Instituto de Física
USP

Física V - Aula 25

Professora: Mazé Bechara

Paulo Vanzolini - cientista e compositor

Aula 25 – Ainda o átomo de H. A proposta de de Broglie de caráter dual das partículas materiais

1. **Ainda um elétron agora em óribita elíptica em torno de um núcleo +Ze - Wilson-Sommerfeld. O átomo de H. Efeito da correção relativística e os estados degenerados em energia. O estado da arte para o H – comentários.**
2. **A proposta de de Broglie de caráter dual da matéria: enunciado e as relações de conexão** entre as grandezas ondulatórias (frequencia, ecomprimento de onda) e as mais características de partículas (energia e momento linear).
3. **A velocidade da onda da partícula material** com velocidades não relativísticas ou relativísticas.
4. **As regras de quantização que decorrem das ondas estacionárias das partículas na proposta de de Broglie: no átomo de H, na partícula presa em uma caixa com movimento de velocidade constante. Comparação com a quantização de Wilson-Sommerfeld.**

A regra de quantização de Wilson-Sommerfeld

- Para **qualquer sistema físico, em movimento periódico,** existe a seguinte condição de quantização:

$$\oint_{1T} p_q\,dq = n_q h$$

- n_q=0,1,2,3...

- q são as coordenadas (generalizadas) necessárias para a descrição do movimento, e p_q os momentos (generalizados) associados às coordenadas q. A integral deve ser realizada em um período (1T) do movimento.

A quantização do momento angular em Wilson-Sommerfeld

- **Na variável angular θ:**

$$\oint_{1T} p_\theta d\theta = \int_0^{2\pi} L d\theta = n_\theta h$$

- **De onde decorre a hipótese sde Bohr: $L=n_\theta h/2\pi$**

Órbita eliptica na quantização de Wilson-Sommerfeld – outros números quânticos

- A regra de quantização na variável r:

$$\oint_{1T} p_r dr = \int_0^\infty 2\mu \sqrt{E - \frac{L^2}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o}} dr = n_r h$$ **n_r=0(MCU),1,2,3 ...**

- Dela decorre:

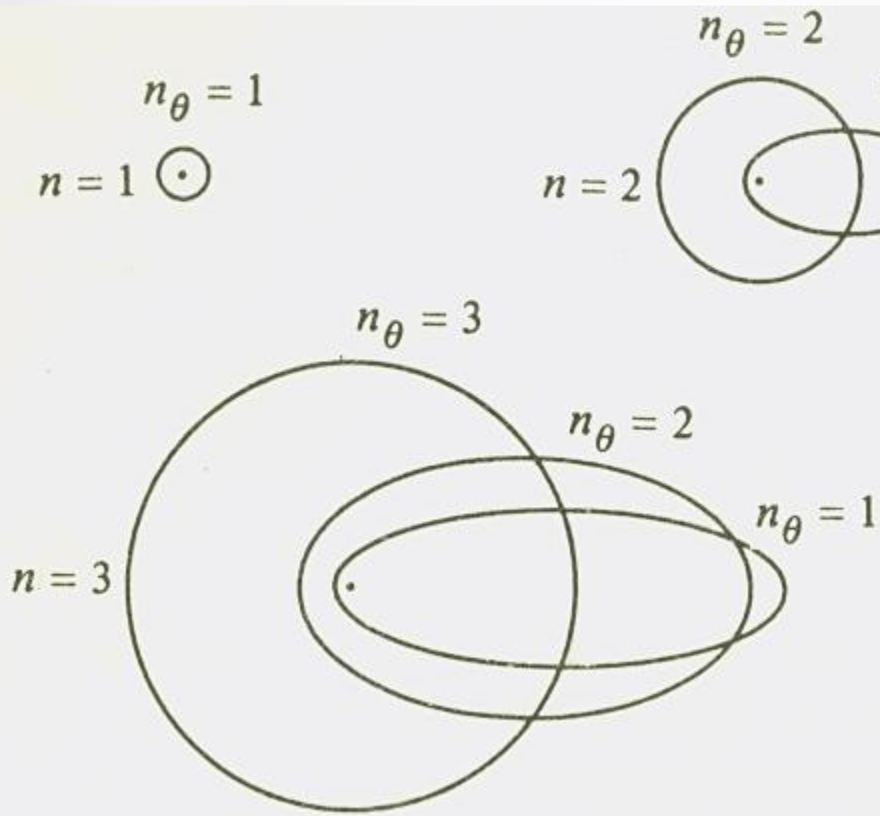
$$L[\frac{a}{b} - 1] = n_r \hbar$$

$$n_\theta \hbar[\frac{a}{b} - 1] = n_r \hbar$$

- a e b são os raios da elípse (trajetórias possíveis em Newton) , dados por:

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_o}{\mu Ze^2} n^2 \hbar^2 \qquad b = a\frac{n_\theta}{n_r + n_\theta} = a\frac{n_\theta}{n}$$

- **n=1,2,3...**



Átomo de H na quantização de Wilson-Sommerfeld: trajetórias e energias

Estados atômicos **degenerados em energia do H** ou **estados diferentes (diferentes trajetórias) com mesma energia**

Algumas órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld. O núcleo está localizado no foco comum das elipses, indicado pelo ponto.

$$E_n^{Wil\text{-}Som} = -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{(\mathrm{n}_\theta + \mathrm{n}_r)^2} = -\frac{Z^2}{n^2}13{,}60 eV$$

A 1ª ordem da correção relativística de Sommerfeld

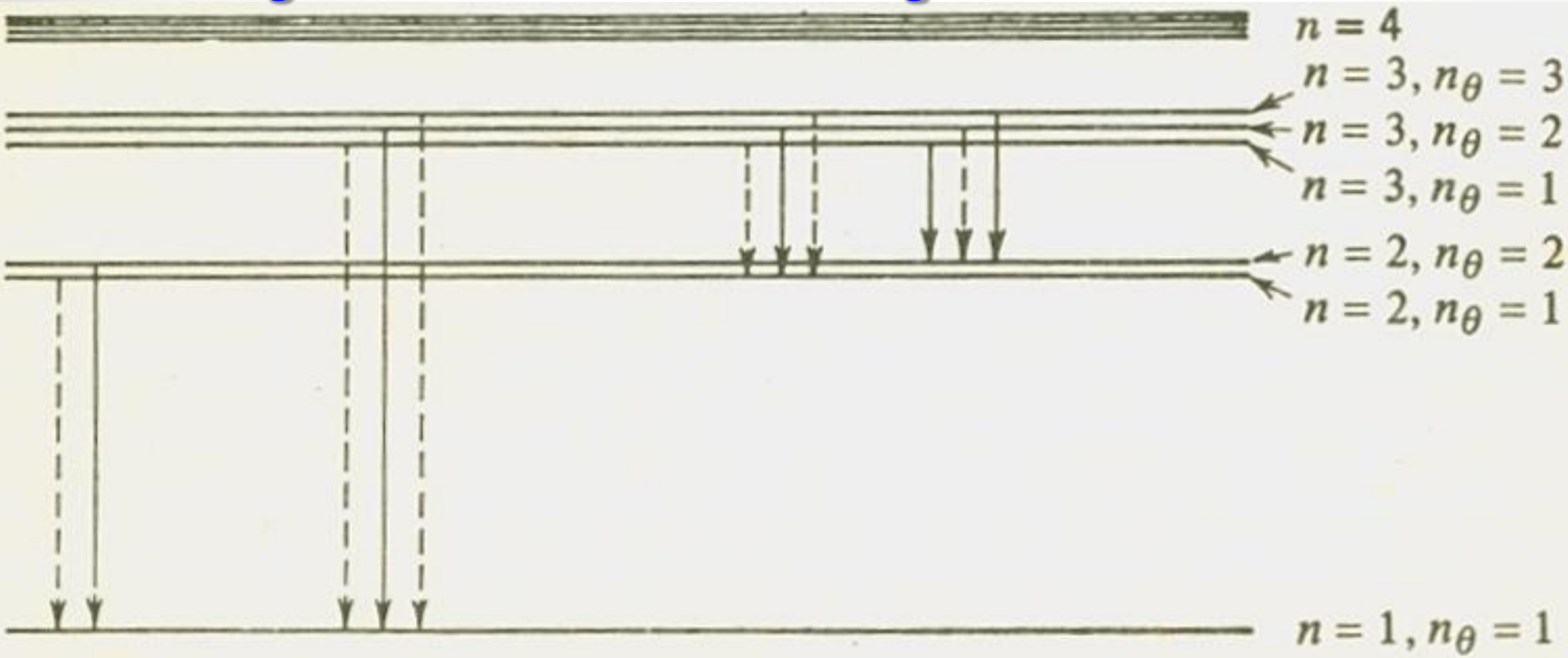
$$E_{n,n_\theta}^{Som-relat} = -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{1}{n_\theta}-\frac{3}{4n}\right]\right]$$

