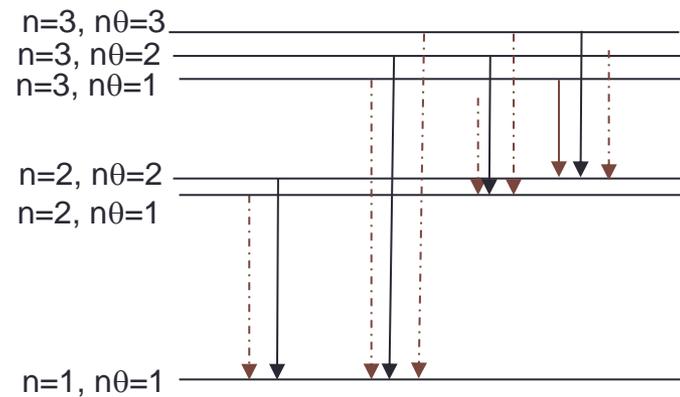
$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1$$



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

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

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

Puderam ser explicados pelas hipóteses de quantização

Soma de ideias clássicas e quânticas – conhecidas como “VELHA” MECÂNICA QUÂNTICA

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

Hipóteses de De Broglie

- A hipótese de de Broglie em sua tese de doutorado de 1924, era que o comportamento dual (onda-partícula) da radiação eletromagnética poderia ser aplicado a matéria
- Vimos que podemos associar a um fóton uma frequência de uma onda luminosa que governa seu movimento $E = h\nu$
- E um momento do fóton é relacionado ao comprimento de onda

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

- Então segundo de Broglie se ondas de luz tem propriedades de partículas, partículas devem ter propriedades de onda. E propôs que ambas as relações cima são validas também para partículas.
- Deste modo, o comprimento de onda (não relativístico) associado a partícula de massa m e velocidade v é:

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

Exemplo:

Corpos macroscópicos \Rightarrow massa \Rightarrow momento $\Rightarrow \lambda$ pequeno

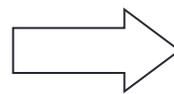
Objeto de massa de 1 kg com $v=10$ m/s
 $\Rightarrow \lambda = h/mv = 6,6 \times 10^{-34}$ J.s/10 kg.m/s
 $\Rightarrow \lambda = 6,6 \times 10^{-35}$ m = $6,6 \times 10^{-20}$ fm.

É impossível
de ser
observado

Elétron Qual é o comprimento de onda associado, se este possui energia cinética de 100 eV:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2 E}} = \frac{1,24keVnm}{\sqrt{2.5.10^5.100(eV)^2}} = 0,12nm = 1.2 \text{ \AA}$$

Comprimento de onda é pequeno, da mesma ordem de grandeza que o tamanho de um átomo e que o espaçamento dos planos atômicos de um cristal



Propriedades ondulatórias dos e^- podem ser observadas semelhantemente ao efeitos de **difração e interferência parecido como os raios-X**

Difração de RX

Na descoberta do RX Roentgen verificou que os raios X (recém-descobertos):

- Não eram afetados pela presença do campo magnético
- E não conseguiu observar os efeitos de refração e interferência normalmente associados as ondas.
- O pequeno alargamento sofrido por um feixe de raios X ao passar por uma fenda de alguns milésimos de milímetros de largura indicava que

