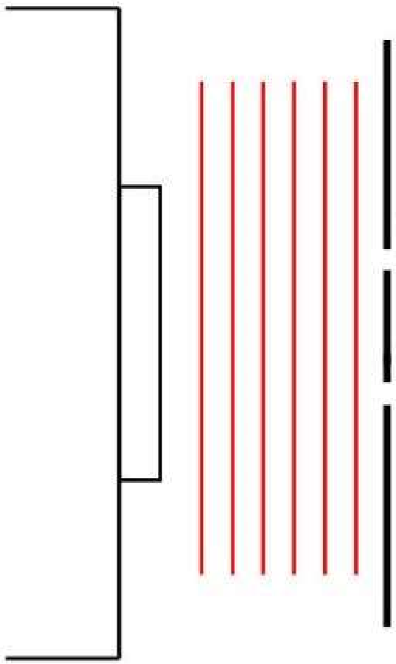
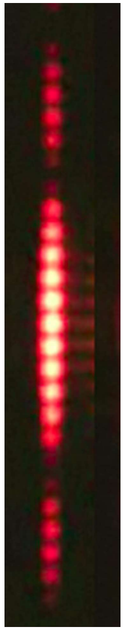
Amplitudes de Probabilidade





Dualidade ondulatória / corpuscular

Erwin Schrödinger desenvolveu uma teoria que descreve as amplitudes de probabilidade dos objetos quânticos $\psi(\vec{r})$

A probabilidade de detetar uma partícula numa dada posição é dado por $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$

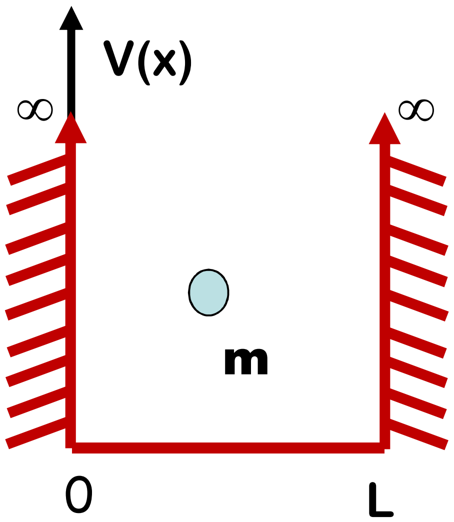
Amplitude de probabilidade

Em geral é necessário resolver a equação de Schrödinger para determinar níveis energético dos sistema quânticos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

(Fisica Quântica I
2º semestre 2º ano)

- Uma exceção é o caso dos níveis energéticos principais do átomo de hidrogénio (modelo de Bohr)
- Uma outra exceção é o caso do “poço infinito”



Uma partícula de massa m, frequentemente um eletrão, é confinado num poço potencial infinito com uma largura L

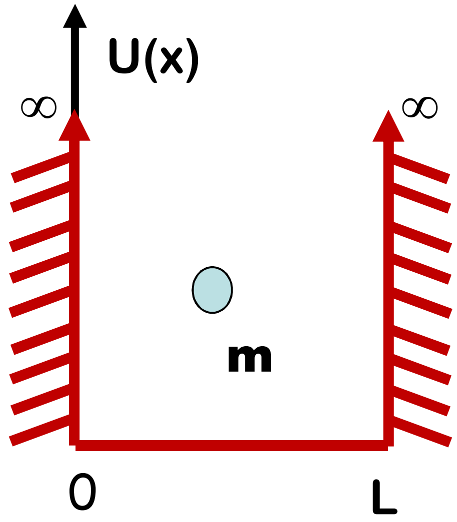
Problema modelo
Pode ser usado para estimar energias “de confinamento”
estruturas semicondutores
moléculas

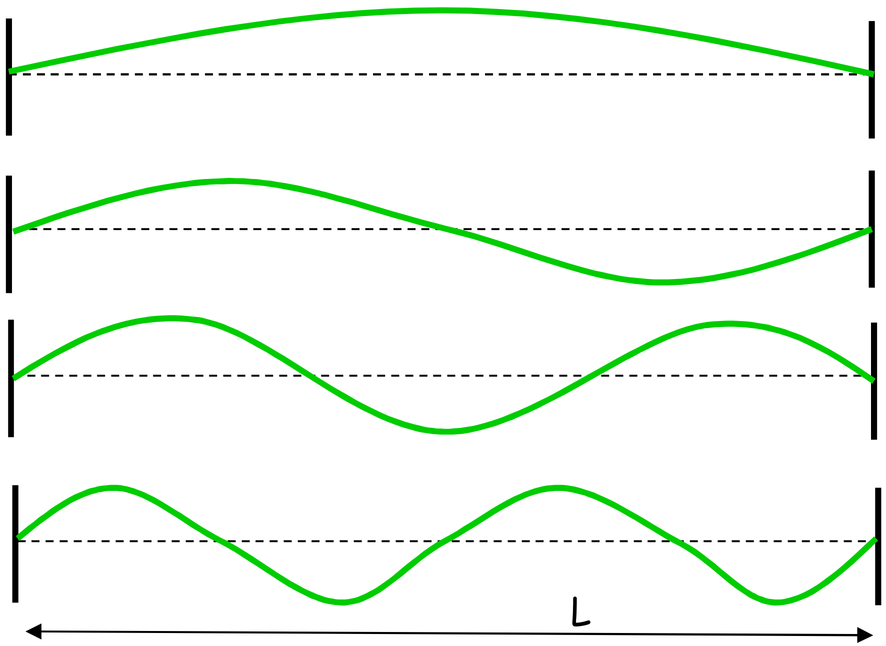
Uma partícula num poço infinito

Entre x = 0 e x = L a partícula é livre só tem energia cinética

A probabilidade encontrar a partícula nas regiões
x < 0 ou x > L é nula (requeria uma energia infinito)

