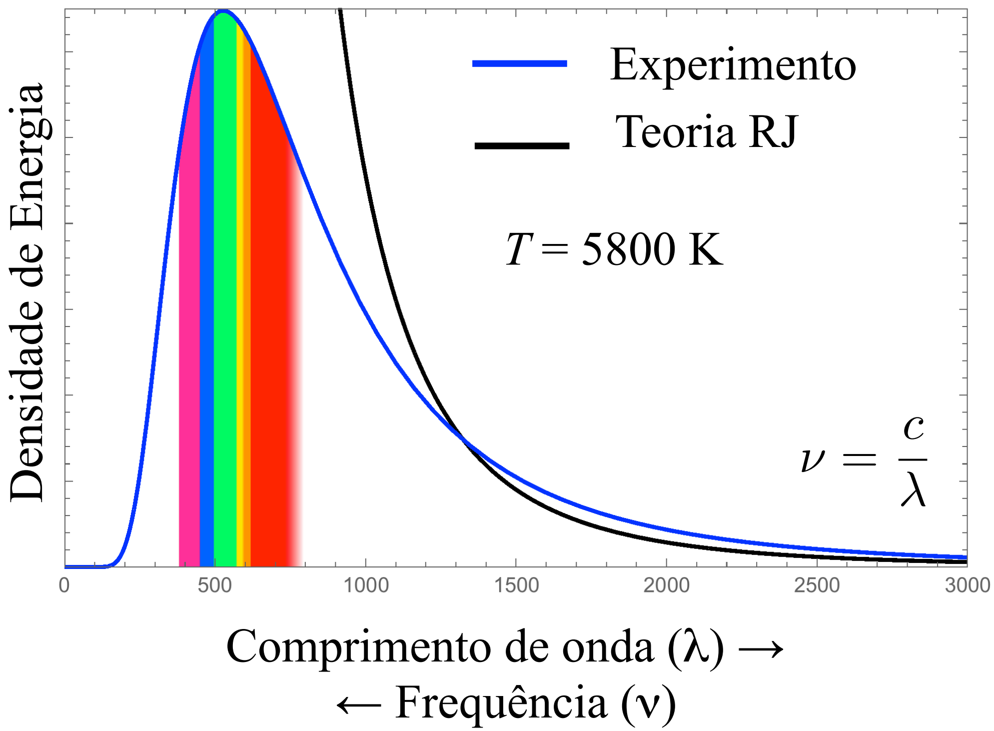
# 4300259 – Termoestatística

# Quantização da Energia:

## Oscilador Harmônico Simples*

*Livro-texto de Chabay & Sherwood, *Matéria e Interações*, Vol. 1, Cap. 12, *Entropia: Limites do Possível*.

# 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*.

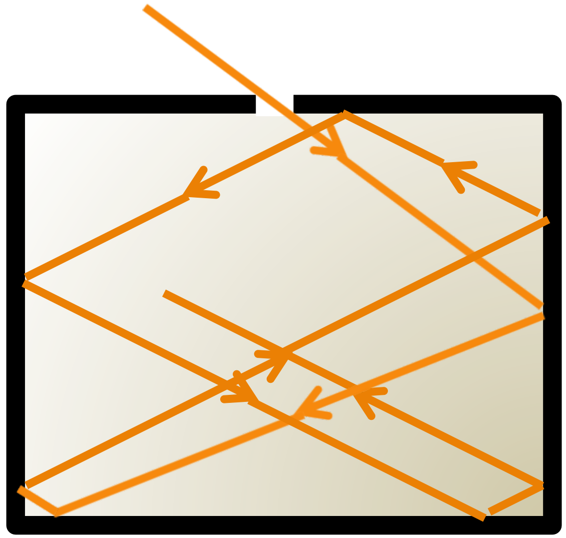
– Densidade de energia em função da frequência ν (Teoria RJ):

$$\rho(\nu)d\nu \propto \langle\epsilon\rangle\nu^2\, d\nu$$
$$\propto k_B T\nu^2\, d\nu$$