- $n = n_\theta + n_r$ **n=1,2,3,....**

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o\hbar c} = \frac{\upsilon_1}{c} \cong \frac{1}{137}$$

- **α é a constante de estrutura fina.** ***(Daí o nome de constante de estrutura fina).***

O átomo de H na quantização de Bohr-Wilson-Sommerfeld com correção relativística no movimento relativo – ocorre a quebra da degenerescência em energia e a estrutura fina do H.



A separação de estrutura fina de alguns níveis de energia do átomo de hidrogênio. A separação é bastante exagerada. Transições que produzem as linhas observadas no espectro do hidrogênio são indicadas por setas sólidas.

As transições das linhas tracejadas não são observadas, indicando a a existência da "regra de seleção": $\Delta n_\theta = \pm 1$, em acordo com o princípio de correspondência de Bohr.

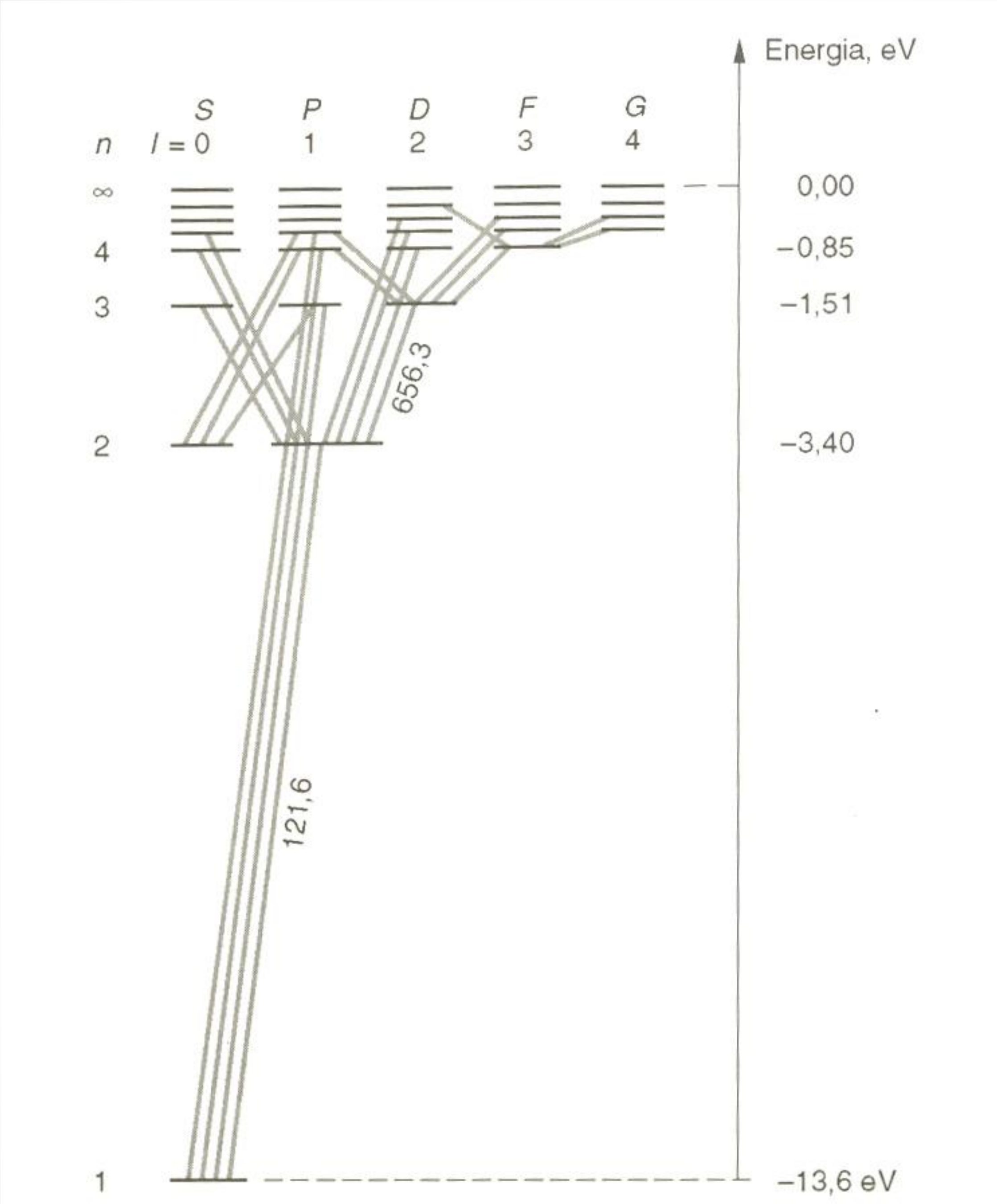


Figura do livro : Modern Physics - T. Thornton e Rex