As posições x= 0 ou x=L tem ser nós na amplitude da probabilidade (equivalente a uma corda numa guitarra)





$$n\frac{\lambda}{2} = L \qquad \lambda = \frac{2L}{n}$$

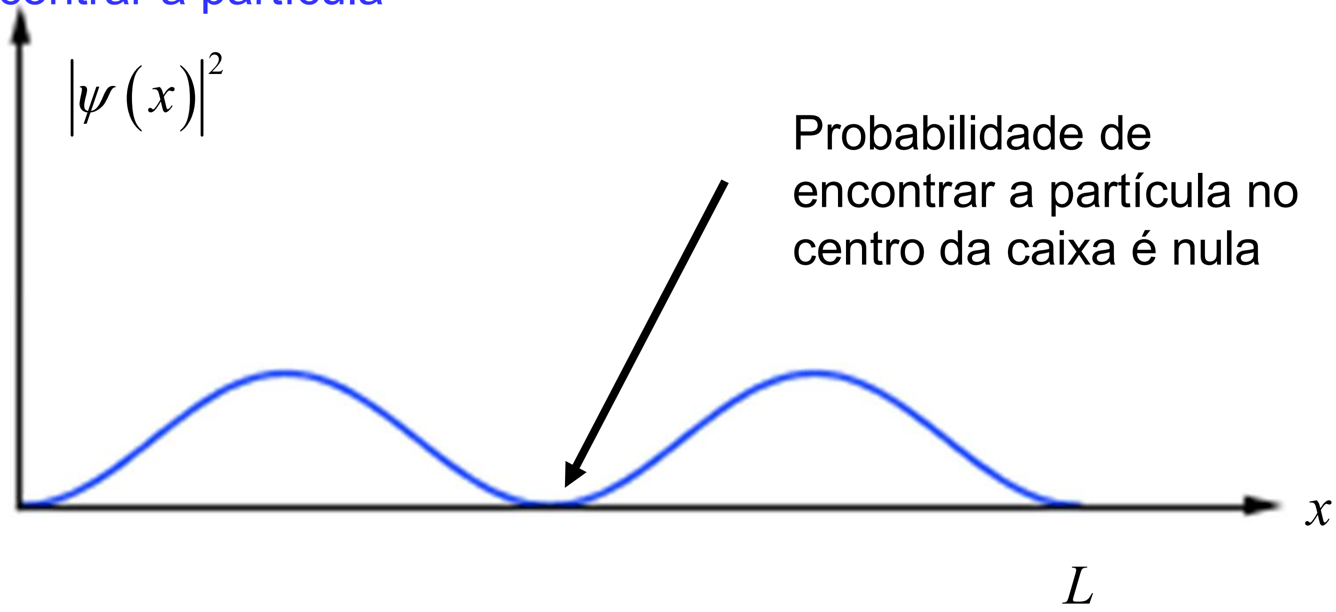
$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2L}$$

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 \qquad n = 1, 2, 3\ldots$$

Quanto menor λ (mais nós), maior a energia cinética

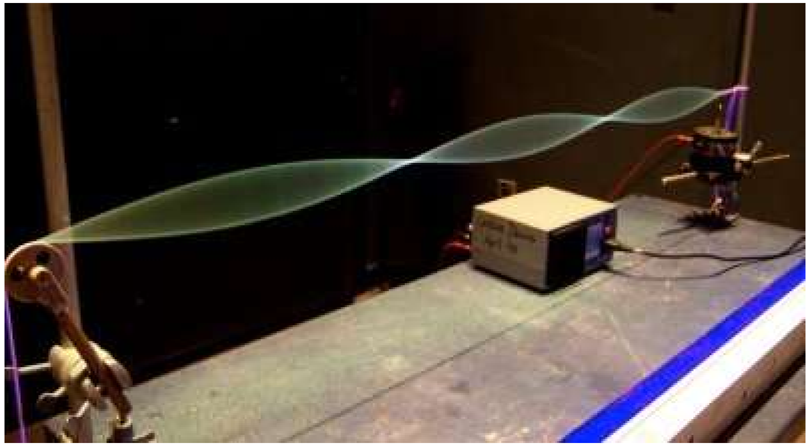
Como é que a partícula salta dum lado ao outro ?

Probabilidade de
encontrar a partícula



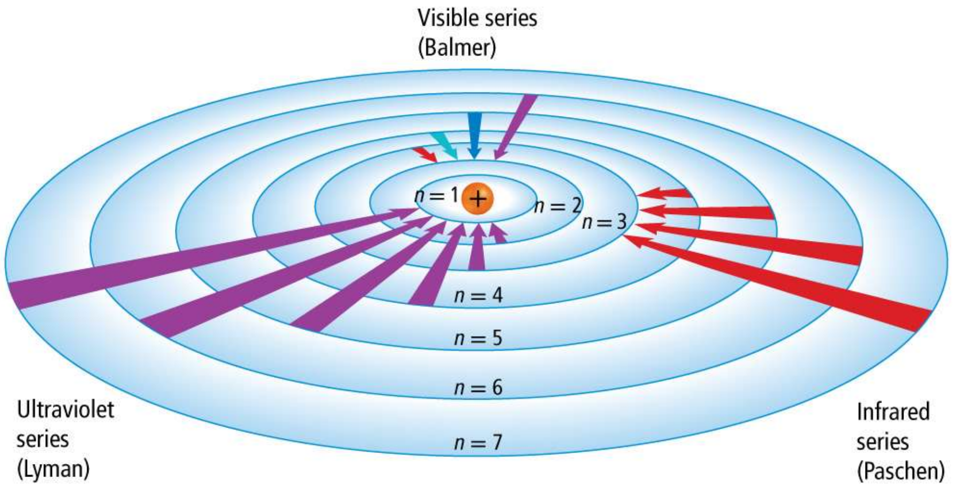
Probabilidade de
encontrar a partícula no
centro da caixa é nula

