

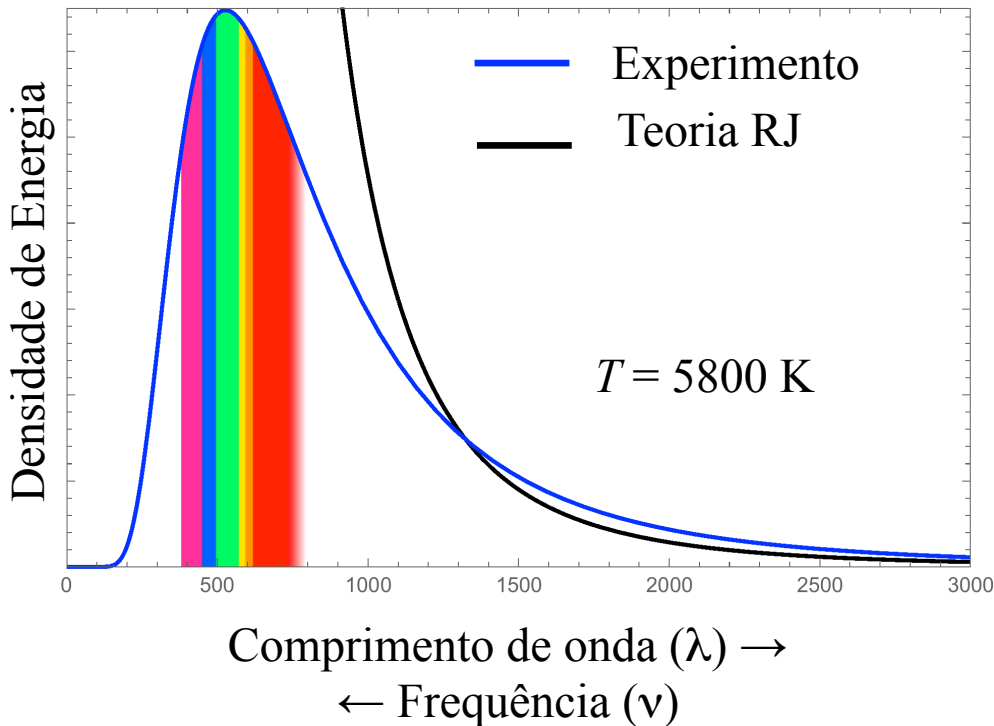


4300259 – Termodinâmica

Quantização da Energia:

Oscilador Harmônico Simples

Radiação do Corpo Negro



– O *Corpo Negro* é um objeto ideal que não reflete ondas eletromagnéticas (EMs), sendo um absorvedor perfeito. A teoria clássica de Rayleigh e Jeans (RJ) não concorda com os dados experimentais sobre a emissão de ondas EMs por um corpo negro à temperatura T .

– Densidade de energia em função da frequência ν (Teoria RJ):

$$\begin{aligned}\rho(\nu)d\nu &\propto \langle \epsilon \rangle \nu^2 d\nu \\ &\propto k_B T \nu^2 d\nu\end{aligned}$$

