Instituto de Física
USP

Física V - Aula 25

Professora: Mazé Bechara

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

1. **Ainda o átomo de hidrogênio, na procura do entendimento da estrutura fina das linhas de absorção e emissão. As órbitas elípticas na interação coulombiana atrativa elétron-núcleo e a quantização dea energia segundo Wilson-Sommerfeld. Os estados degenerados de energia do átomo de H. A correção relativística de Sommerfeld e a quebra da degenerescência em energia - descrição da estrutura fina. 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, e comprimento de onda) e as mais características de partículas (energia e momento linear).

3. **A velocidade da onda da partícula material** com velocidades não relativísticas e não 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.**

As quantizações de Wilson-Sommerfeld para o átomo de H

- **O átomo de hidrogênio, no modelo de Bohr**, é um elétron interagindo com um núcleo por uma força coulombiana atrativa. Assim está sujeito a uma força central.
- 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:**

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

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

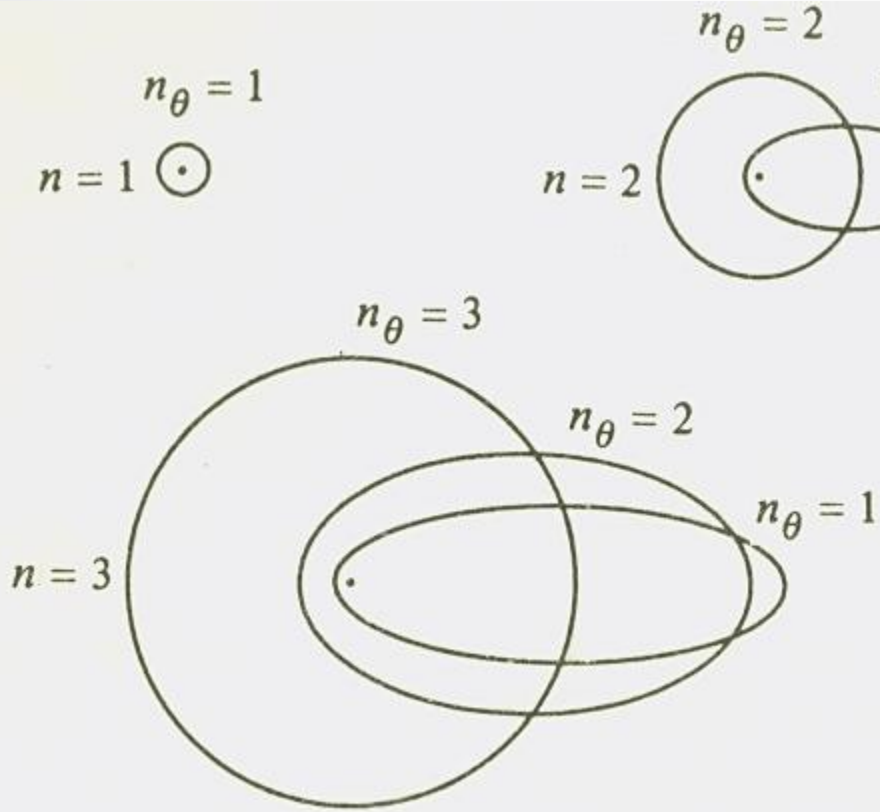
As energias do átomo de H na quantização de Wilson-Sommerfeld

- **As energias do átomo de H:**
-
- $$E^{Wil-Som}_{n_\theta,n_r} = E^{Wil-Som}_{n} = -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{(n_\theta + n_r)^2} = -\frac{Z^2}{n^2} 13{,}60 eV$$

$$n_r = 0(MCU), 1, 2, 3 \ldots \qquad n_\theta = 1, 2, 3 \ldots$$

$$n = n_\theta + n_r = 1, 2, 3 \ldots$$

-



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

Estados atômicos **degenerados em energia do H, um nome técnico para** **estados diferentes (com trajetórias e momentos angulares diferentes), mas com mesma energia**