É um caso de interferência destrutiva
(entre uma onda que se propaga á direita
e outra que se propaga á esquerda)



Modelo de Bohr para H

Niels Bohr
1885-1962
Nobel 1922



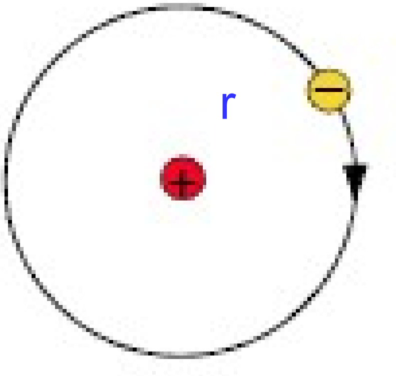
- Eletrão apenas pode estar encontrado em certas “orbitas” circulares (estados estacionários)
- O momento angular nestas orbitas está quantizada em unidades de $h/2\pi$
- Ao transitar duma orbita superior á uma orbita inferior o eletrão liberta energia (linhas espetrais)

$$r = \frac{n^2}{Z} a_B \qquad a_B \equiv \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 53\,pm$$

$$E_n^H = -\tfrac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_B}\right)\frac{1}{n^2} \approx -\frac{13.6eV}{n^2}$$

O modelo de Bohr

O modelo de Bohr é uma mistura de conceitos clássicos e quânticos.

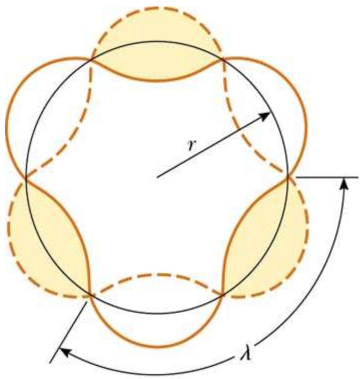


Condição de quântização do momento angular

$$m\mathrm{v}_n r_n = n\hbar \qquad p = m\mathrm{v}_n = \frac{n\hbar}{r_n}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

No modelo de Bohr $\Delta r \to 0$



Mesmo ao invocar o comprimento de deBroglie

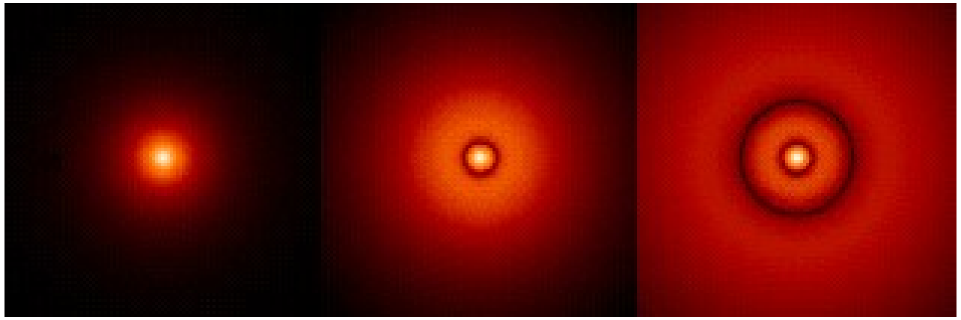
$$\Delta r \approx \lambda \approx \frac{h}{p} \qquad \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta r} \approx \frac{p}{4\pi}$$

Orbitais em átomos de H

Em vezes de orbitais bem definidos, a resolução da equação do Schrödinger resulta em amplitudes de probabilidade, ψ (como ondas)