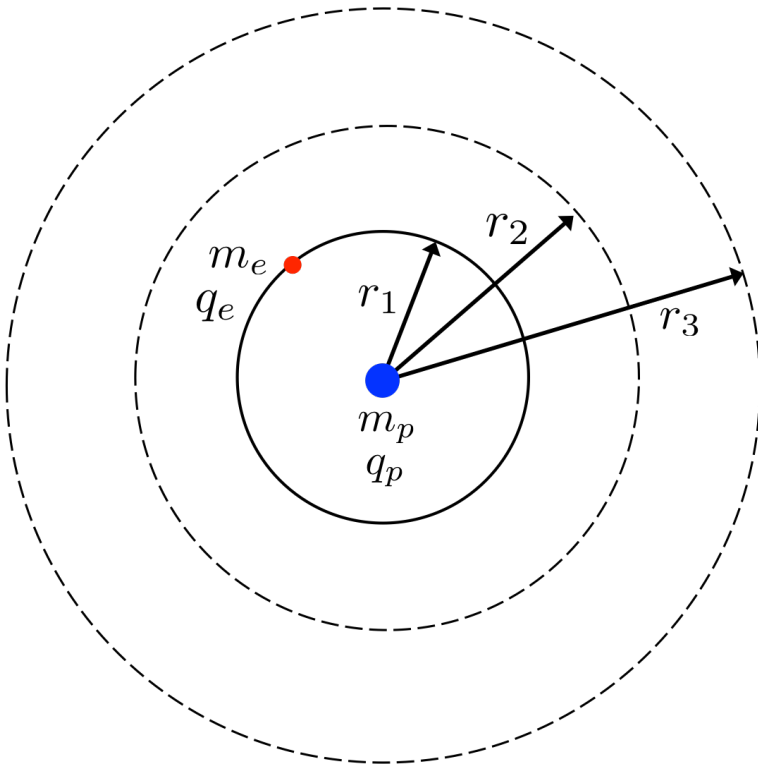
– Planck (1900): admitiu uma distribuição de Boltzmann discreta:

$$\begin{aligned}\langle \epsilon \rangle &= \sum_n \epsilon_n \exp\left(-\frac{\epsilon_n}{k_B T}\right) \\ \epsilon_n &= nh\nu \quad \text{com } n = 0, 1, 2, \dots\end{aligned}$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s (Const. de Planck)}$$

Exemplo de Quantização: Modelo Atômico de Bohr (1913)

– Dados experimentais obtidos desde o século XIX indicavam que o átomo de hidrogênio apenas absorvia/emitia ondas eletromagnéticas em um conjunto discreto de frequências. Em 1913 Bohr sugeriu, para explicar esse fenômeno, um modelo que havia *níveis de energia* discretos:



– Raios das órbitas circulares ($a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m é o raio de Bohr):

$$r_n = a_0 n^2, \text{ com } n = 1, 2, 3, \dots$$

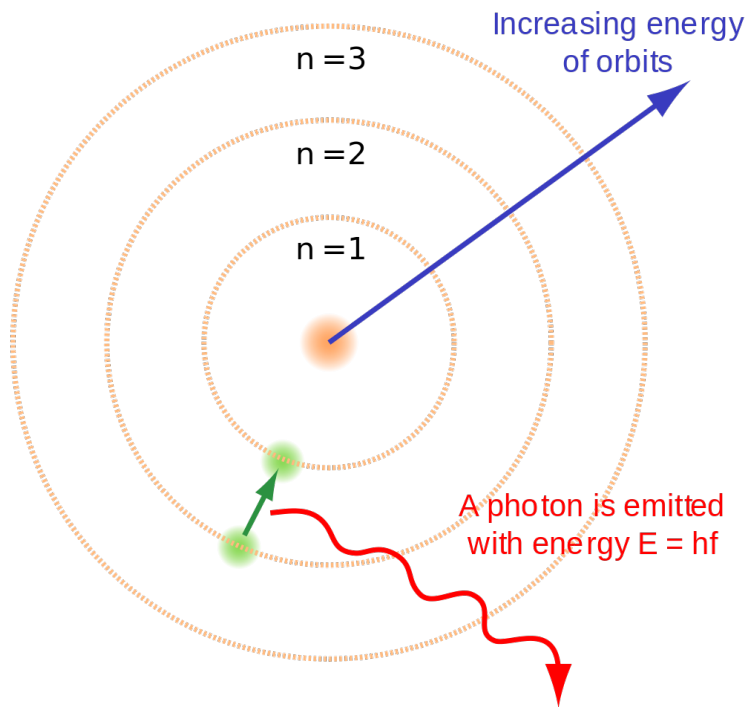
– Níveis de Energia ($E_R = 13.6$ eV é a constante de Rydberg).