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

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

Figura do R. Eisberg, R. Resnick – Fisica Quântica

A 1ª ordem da correção relativística de Sommerfeld

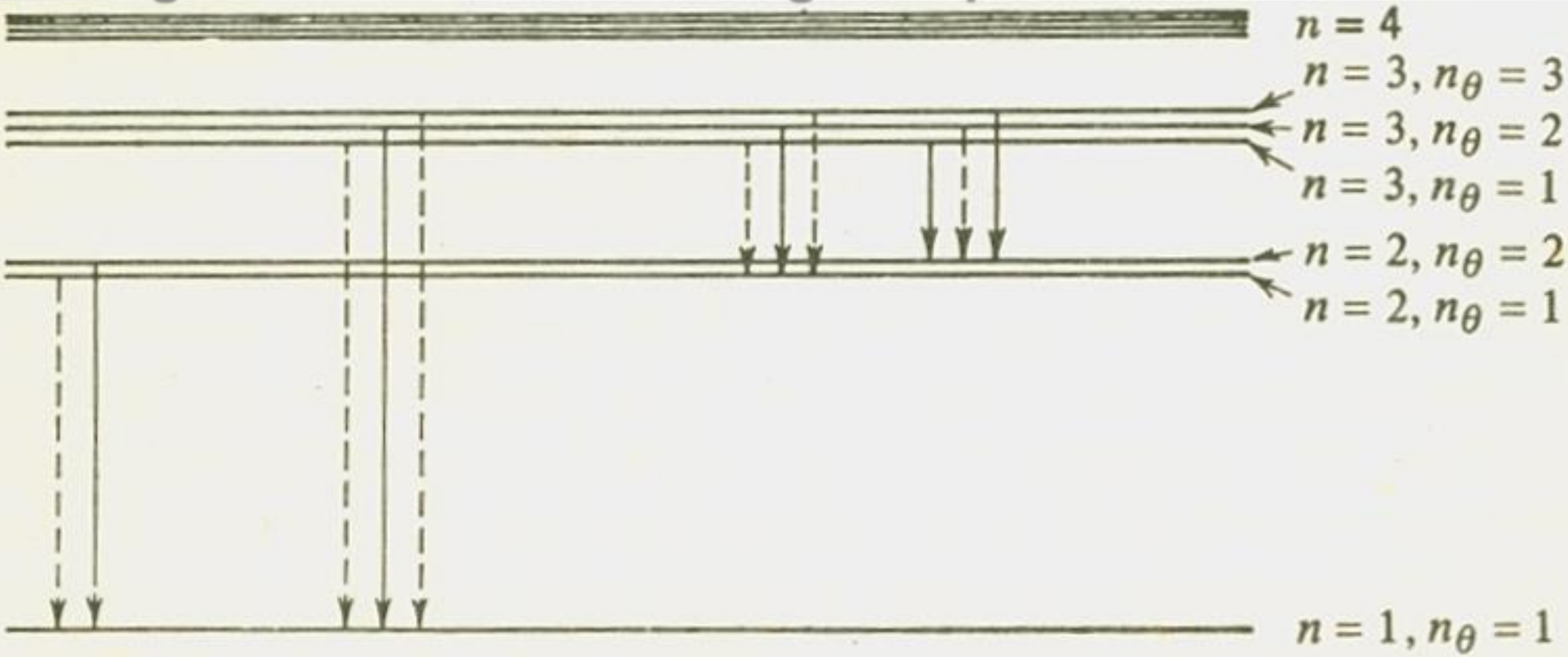
$$E_{n,n_\theta}^{Som-relat} = -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{1}{n_\theta}-\frac{3}{4n}\right]\right]$$