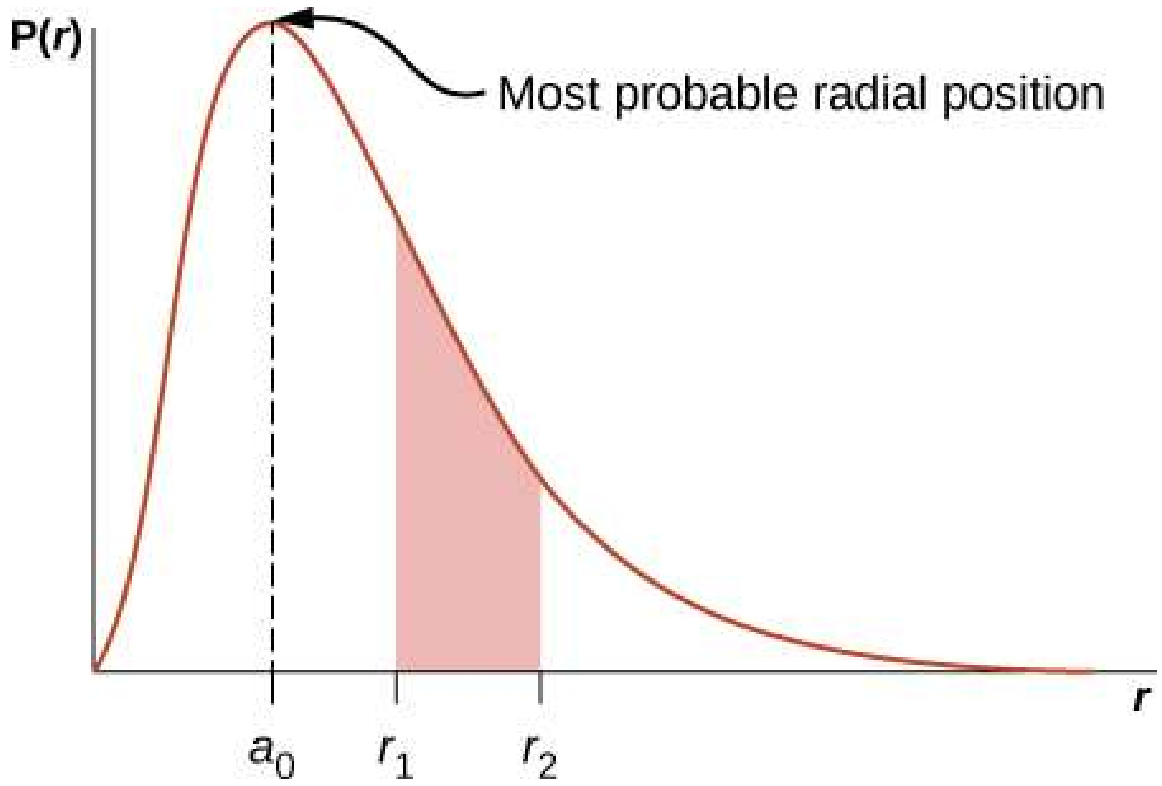
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\left(\vec{r},t\right)\right]\psi\left(\vec{r}\right) = E\psi\left(\vec{r}\right)$$

A probabilidade de encontrar o eletrão numa certa posição é dado pelo $\left|\psi\left(\vec{r}\right)\right|^2$