$$E_n = -\frac{E_R}{n^2}, \text{ com } n = 1, 2, 3, \dots$$

OBS: 1 eV (“elétron-volt”) = 1.602×10^{-19} J

Exemplo de Quantização: Modelo Atômico de Bohr (1913)

– O modelo admite que as ondas eletromagnéticas são compostas por fótons ou *quanta* de radiação (*quanta* é o plural de *quantum*). Assim, os fótons são absorvidos ou emitidos:



– Absorção de um fóton:

$$E_n + E_{\text{foton}} \rightarrow E_{n+1}$$

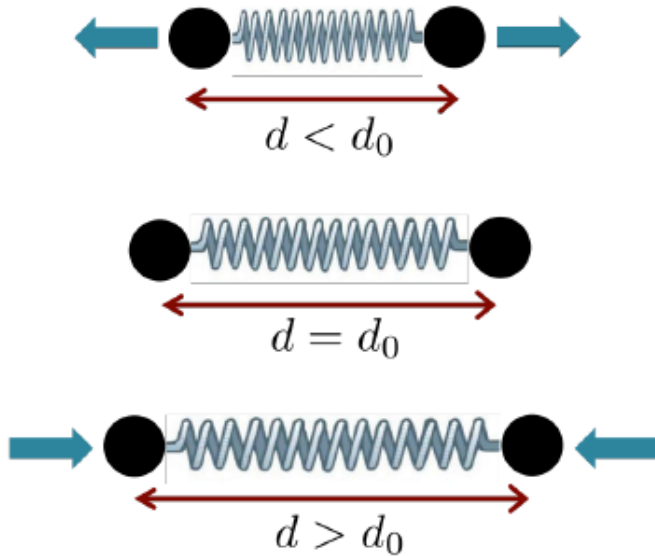
– Emissão de um fóton:

$$E_{n+1} \rightarrow E_{\text{foton}} + E_n$$

– A energia da radiação (fóton) é dada pelo produto da frequência (ν) da radiação e pela constante de Planck (h):

$$E_{\text{foton}} = h\nu$$

Quantização da Energia: Oscilador Harmônico Simples



Modelo de Molécula Diatômica

- Átomos são representados por esferas.
- Mola representa a força elétrica líquida (restauradora) entre os átomos.
- A distância de equilíbrio (mola relaxada) é $d = d_0$.
- A coordenada que descreve a deformação da mola é $s = d - d_0$.

Oscilador Clássico:

Força Elástica: $F_e = -k_e s$

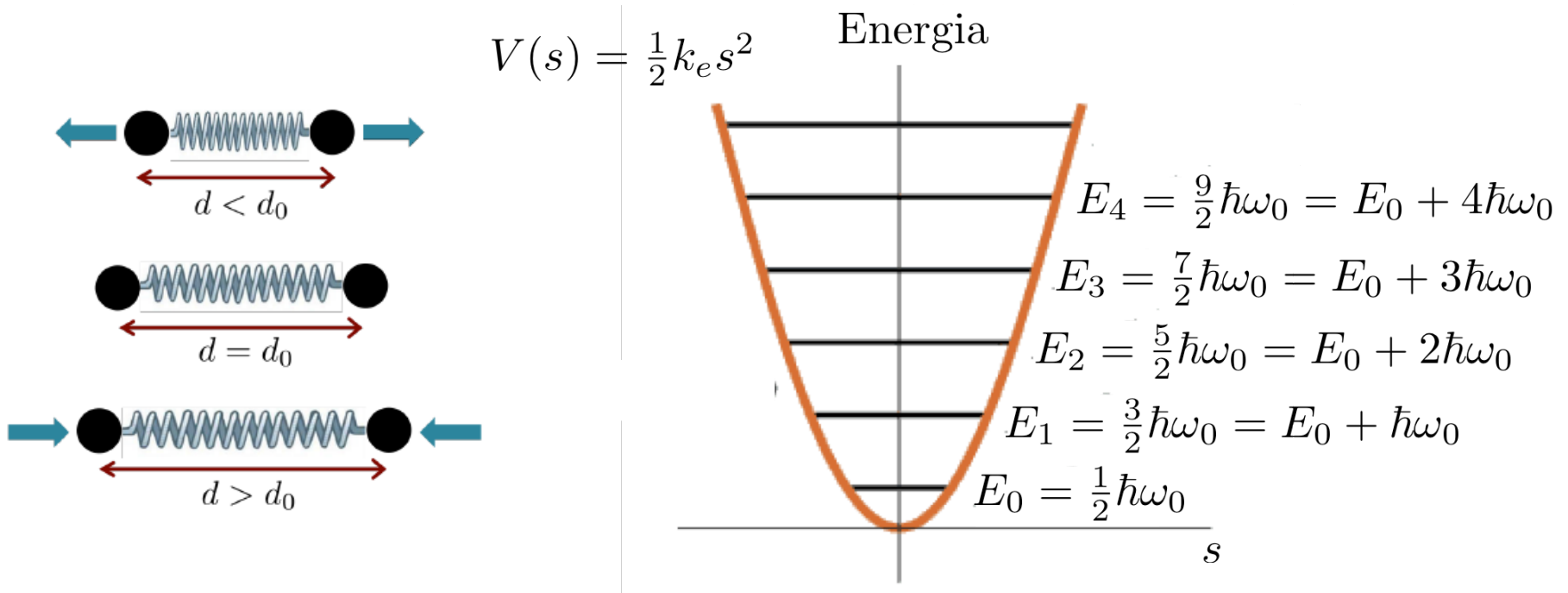
Frequência Angular: $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_e}{\mu}}$