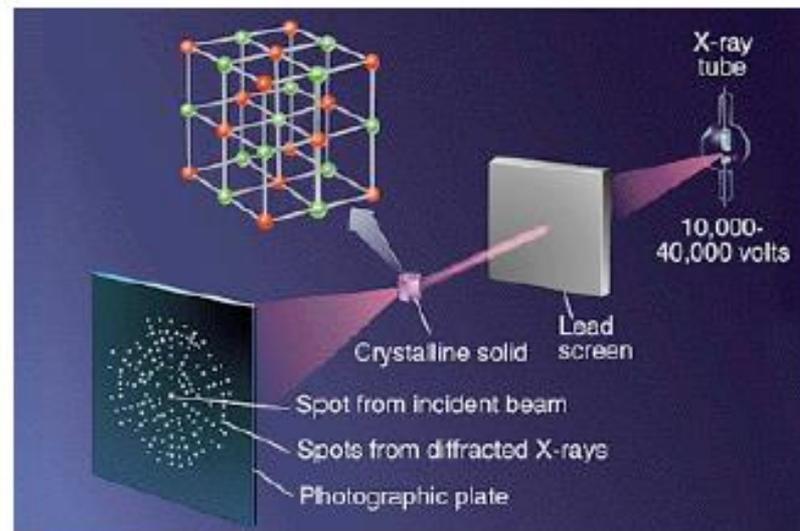
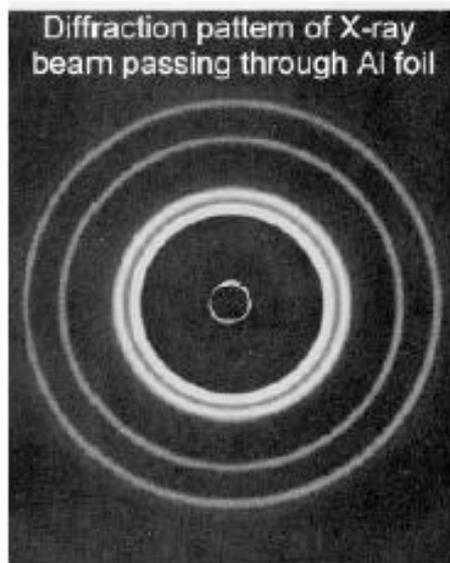
$$\lambda \sim 10^{-10} m = 0,1nm$$

- Laue em 1912 sugeriu que como λ eram da mesma ordem o espaçamento dos átomos em um cristal, estes átomos poderiam então se comportar como uma rede de difração tridimensional para os raios X .

Para ocorrer o fenômeno da difração é preciso que a dimensão do “obstáculo óptico” (abertura da fenda, espaçamento em uma rede de difração, etc.) seja da ordem de grandeza do comprimento de onda que se deseja estudar

- Bragg em 1912 estudou a difração de raios X em várias famílias de planos paralelos de átomos
- As ondas difratadas com o mesmo ângulo por átomos situados em planos diferentes estarão em fase (interferência construtiva) se a diferença entre os dois percursos foi igual ao um número inteiro de comprimento de onda