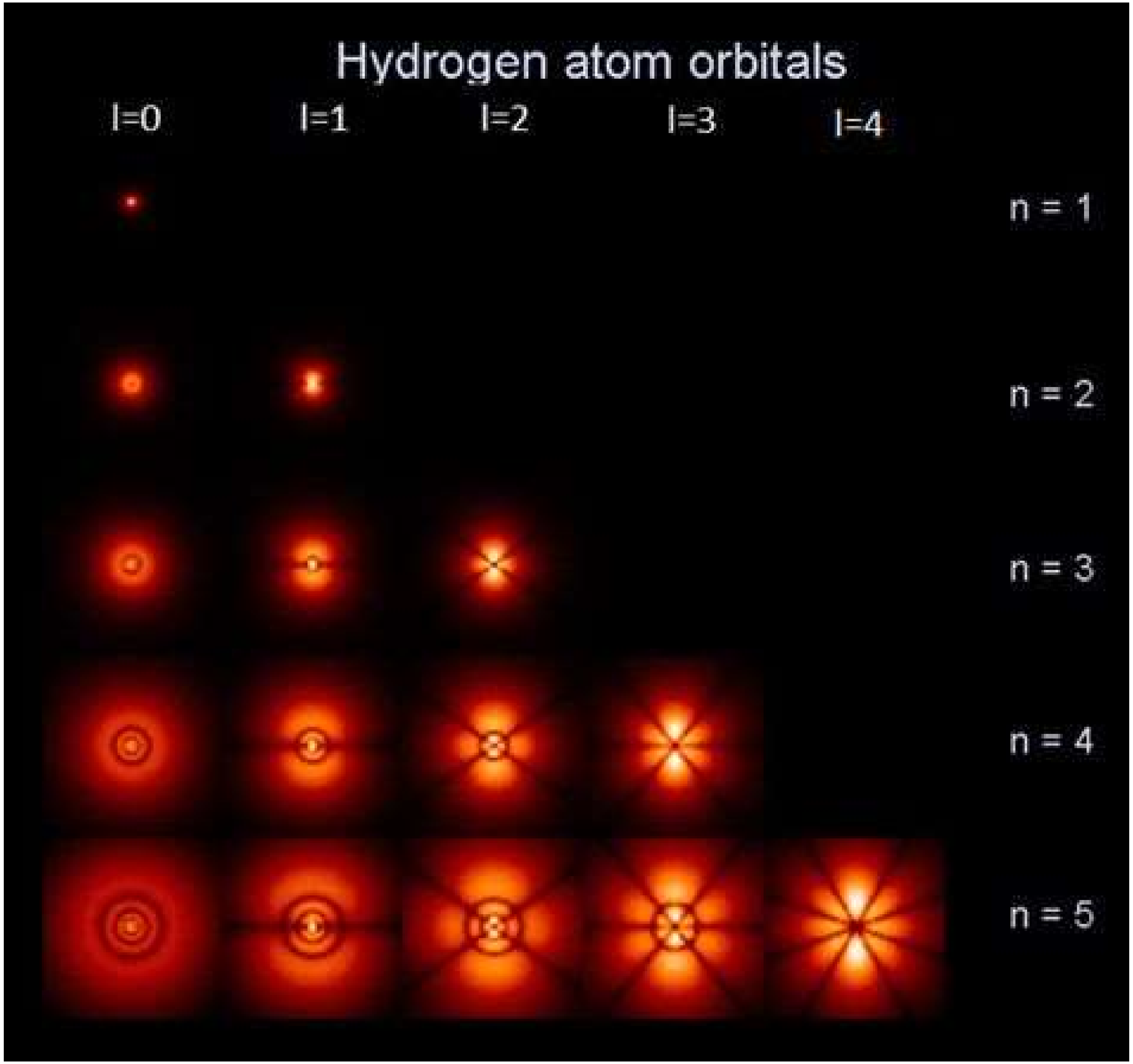


- O modelo de Bohr prevê corretamente os níveis energéticos principais dos átomos com apenas 1 eletrão
- A escala das orbitais atómicas também está mais ou menos certa
- Mais a equação de Schrödinger prevê distribuições de probabilidade de encontrar o eletrão bem diferentes dos que as orbitas circulares.
- Também a quantização de momento angular acontece numa maneira diferente.