Frequência e Período: $f = \frac{\omega_0}{2\pi} \quad T = \frac{2\pi}{\omega_0}$

Energia Mecânica:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}\mu v_s^2 + \frac{1}{2}k_e s^2 \\ &= \frac{1}{2}\mu v_s^2 + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 s^2 \end{aligned}$$

Quantização da Energia: Oscilador Harmônico Simples



Níveis de Energia do Oscilador Harmônico Quântico:

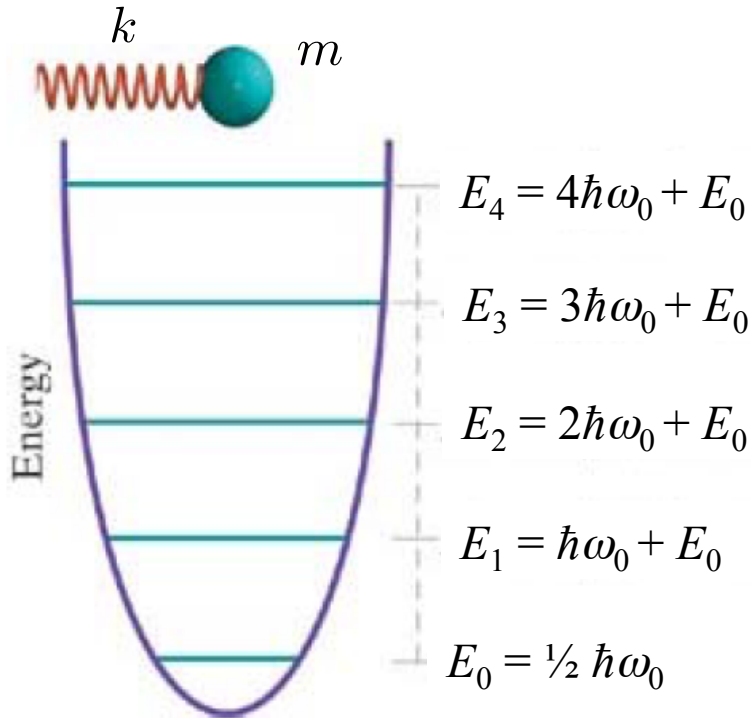
$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

- Nível de energia mais baixo: $n = 0$, com $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.
- Níveis de energia igualmente espaçados, $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0$.
- $\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck reduzida (“h cortado”).