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

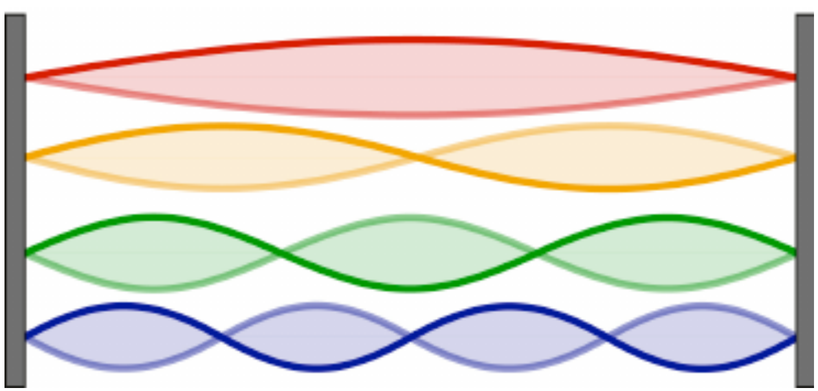
$$\langle\epsilon\rangle = \sum_n \epsilon_n \exp\left(-\frac{\epsilon_n}{k_B T}\right)$$
$$\epsilon_n = nh\nu \quad \text{com} \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

$h = 6.626\times10^{-34}$ J.s (Const. de Planck)



– **Realização Experimental**: caixa com paredes internas refletoras e um pequeno orifício. A radiação que entra pelo orifício sofrerá muitas reflexões antes de sair. Dessa forma, *o orifício se aproxima de um absorvedor perfeito* (corpo negro)

https://www.researchgate.net/publication/256477064_Global_and_local_aspects_of_causality_in_quantum_mechanics/figures?lo=1



– Por causa das sucessivas reflexões, no interior da cavidade existem ondas eletromagnéticas estacionárias (modos), em equilíbrio termodinâmico com as paredes refletoras (temperatura $T$).

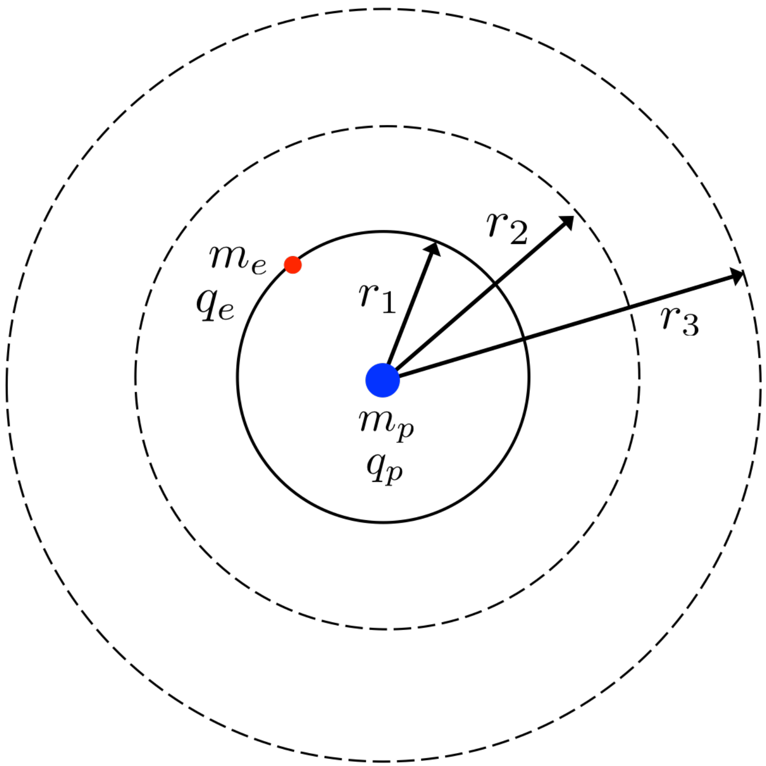
– A radiação emitida pelo orifício (por unidade de frequência) é proporcional à densidade de energia (por unidade de frequência) no interior da cavidade:

$$\rho = \left[\frac{\text{energia}}{\text{volume}}\right] = \left[\frac{\text{no. de modos}}{\text{volume}}\right] \times \left[\frac{\text{energia}}{\text{modo}}\right]$$