$$2d \sin \theta = n \lambda$$

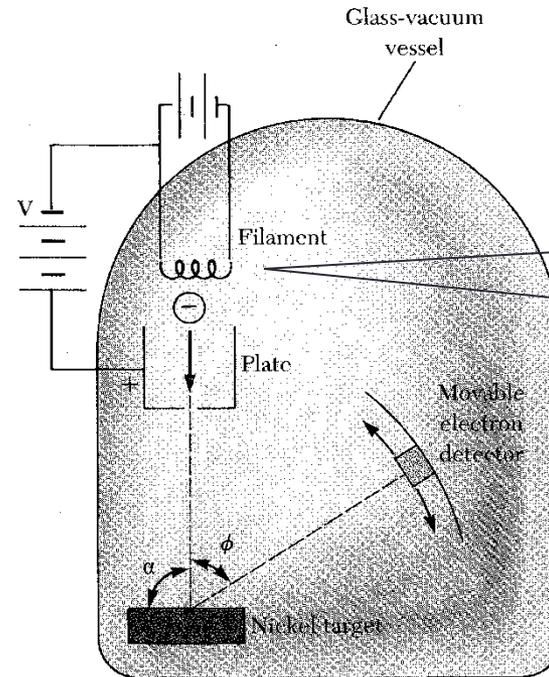


Difração de elétrons

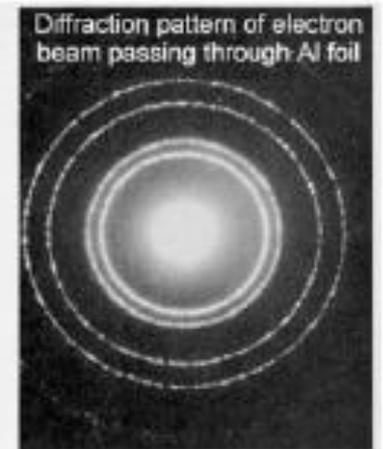
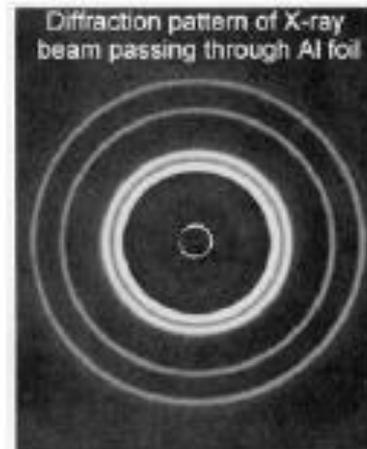
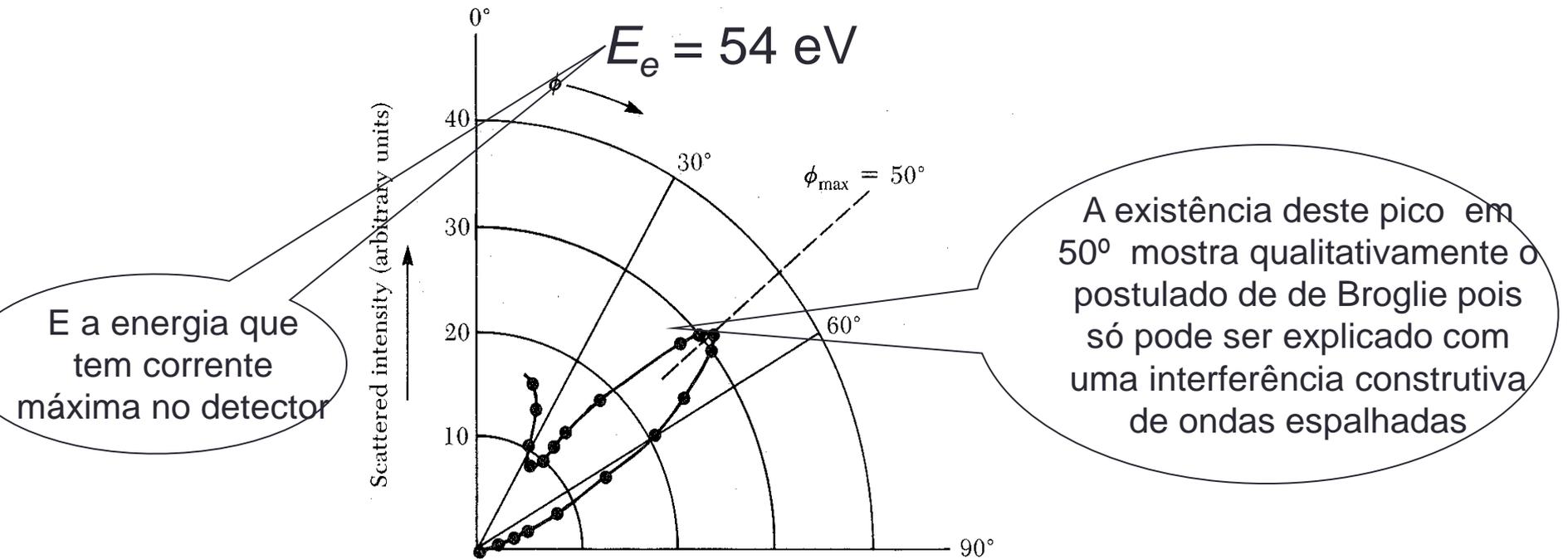
Testes experimentais da hipótese de de Broglie

**1927 Davisson e Germer (USA)
e G. Thomson (Escócia):**

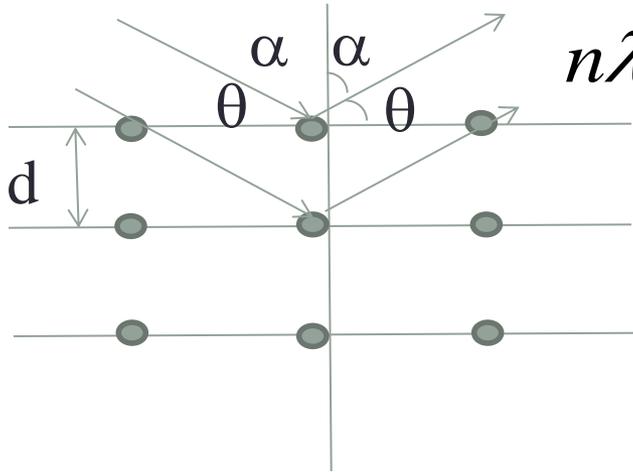
- Estudaram a quantidade de elétrons que eram espalhados em uma superfície de Ni em função do ângulo de espalhamento