Por que não percebo a quantização da energia do oscilador na aula de laboratório?



Para tentar responder, vamos tomar um sistema massa-mola com $k = 30$ N/m (mola pouco rígida) e $m = 50$ g (bolinha leve).

Admitindo a deformação $s_{\max} = 1$ mm, a energia do oscilador será:

$$E = \frac{1}{2}k_e s_{\max}^2 = 1.5 \times 10^{-5} \text{ J}$$

A quantização da energia se manifesta nos “saltos quânticos”, isto é, na separação entre níveis de energia vizinhos:

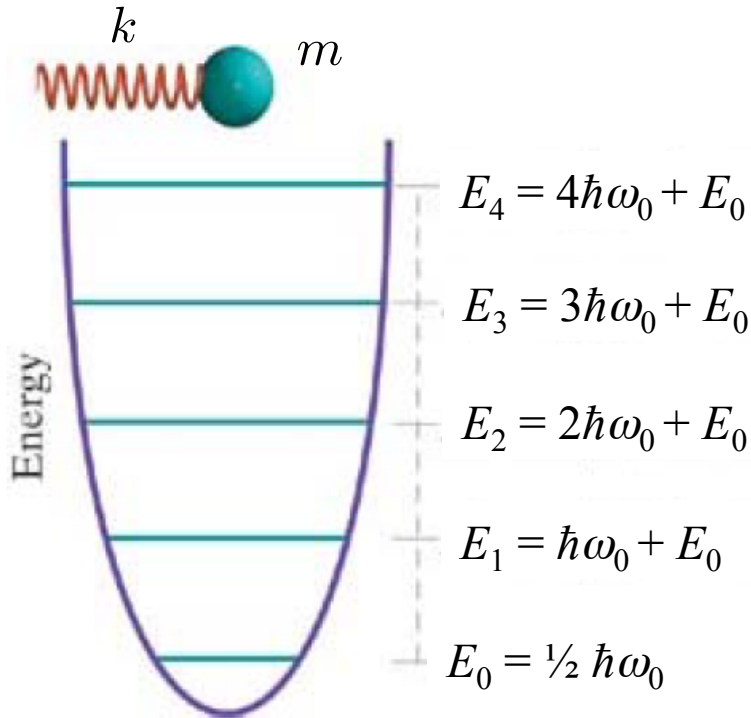
$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k_e}{m}} = 24.5 \text{ rad/s}$$

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{n+1} - E_n \\ &= \hbar\omega_0 = 2.6 \times 10^{-33} \text{ J} \end{aligned}$$

$$\frac{\Delta E}{E} = 1.7 \times 10^{-28} \lll 1$$

(A quantização é imperceptível!)

Por que não percebo a quantização da energia do oscilador na aula de laboratório?



Argumento alternativo: poderemos estimar a relevância da separação $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0$ frente à média entre os níveis vizinhos:

$E_{\text{med}} = \frac{1}{2} (E_{n+1} + E_n)$. Utilizando a expressão para os níveis de energia, iremos obter:

$$E_{\text{med}} = \frac{1}{2} (E_{n+1} + E_n) = (n + 1)\hbar\omega_0$$

Portanto:
$$\frac{\Delta E}{E_{\text{med}}} = \frac{1}{(n+1)}$$

Utilizando a energia estimada para o oscilador, 1.5×10^{-5} J, concluiremos que seu nível de energia quântico seria:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow$$
$$\Rightarrow n = \frac{E_n}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \approx 6 \times 10^{27}$$

$$\frac{\Delta E}{E_{\text{med}}} = 2 \times 10^{-28} \lll 1$$

(A quantização é imperceptível!)