# 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:

Quantização do momento angular:
$L = n\,(h/2\pi)$, $n = 1,2,3,...$




– Raios das órbitas circulares ($a_0$ = $0.529\times10^{-10}$ m é o raio de Bohr):

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

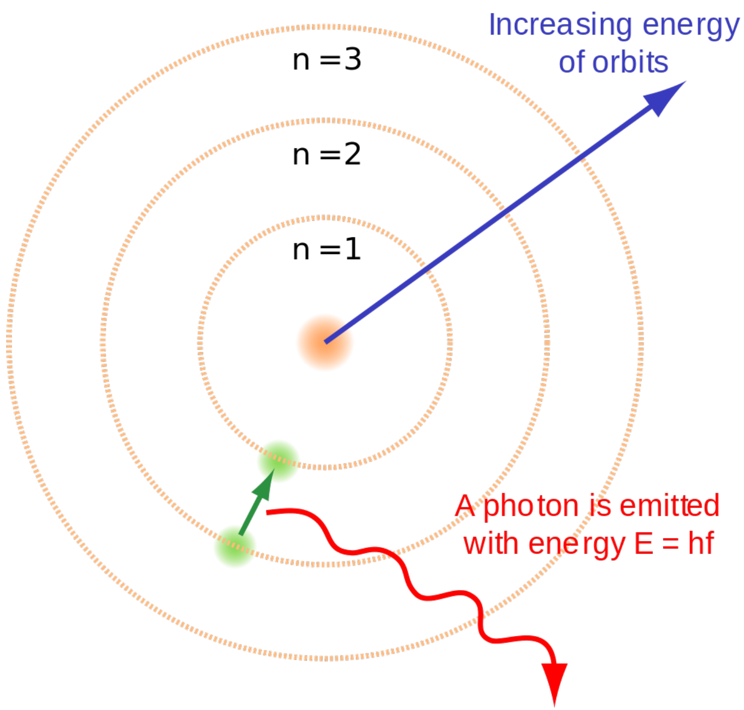
– Níveis de Energia ($E_R$ = 13.6 eV é a constante de Rydberg).

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

OBS: 1 eV (“elétron-volt”) = $1.602\times10^{-19}$ 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:

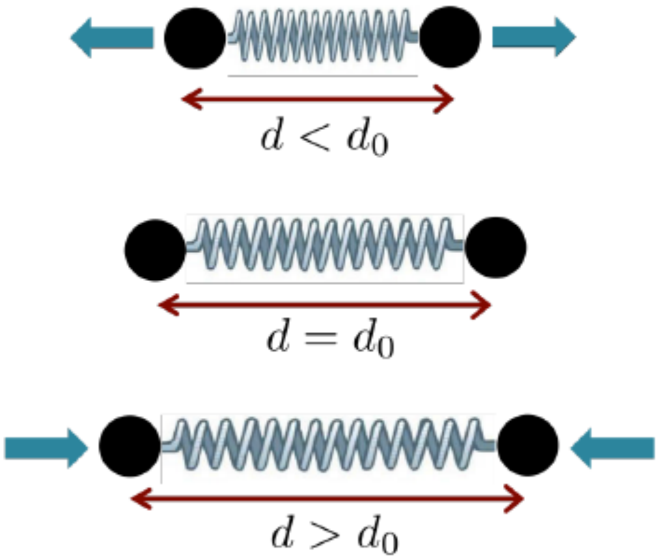
$$E_{n+1} \rightarrow E_{\text{foton}} + E_n$$

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

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

*A existência de fótons foi postulada por Einstein em 1905 para explicar o Efeito Fotoelétrico.