Resultado da Mecânica Quântica não relativística (e sem spin) AGUARDE Tópico IV

Há **degenerescência dos auto-estados de energia:** diferentes estados (diferentes funções de onda) com a mesma energia (aqui agrupados só nos diferentes ℓ)

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$$

Compare com o modelo de Bohr e Wilson Sommerfeld!

Mas...e a estsrutura fina?!

Estado da arte do H - 2013

1. O resultado da mecânica quântica não relativísitca de Schroedinger com a força coulombiana como força atômica dará o mesmo resultado que o modelo de Bohr/Wilson Sommerfeld para a energia (Tópico IV). Mas a quantização do momento angular é diferente, com novo número quântico: $L^2=\ell(\ell+1)\hbar^2$ com $\ell=0,1,2...$

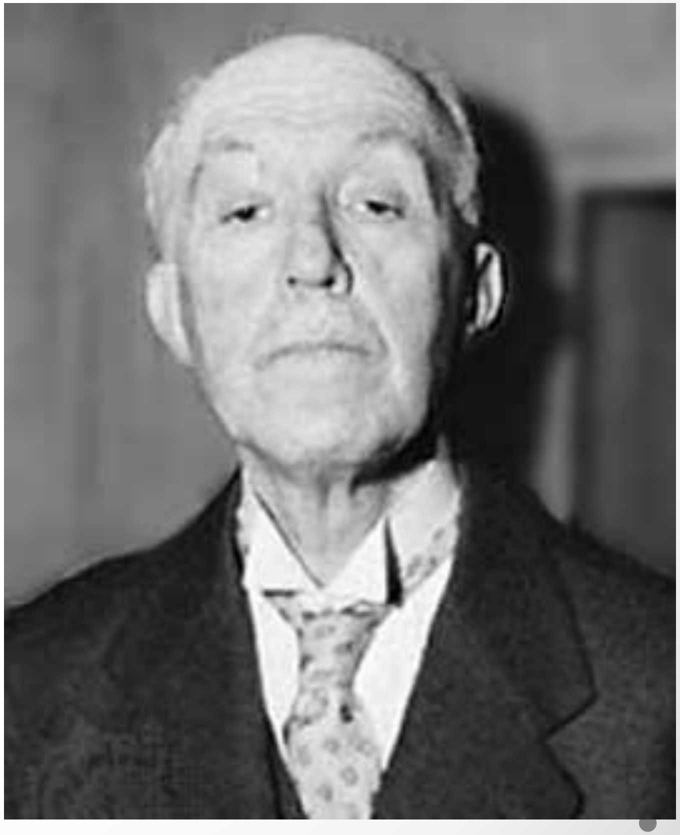
2. Em 1927 Dirac faz a mecânica quântica relativística e lá aparece algo "novo" com estrutura matemática de momento angular: o spin. Usando $S^2=s(s+1)\hbar^2$ com $s=1/2$ solução da equação dá conta da estrutura fina do H.