Difração de elétrons



Difração de elétrons

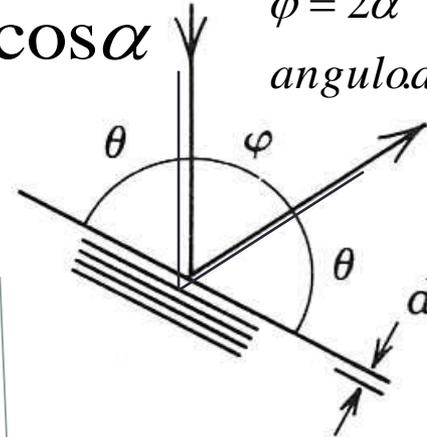


$$n\lambda = 2d \sin \theta = 2d \cos \alpha$$

Máximo \Rightarrow

$$\varphi = 2\alpha$$

angulo de espalhamento



d é a distância entre os planos de Bragg esta relacionada a distância interatômica D através da relação: $d = D \sin \alpha$

$$n\lambda = 2D \sin \alpha \cos \alpha$$

$$n\lambda = D \sin 2\alpha = D \sin \varphi$$

Medidas de difração de RX revelaram que $D=0,215\text{nm}$ para o Ni.

O comprimento de onda então calculado para $n=1$

$$\lambda = 0,215 \sin 50 = 0,165\text{nm}$$

Ou usando a distância Interplanar:

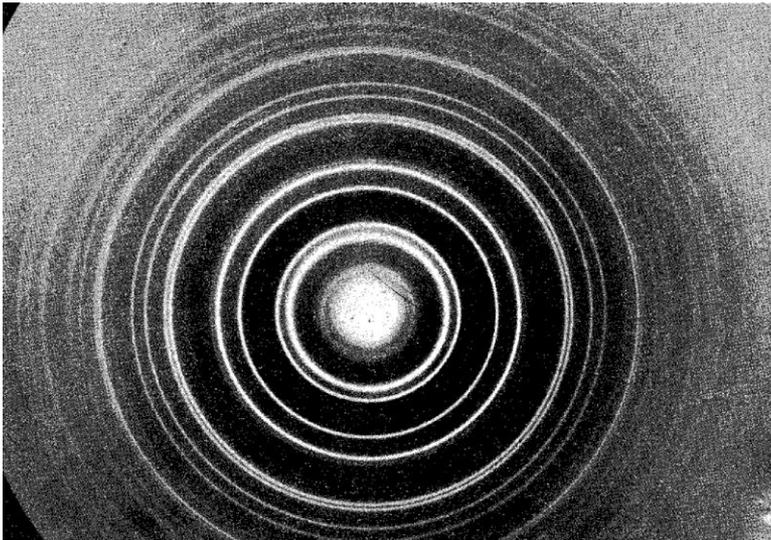
Medidas com raios-X $\Rightarrow d = 0,091 \text{ nm}$

Máximo em $\varphi = 50^\circ \Rightarrow \lambda = 2d \cos \varphi / 2 = 2 \times 0,091 \times 0,906 = 0,165 \text{ nm}$

Calculado por De Broglie para elétrons de 54eV e':

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2 E}} = \frac{1,24 \text{ keV nm}}{\sqrt{2.5.10^5.54(eV)^2}} \approx 0,168 \text{ nm}$$

G.P. Thomson Nobel em 1937 Difração de feixe de elétrons



Semelhantes experimentos com feixes de prótons, nêutrons e mesmo átomos apresentam o mesmo fenômeno de difração mostrando que as relações de De Broglie são universais.