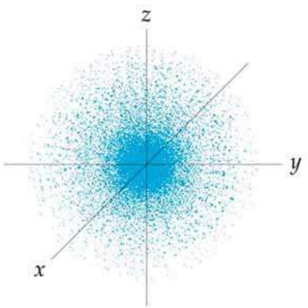
Estado fundamental

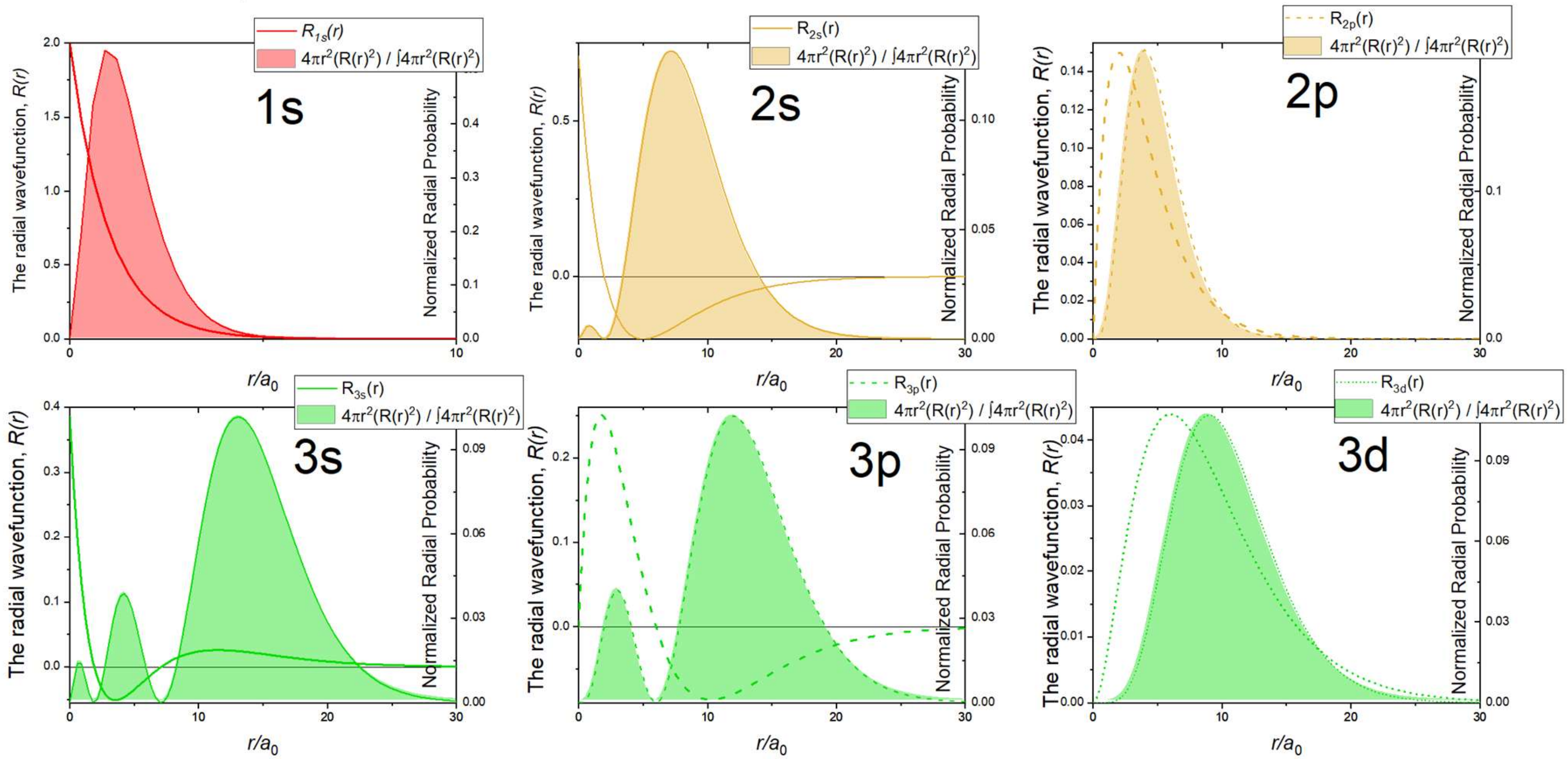


Alguns membros da familia



Alguma distribuições de probabilidade radial

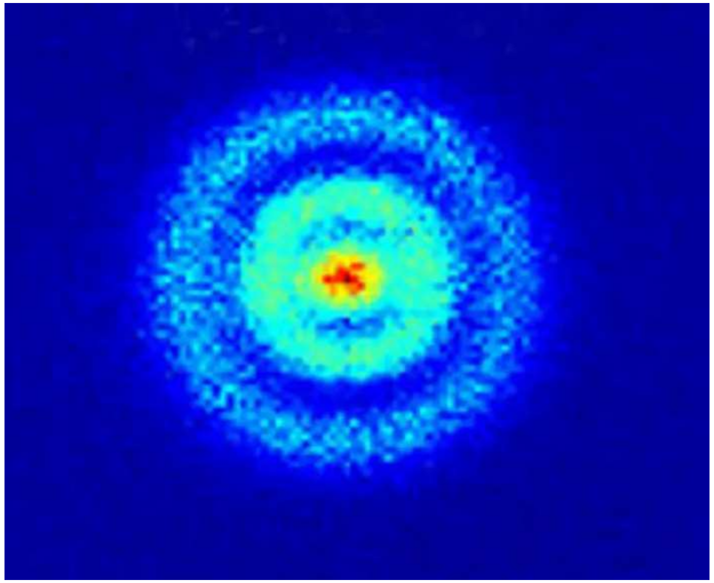




Selected for a Viewpoint in *Physics*
PRL **110,** 213001 (2013) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 24 MAY 2013

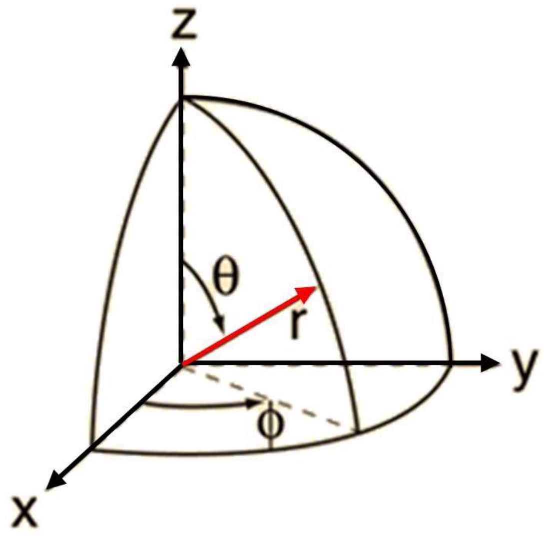
Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States

A. S. Stodolna,[1,*] A. Rouzée,[1,2] F. Lépine,[3] S. Cohen,[4] F. Robicheaux,[5]
A. Gijsbertsen,[1] J. H. Jungmann,[1] C. Bordas,[3] and M. J. J. Vrakking[1,2,*]
[1]*FOM Institute AMOLF, Science Park 104, 1098 XG Amsterdam, Netherlands*
[2]*Max-Born-Institut, Max Born Straße 2A, D-12489 Berlin, Germany*
[3]*Institut Lumière Matière, Université Lyon 1, CNRS, UMR 5306, 10 Rue Ada Byron, 69622 Villeurbanne Cedex, France*
[4]*Atomic and Molecular Physics Laboratory, Physics Department, University of Ioannina, 45110 Ioannina, Greece*
[5]*Department of Physics, Auburn University, Auburn, Alabama 36849, USA*
(Received 18 January 2013; revised manuscript received 13 March 2013; published 20 May 2013)



Quais são estas etiquetas?

O átomo de hidrogénio é um sistema 3 dimensional com uma simetria esférica



Coordenados esféricos r, θ, ϕ

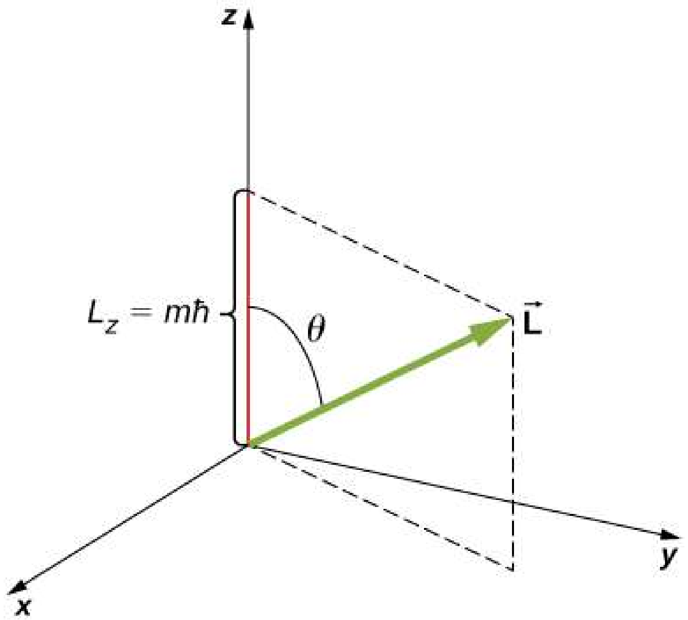
Na descrição quântica dos orbitais de hidrogénio existe 3 números quânticos