3. Usando a equação não relativística com a força coulombiana atrativa mais a interação do spin com o momento anguar orbital, a interação spin-órbita, que dá uma energia potencial muito menor que a coulombiana, se tem o resultado do espectro de energia com a estrutura fina. Na solução aparece o momento angular total, também quantizado, que é a soma do momento angular do movimento relativo com o spin. É o que se usa no estudo do H e nos demais átomos.

Princípio de de Broglie - 1924

- Como a **radiação eletromagnética** tem caráter dual **(onda-partícula)** e é, juntamente com a **matéria** (partículas com massa de repouso não nula: partícula material) **constituinte do universo físico**, então a **simetria da natureza** exige que ***a matéria também tenha caráter dual, ou seja, há uma onda associada à partícula material (partícula-onda).***

Louis Victor de Broglie (1892-1987) físico francês – prêmio Nobel de Física em 1929



As relações de conexão partícula-onda – fótons e partículas materiais

- *As relações de conexão* entre as **grandezas do caráter corpuscular (E, p) com as do caráter ondulatório: (ν, λ)** são as mesmas para os constituintes do universo físico - radiação eletromagnética e partículas de matéria.
- **Valem para fótons e partículas materiais as relações:**

$$E = h\nu = \hbar w$$

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

- **CUIDADO!**
  - $\lambda\nu = c$ para $m_o = 0$
  - $\lambda\nu \neq v$ para $m_o \neq 0$ (demonstrado em aula!)

Velocidades das ondas clássicas

Ondas monocromáticas:

$$\upsilon_{onda} = \lambda \nu = w/k = \upsilon_{fase}$$

Ondas não monocromáticas (um exemplo mais no final da aula):

$$\upsilon_{onda} = \upsilon_{grupo} = \frac{dw}{dk}$$

Como seria a velocidade nas ondas das partículas?

- **Para ser análogo ao caráter dual da REM, a velocidade da onda tem que ser igual a velocidade da partícula**

A velocidade da partícula-onda

- Energia (e momento linear) da partícula não relativística de velocidade constante: $$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}$$
- Momento linear e energia da partícula relativística: $$p = m(\upsilon)\upsilon_{part} \qquad E = \sqrt{p^2c^2 + m_o^2c^4} = mc^2$$
- A velocidade de fase, v=λν, e as relações de de Broglie: $$\upsilon_{onda}^{deBroglie} = \upsilon_{fase} = \lambda\nu = \frac{h}{\lambda} \times \frac{E}{h} = \frac{E}{p}$$
- Então valeriam as seguintes igualdade:

$$\upsilon_{onda}^{deBroglie} = [\frac{E}{p}]_{class} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{\upsilon_{part}}{2} !!!!!! \qquad \upsilon_{onda}^{deBroglie} = [\frac{E}{p}]_{relat} = \frac{mc^2}{m\upsilon_{part}} = \frac{c^2}{\upsilon_{part}} > c!!!!!$$

Conclusão: a partícula, com velocidade clássica ou relativística, e a onda associada não estariam de acordo. Jogue-se fora a velocidade de fase como a velocidade da onda da partícula mesmo quando o módulo da velocidade for constante.

A velocidade da partícula-onda – cont.

- **A velocidade de grupo e as ondas de de Broglie:**

$$\upsilon_{onda} = \upsilon_{grupo} = \frac{dw}{dk} = \frac{\frac{dE}{\hbar}}{\frac{dp}{\hbar}} = \frac{dE}{dp}$$

- **Partícula com velocidade não relativística :**

$$\upsilon_{grupo} = \frac{dw}{dk} = [\frac{dE}{dp}]_{class} = \frac{2p}{2m} = \upsilon_{part}$$