Convenções Importantes

– Os níveis de energia são $\varepsilon_n = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + n\hbar\omega_0$. A constante $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$, chamada energia de ponto zero, não será relevante à discussão que realizaremos na Disciplina. Assim, iremos expressar a energia do oscilador *em relação ao nível mais baixo*, $E_n = \varepsilon_n - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$, isto é,

$$\boxed{E_n = n\hbar\omega_0} \quad \text{(energias em relação ao nível } \varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \text{)}$$

– As energias do oscilador são dadas por múltiplos da constante $\hbar\omega_0$, denominada *quantum* de energia. Assim, o nível mais baixo é $E_0 = 0$, o nível $E_1 = \hbar\omega_0$ tem um *quantum* de energia acima de E_0 , o nível $E_2 = 2\hbar\omega_0$ tem dois *quanta*, o nível $E_3 = 3\hbar\omega_0$ tem três *quanta*, etc.

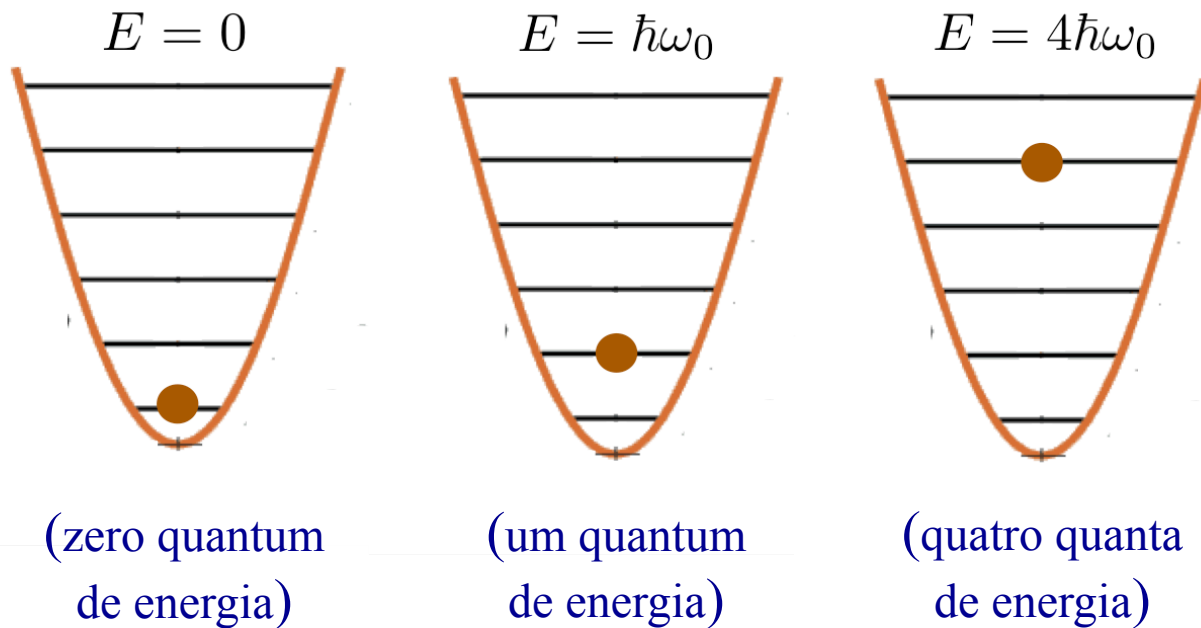
$$E_0 = 0 \quad \text{(zero quantum)}$$

$$E_1 = \hbar\omega_0 \quad \text{(um quantum)}$$

$$E_2 = 2\hbar\omega_0 \quad \text{(dois quanta)}$$

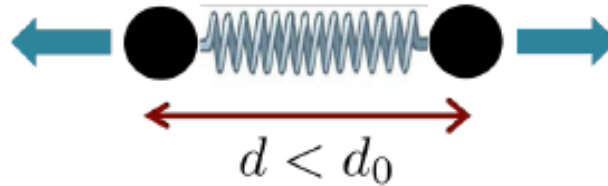
Convenções Importantes

– A energia do oscilador quântico será representada pelo diagrama abaixo, composto pela curva de energia potencial $V(s) = \frac{1}{2} k_e s^2$ (linha laranja), níveis de energia (linhas horizontais), e por um círculo que indica a energia do oscilador (em qual dos níveis o sistema se encontra):