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

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

- α é a constante de estrutura fina. *(A í a origem do nome de constante).*

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

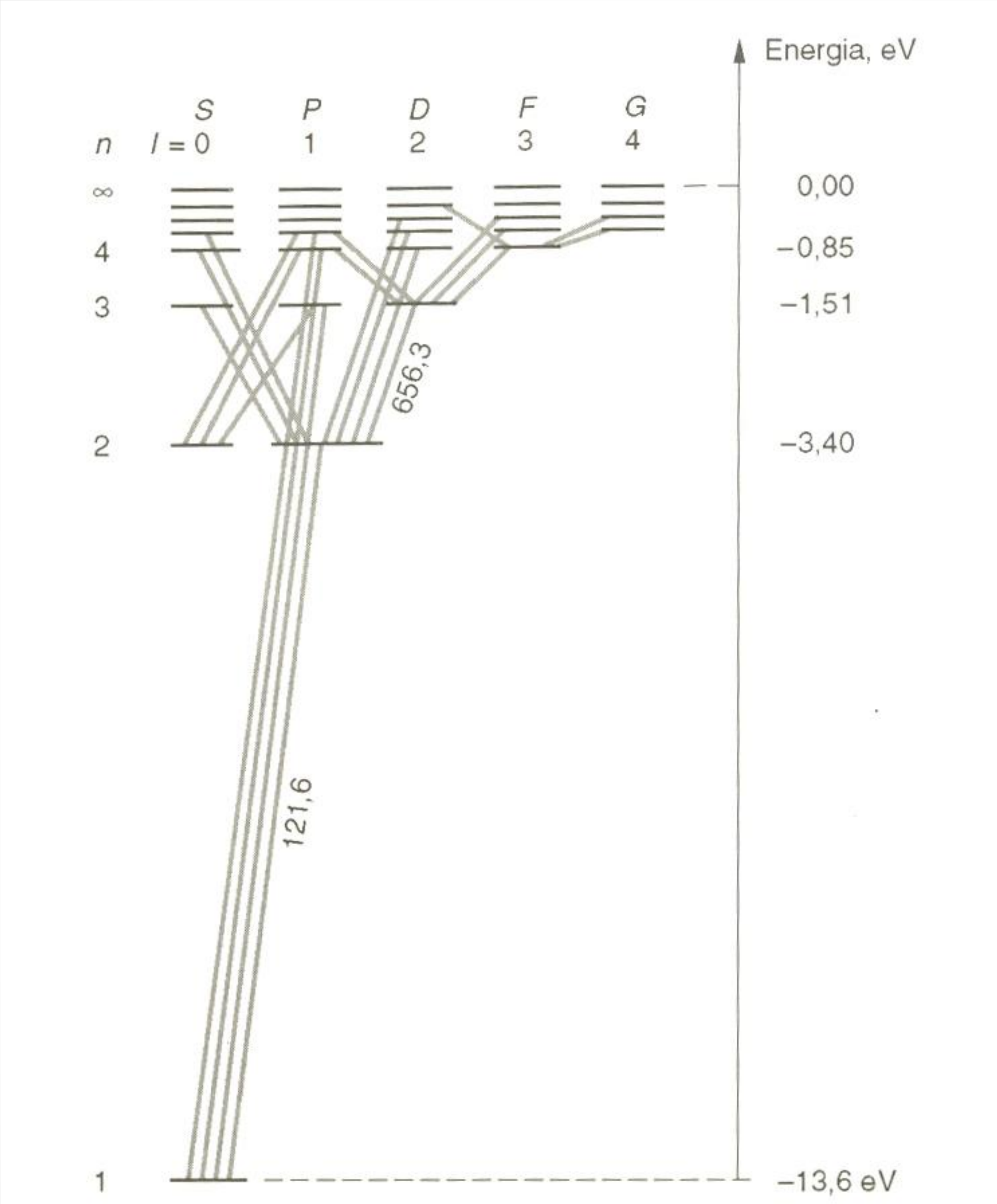


Figura do livro: *Modern Physics* - T. Thornton e Rex

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 da disciplina). Mas a quantização do momento angular é diferente, com novo número quântico: $L^2=\ell(\ell+1)\hbar^2$ com $\ell=0,1,2\ldots$ Ou seja, o momento angular do estado fundamental é zero!