O pai G. Thomson ganhou o Nobel por ter descoberto e⁻ e ter caracterizando-o como partícula. E o filho ganhou o Nobel por mostrar que o e⁻ é uma onda

Caso relativístico

- Para se determinar uma expressão equivalente que se aplique tanto as partículas relativísticas como não-relativísticas:

Energia de repouso da partícula

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \quad mc^2 = E_0$$

Energia total

$$E = E_0 + E_K$$

$$(E_0 + E_K)^2 = (pc)^2 + (E_0)^2$$

$$p = \frac{(2E_0E_K + E_K^2)^{1/2}}{c}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{(2E_0E_K + E_K^2)^{1/2}}$$

Aplicável a qualquer partícula com qualquer energia

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

Propriedades ondulatórias da matéria – Cap. 3 Eisberg

- 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

$$v = f\lambda$$

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

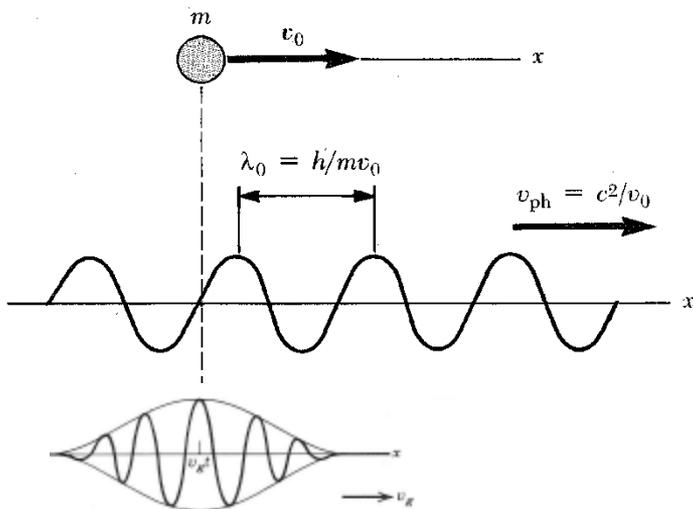
v é a
velocidade
de fase

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

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

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

Curva que viaja na
direção de x positivo

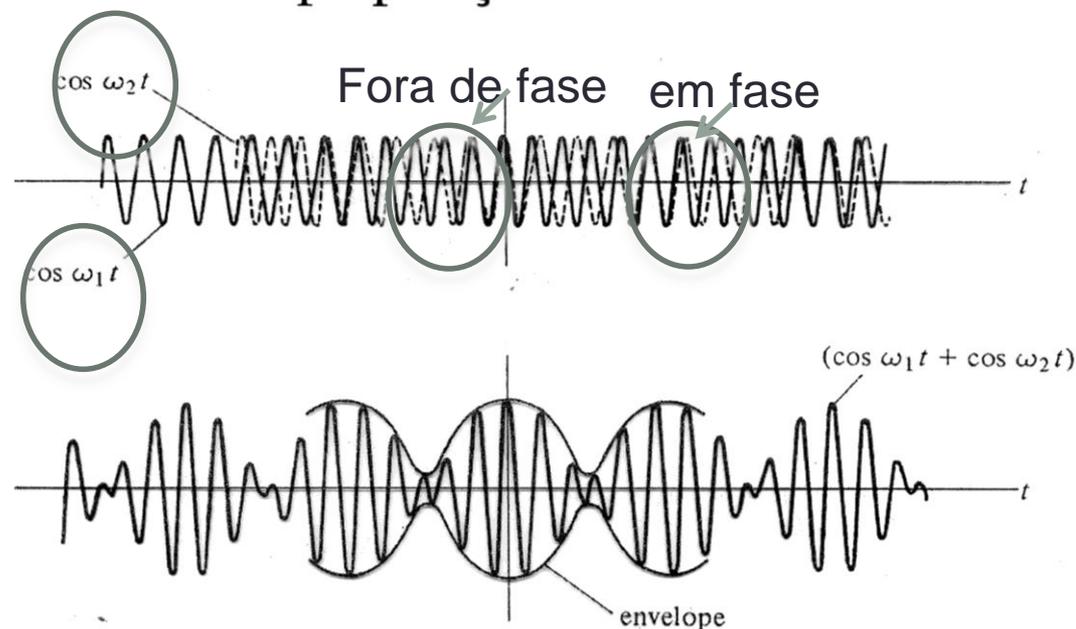


- Para representar uma partícula, devemos utilizar uma onda “localizada” no espaço, ou seja, um “pacote de ondas”, cuja velocidade de grupo coincide com a velocidade da partícula

Partícula \leftrightarrow onda localizada (pacote de onda).

Como produzir um pacote?

Superposição de 2 ondas



- 1) pacote de onda é obtido a partir de uma combinação de várias ondas de frequências diferentes
- 2) Neste caso, duas onda de frequências próximas se combinam resultado em vários pacotes ou grupos de onda