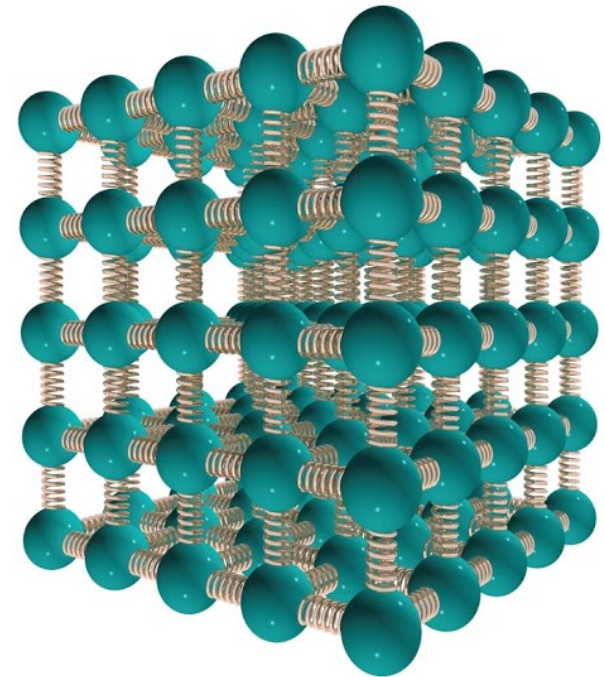


Sólido de Einstein

– Modelo de Molécula Diatômica: interação elétrica (restauradora) entre os átomos representada por uma mola:

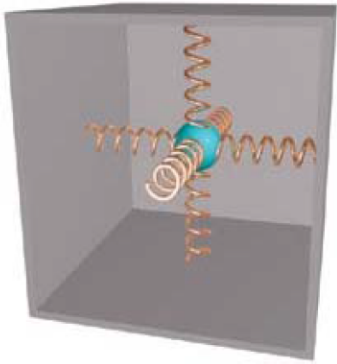


– Modelo de Sólido: tipicamente em metais, os átomos vibram em torno de posições médias que formam arranjos regulares. Um exemplo é mostrado na figura ao lado, na qual as posições médias dos átomos recaem sobre arestas de cubos (representação de esferas e molas):



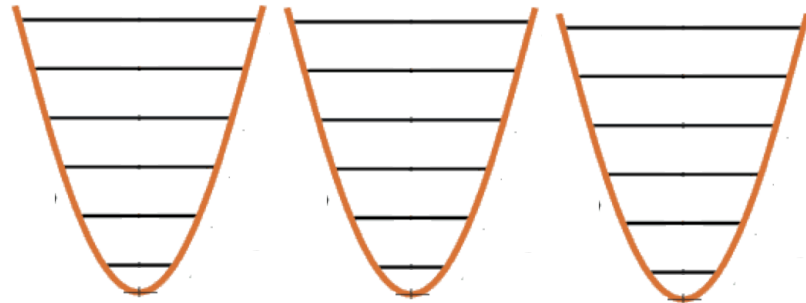
Sólido de Einstein

– No Modelo de Einstein, cada átomo é representado por um oscilador tridimensional (vibrando ao longo das direções cartesianas). Admite-se que as vibrações atômicas sejam *independentes*.



$$E = \left(\frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\right) + \left(\frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2y^2\right) + \left(\frac{1}{2}mv_z^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2z^2\right)$$

– Representação de um átomo no Sólido de Einstein:



$$E = n_x \hbar \omega_0 + n_y \hbar \omega_0 + n_z \hbar \omega_0 \\ = \underbrace{(n_x + n_y + n_z)}_{\text{quanta associados às vibrações ao longo das direções } Ox, Oy, Oz} \hbar \omega_0 = \underbrace{N}_{\text{N é o número de quanta de energia do átomo}} \hbar \omega_0$$

quanta associados às vibrações ao longo das direções Ox , Oy , Oz .

N é o número de quanta de energia do átomo