- **Partícula com velocidade relativística:**

$$\upsilon_{grupo} = \frac{dw}{dk} = [\frac{E}{p}]_{relat} = \frac{1}{2}\frac{2pc^2}{\sqrt{p^2c^2 + m_o^2c^4}} = \frac{pc^2}{mc^2} = \upsilon_{part}$$

- **Conclusão: O lado partícula e o lado onda estão de acordo sobre as suas velocidades!!!** ***Adote-se a velocidade de grupo para a velocidade das ondas das partículas em qualquer caso!***

As ondas dos estados estacionários

- **Átomo de Hidrogênio e a onda de de Broglie:**
- **Onda circular estacionária de raio r,** inspirada nos estados estável e instáveis de Bohr. Condição: onda estacionária e validade da relação de de Broglie:

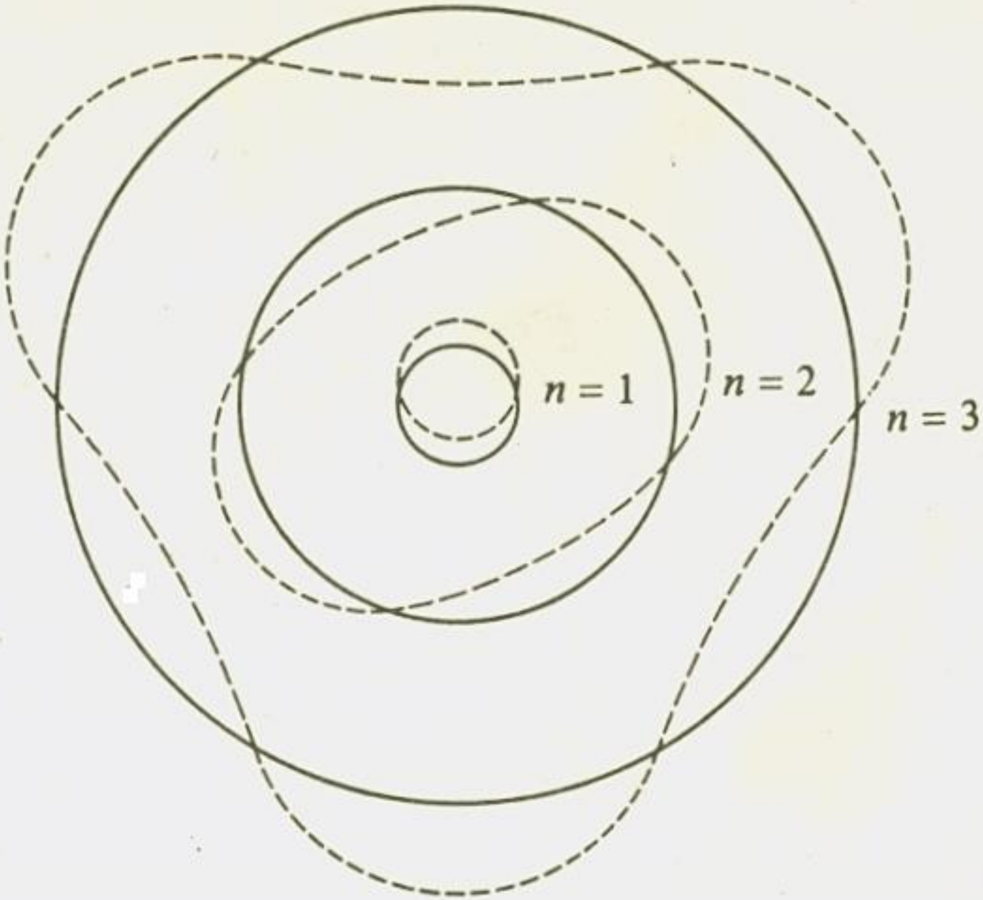
$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{p}$$

Decorre uma regra de quantização:

$$pr = L = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

A dualidade partícula-onda nas partículas materiais leva à mesma quantização do momento angular proposta por Bohr como hipótese, e à quantização de Wilson-Sommerfeld.