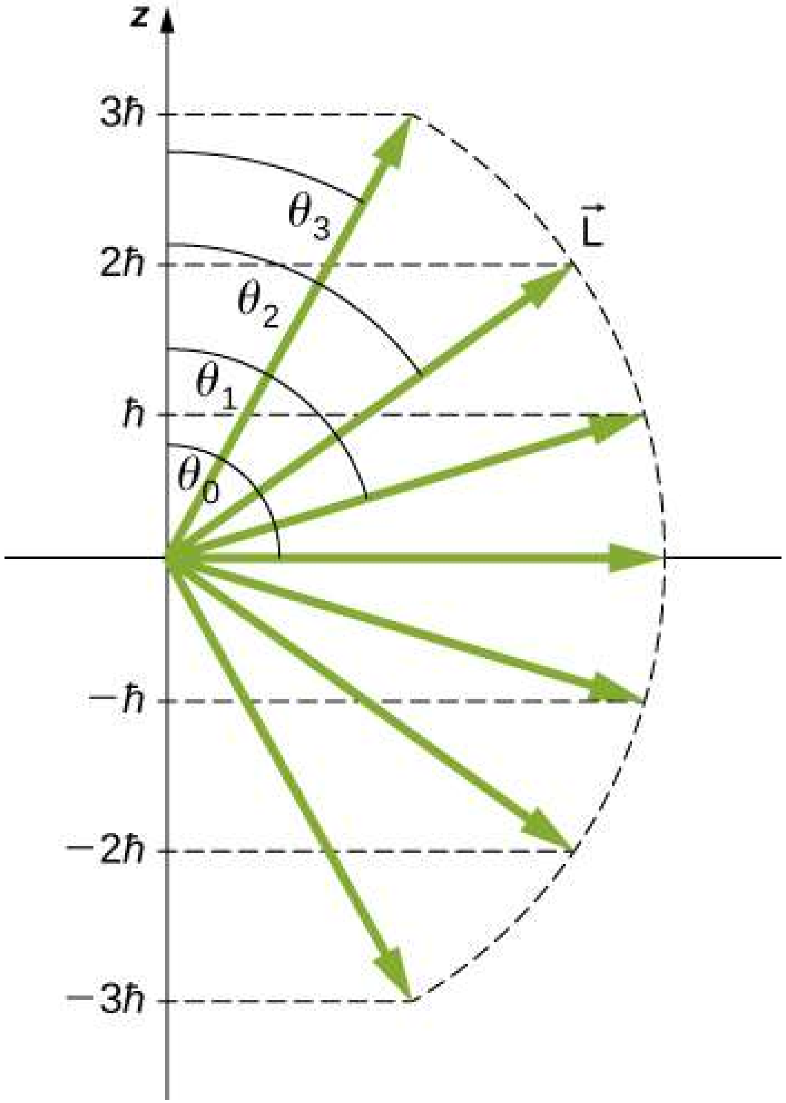
- n : o número principal (1,2,3…)
  Determine os níveis energéticos
  Distância radial em média de eletrão do núcleo

- L: o momento angular orbital (0,1,…n-1)
  L=0 - orbital s esfericamente simétrica
  L=1 orbital p
  L=2 orbital d
  L=3 orbital f

- m_L : a projeção do momento angular no eixos dos zz
  m_L : (-L, -L+1,…,1,0,1,…L-1,L)
  Em total são 2L+1 valores possíveis

O momento angular é quantizada

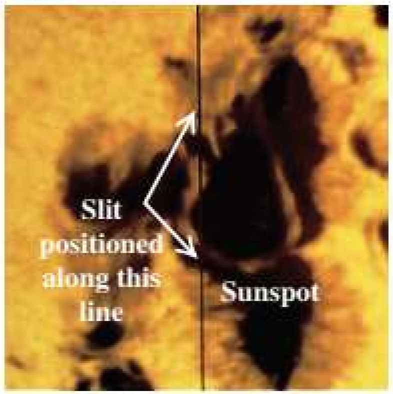




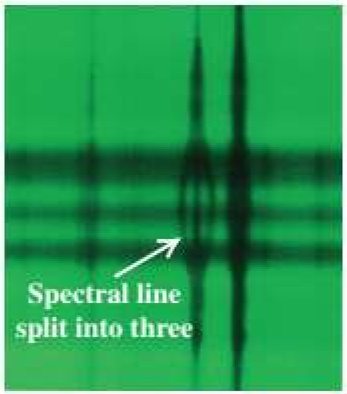
A projeção do momento angular orbital no eixo dos zzs assuma valores inteiros do constante de Planck $\hbar$

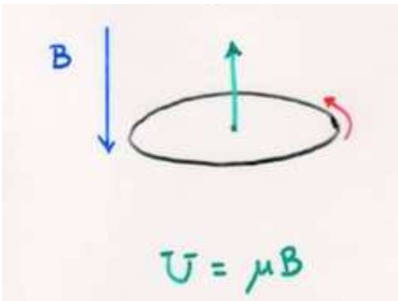
Evidência para a quantização do momento angular

(a)