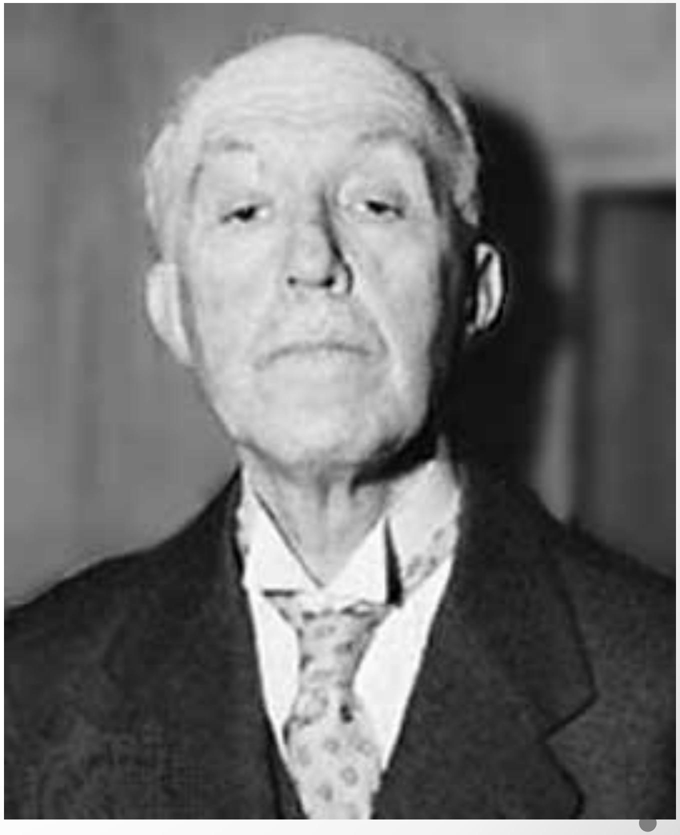
2. Em medidas experimentais havia indicação de outra grandeza física associada ao momento angular, em experimentos de campos magnétaicos variáveis sobre átomos de H. Em 1927 Dirac faz a mecânica quântica relativística e lá aparece algo "novo" com estrutura matemática de momento angular: o spin. Usando $S^2=s(s+1)\hbar^2$ 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 e a matéria tem caráter dual (onda-partícula) e são os constituintes do universo físico, então a simetria da natureza exige que a matéria também tenha caráter dual, como proposto por Eisntein para a radiação eletromagnética.

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



As relações de conexão partícula-onda, para 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 – as velocidades de onda e de fase:**

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

- **Ondas não monocromáticas:**

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

- **Seria assim também a velocidade nas ondas das partículas?**

Resposta: a velocidade da onda tem que ser igual a velocidade da partícula. Assim, como provaremos a seguir, não faz sentido velocidade de fase, nas ondas de partículas materiais.

Velocidade de fase da partícula-onda?

- Se fizer sentido a velocidade de fase, v=λν, sendo válidas as relações de de Broglie, se teria:

$$\upsilon_{fase}^{deBroglie} = \lambda\nu = \frac{h}{\lambda} \times \frac{E}{h} = \frac{E}{p}$$

- Porém a energia e o momento linear da partícula não relativística de velocidade constante obedecem as relações:

$$E = \frac{p^2}{2m_o} \qquad\qquad p = m_o \upsilon_{part}$$

- E o Momento linear e energia da partícula relativística:

$$p = m\upsilon_{part} \qquad\qquad E = \sqrt{p^2c^2 + m_o^2c^4} = mc^2$$

- Então valeriam as seguintes igualdades:

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

Conclusão: a partícula, com velocidade clássica ou relativística, e a onda associada não estariam de acordo. Jogue-se fora a velocidade de fase como possibiliade de representar a velocidade da onda da partícula.