# 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: $F_e = -k_e s$

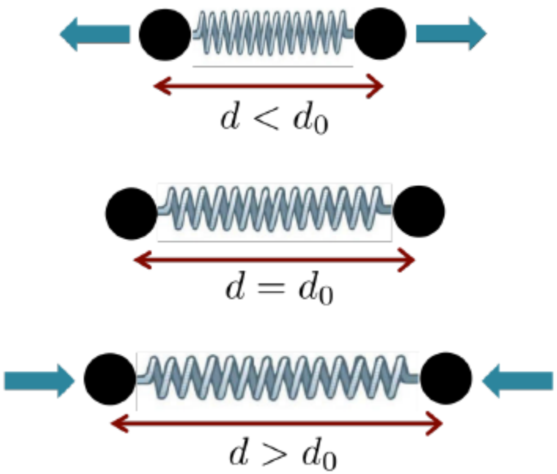
Frequência Angular: $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_e}{\mu}}$

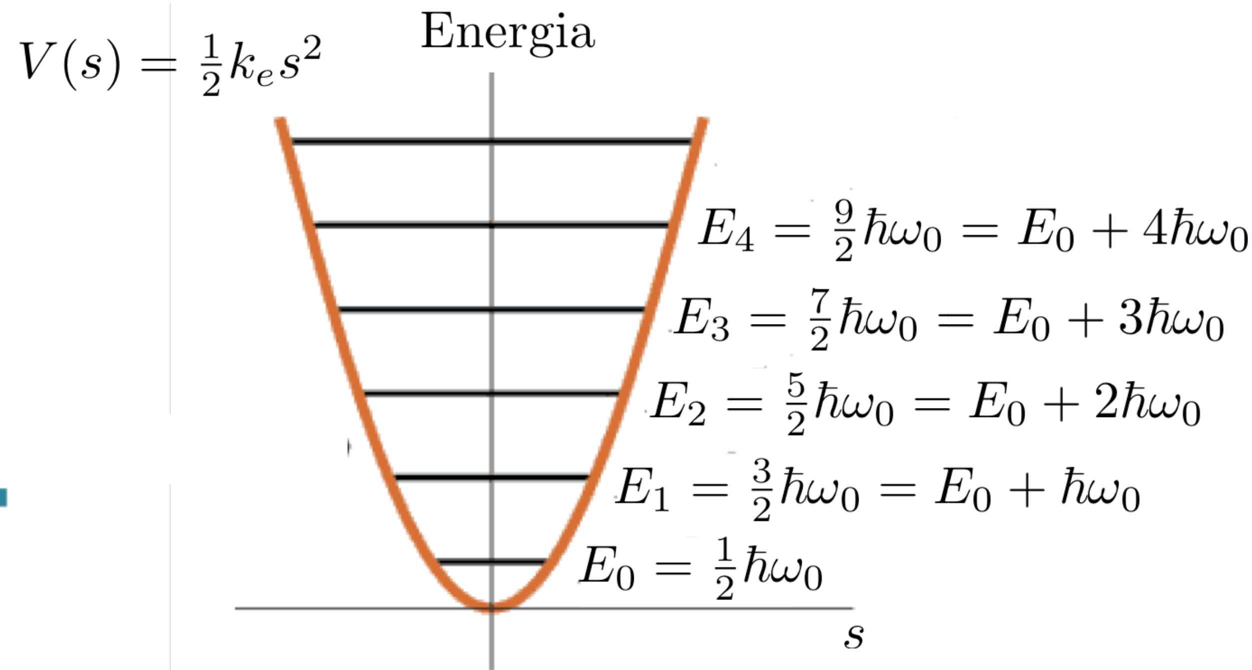
Frequência e Período: $f = \frac{\omega_0}{2\pi} \quad T = \frac{2\pi}{\omega_0}$