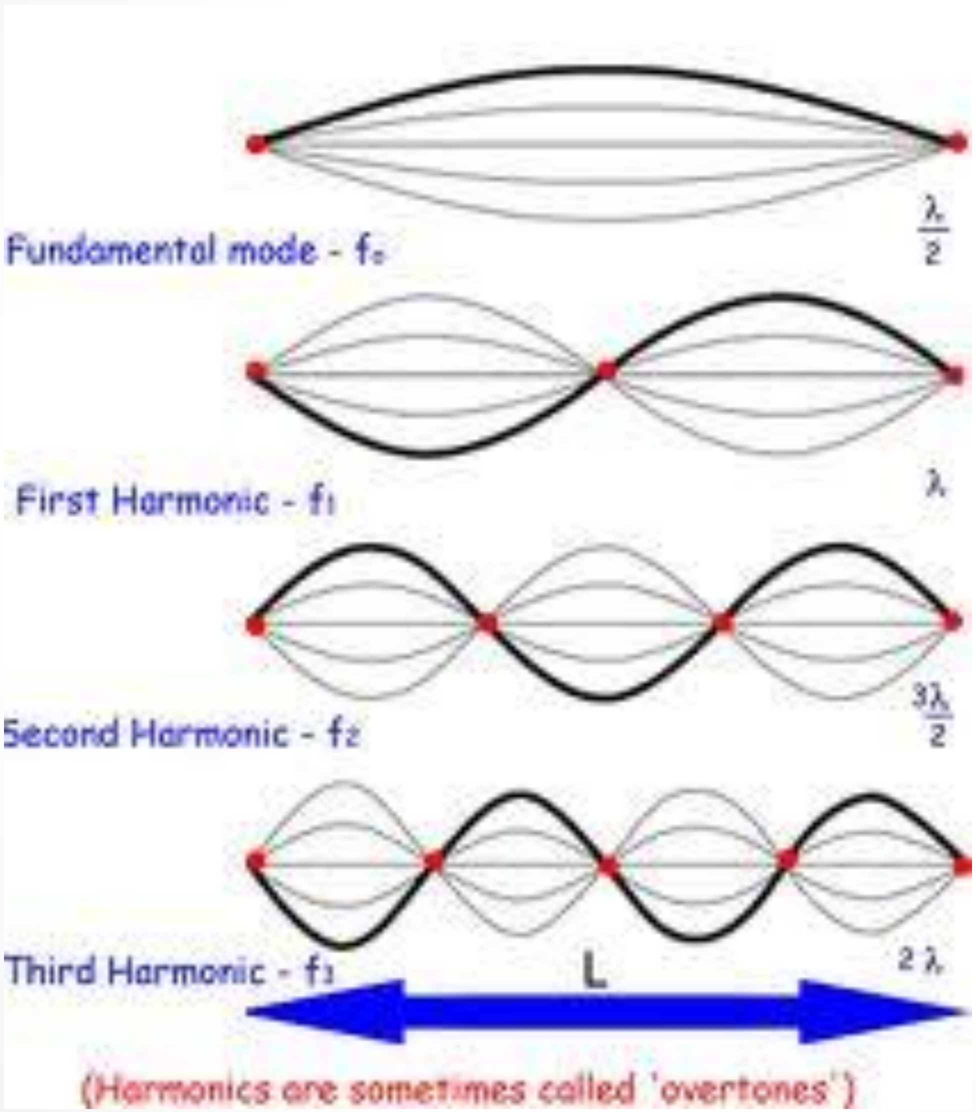
As ondas de de Broglie para o átomo de H



Cuidado*: restritas às órbitas circulares do modelo de Bohr!*

Ilustração das ondas de de Broglie estacionárias, feita para as três primeiras órbitas de Bohr. A posição dos nós pode, evidentemente, ser em qualquer ponto da órbita, desde que seus espaçamentos sejam como mostrado.

Ondas estacionárias em cordas



As linhas grossas são as ondas em um instante.
Em outros instantes são as outras linhas.

Os nós, pontos (x) nos quais o valor da função da onda (y(x,t) é nulo, são sempre (qualquer instante t) os mesmos.

Assim como os máximos da função de onda são nas mesmas posições x, embora com diferentes valores da função de onda y em instantes t diversos.

De Broglie – possíveis ondas estacionárias de partículas com v=cte: movimento retilínio e circular