E a velocidade de grupo?

- **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 :**

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

- **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 materiais, mesmo para as monocromáticas!***

As ondas dos estados estacionários

- **Estados dos Átomos de Hidrogênio e a onda de de Broglie:**

- **São ondas circulares estacionárias de raios r:** inspiradas nos movimentos do elétron no modelo de Bohr.

- Condição de onda estacionária:

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

- **Condição de onda estacionária + relação de de Broglie:**

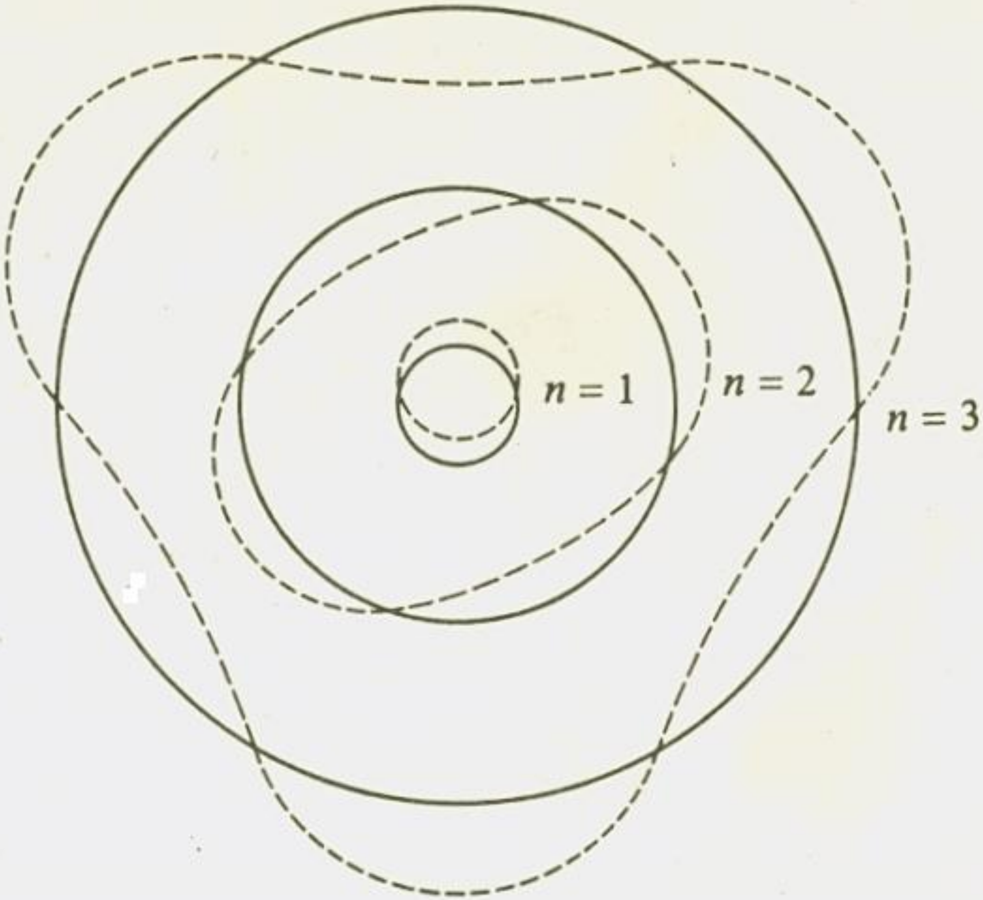
$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{p}$$

$$\Rightarrow pr = n\frac{h}{2\pi}$$

$$\Rightarrow L = n\hbar$$

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. Mas muda a visão da natureza da partícula material