Energia Mecânica:

$$E = \tfrac{1}{2}\mu v_s^2 + \tfrac{1}{2}k_e s^2 = \tfrac{1}{2}\mu v_s^2 + \tfrac{1}{2}\mu\omega_0^2 s^2$$

# Quantização da Energia: Oscilador Harmônico Simples




**Níveis de Energia do Oscilador Harmônico Quântico:**

$$\boxed{E_n = \hbar\omega_0(n + \tfrac{1}{2})}$$

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

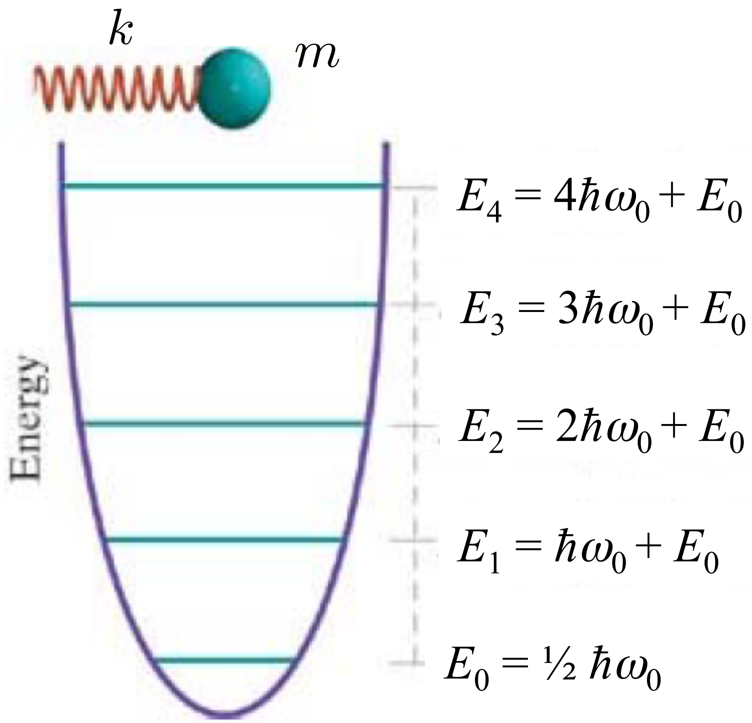
$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \times 10^{-34}\ \text{Js}$$

– Nível de energia mais baixo: $n = 0$, com $E_0 = ½\hbar\omega_0$.

– 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 $m$ = 50g (bolinha leve).

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

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

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

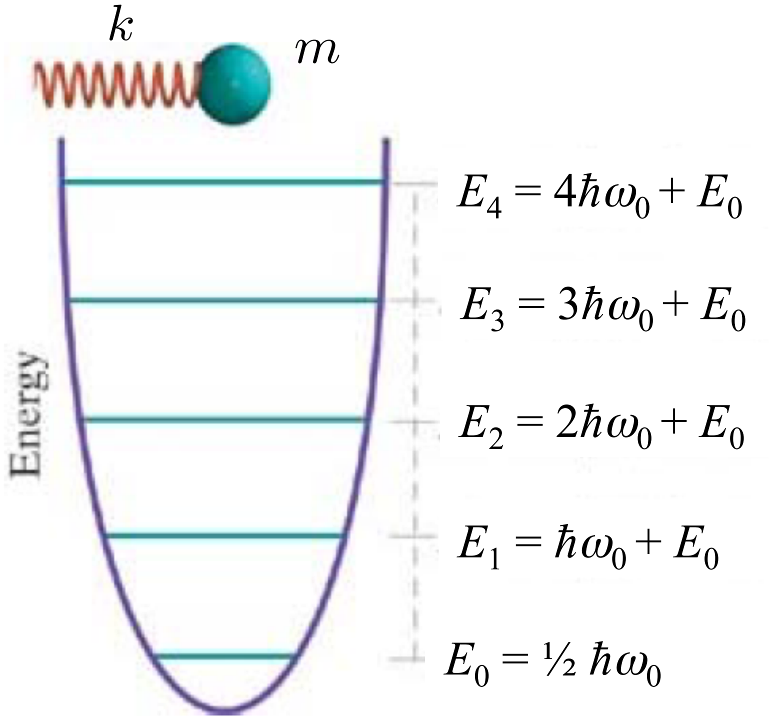
$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k_e}{m}} = 24.5\,\mathrm{rad/s}$$

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

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

(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: $E_{med} = ½\,(E_{n+1} + E_n)$. Utilizando a expressão para os níveis de energia, iremos obter:

$$E_{\mathrm{med}} = \tfrac{1}{2}(E_{n+1} - E_n) \;=\; (n+1)\hbar\omega_0$$

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

Utilizando a energia estimada para o oscilador, $1.5\times10^{-5}$ J, concluiremos que seu nível de energia quântico seria:

$$E_n = \hbar\omega_0(n + \tfrac{1}{2}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow\; n = \frac{E_n}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \;\approx\; 6\times10^{27}$$

$$\frac{\Delta E}{E_{\mathrm{med}}} \;=\; 2\times10^{-28} \lll\; 1$$

(A quantização é imperceptível!)

# Convenções Importantes

– Os níveis de energia são $\varepsilon_n = ½\hbar\omega_0 + n\hbar\omega_0$. A constante $½\hbar\omega_0$, 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*, $E_n = \varepsilon_n - ½\hbar\omega_0$, isto é,

$$\boxed{E_n = n\hbar\omega_0}$$

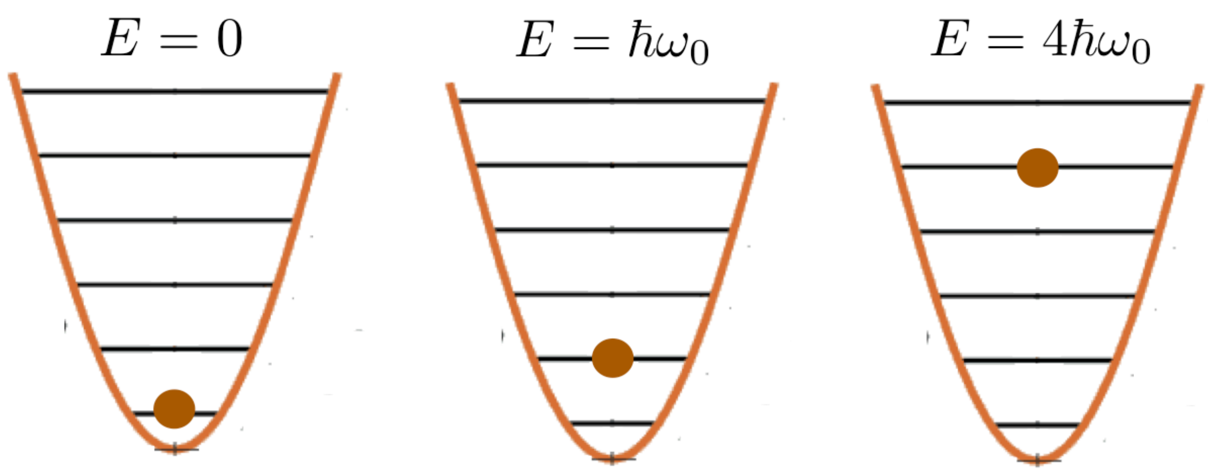
(energias em relação ao nível $\varepsilon_0 = ½\hbar\omega_0$)

– 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.

$$E_0 = 0 \qquad \text{(zero quantum)}$$
$$E_1 = \hbar\omega_0 \qquad \text{(um quantum)}$$
$$E_2 = 2\hbar\omega_0 \qquad \text{(dois quanta)}$$