As ondas de de Broglie para o átomo de H

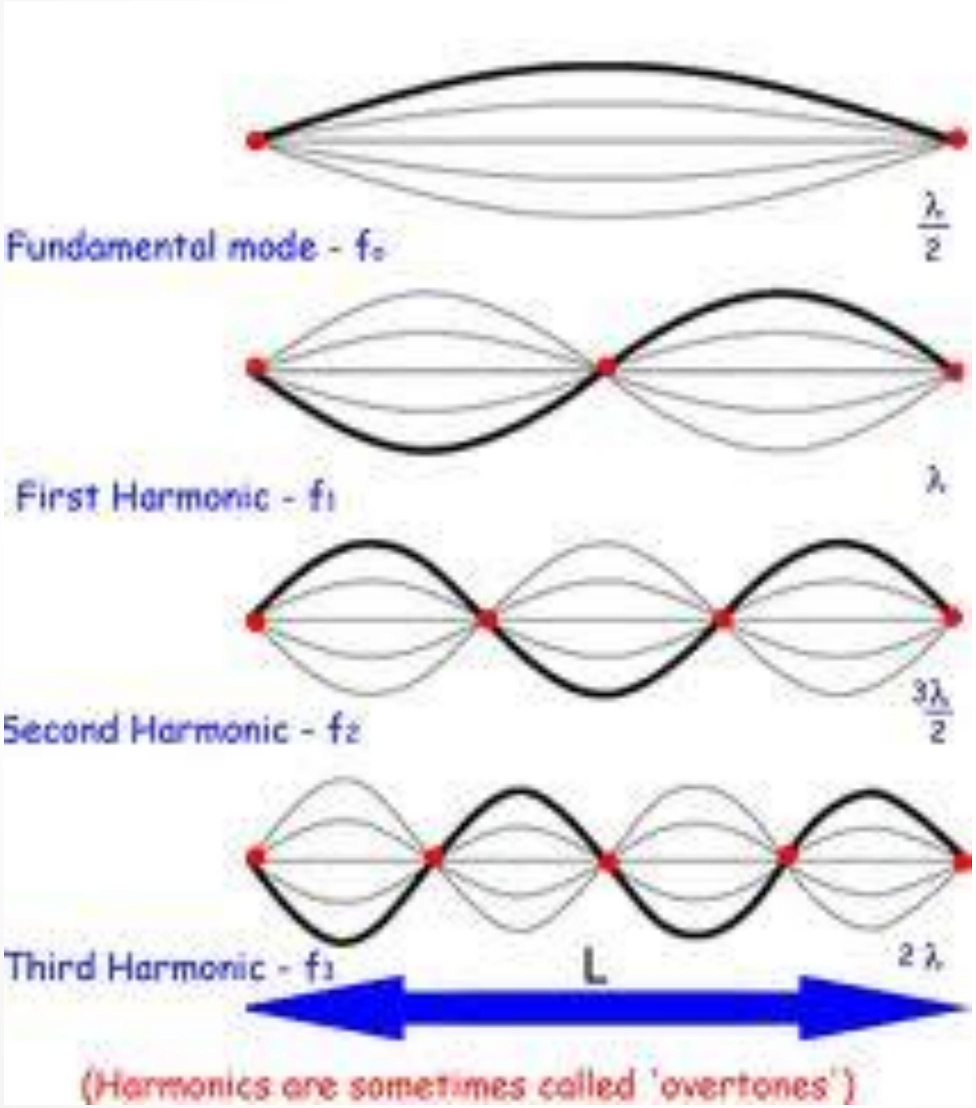


Observações:

1. ***Ondas restritas às órbitas circulares do modelo de Bohr!***
2. ***Estão aí desenhadas as ondas de três átomos diferentes: no EF, e nos 1º e 2º estados excitados.***
3. ***O tamanho dos raios de Bohr não estão na escala qualitativa correta.***

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