# Convenções Importantes

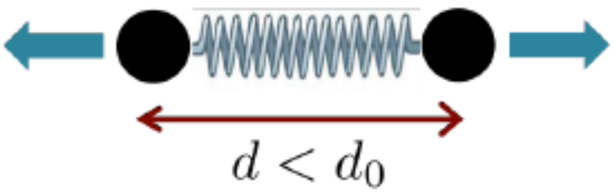
– A energia do oscilador quântico será representada pelo diagrama abaixo, composto pela curva de energia potencial $V(s) = ½ k_e s^2$ (linha laranja), níveis de energia (linhas horizontais), e por um círculo que indica a energia do oscilador (em qual dos níveis o sistema se encontra):



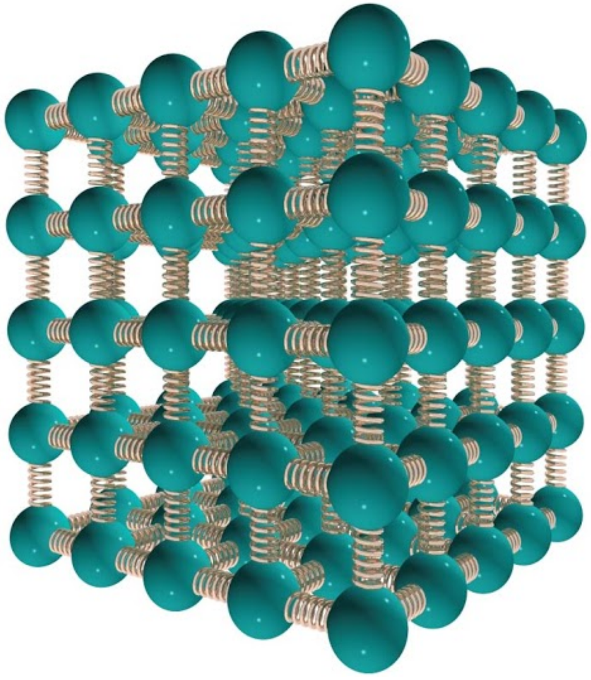

(zero quantum de energia) (um quantum de energia) (quatro quanta de energia)

# Sólido de Einstein

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

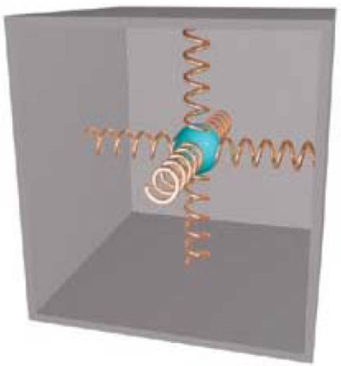



– **Modelo de Sólido**: tipicamente em metais, os átomos vibram em torno de posições médias que formam arranjos regulares. Um exemplo é mostrado na figura ao lado, na qual as posições médias dos átomos recaem sobre arestas de cubos (representação de esferas e molas):



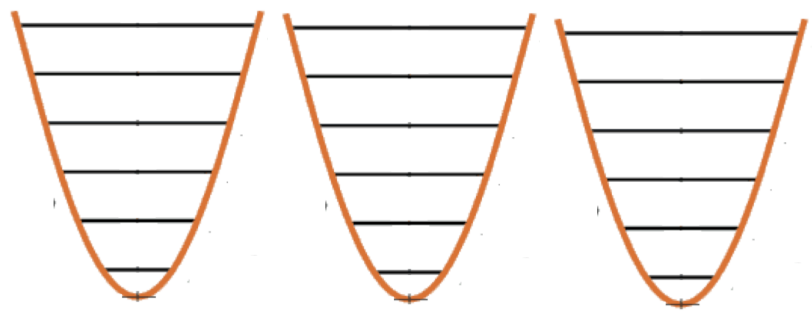
# Sólido de Einstein

– 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*.



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

– Representação de um átomo no Sólido de Einstein:



$$\begin{aligned} E &= n_x\hbar\omega_0 + n_y\hbar\omega_0 + n_z\hbar\omega_0 \\ &= \underbrace{(n_x + n_y + n_z)}\hbar\omega_0 = \underbrace{N}\hbar\omega_0 \end{aligned}$$

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

*N* é o número de quanta de energia do átomo