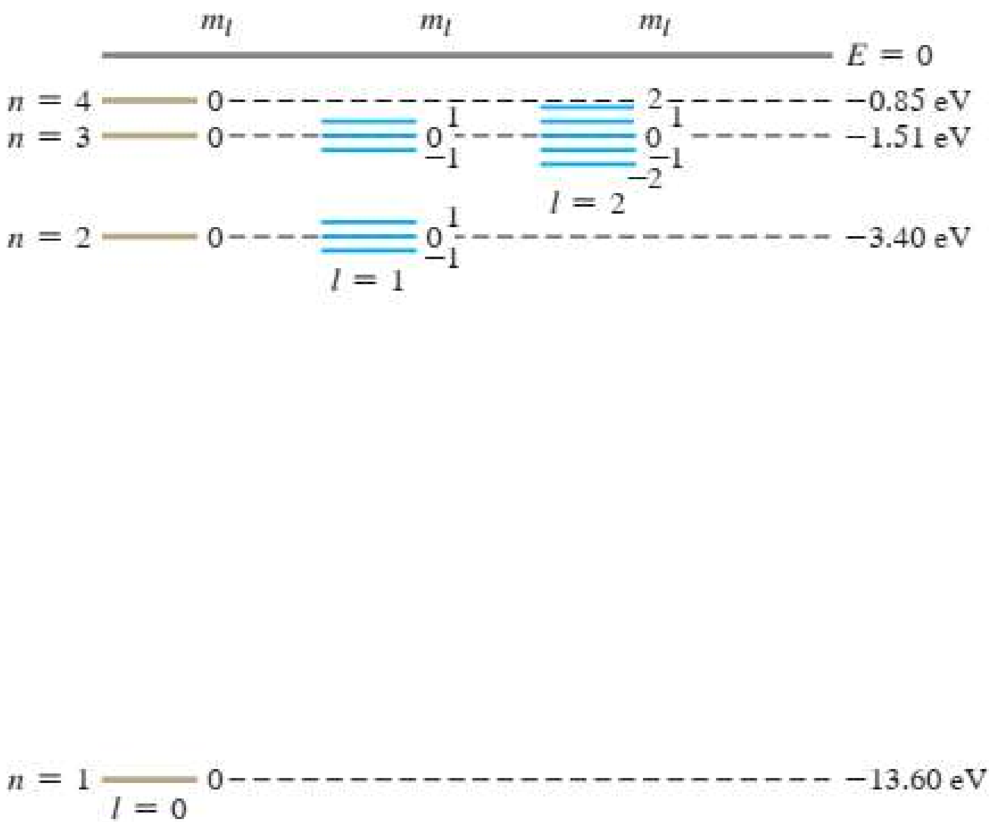


(b)





Espetro duma mancha solar onde existe campo magnéticos fortes

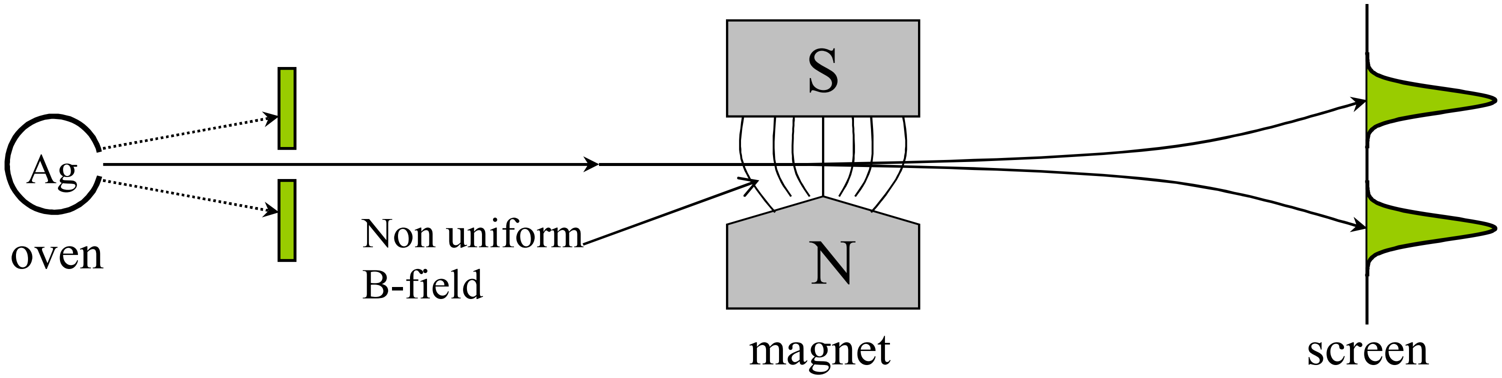


O campo magnético forte desdobra os níveis energéticos.

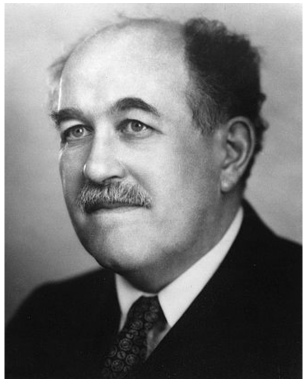
O momento magnético do eletrão é proporcional ao seu valor m

Experiência Stern Gerlach (1922)

Resultado inesperado
Momento angular orbital é sempre inteiro L
Numero de projeções no eixo do campo (2L+1) que é sempre impar

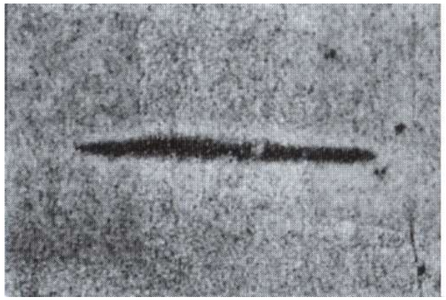


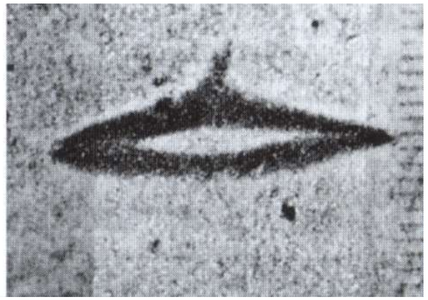
Porque apenas 2 manchas?



Otto Stern
(1888 -1969)
Nobel 1943

Walter Gerlach
(1889 -1979)
Nobel 1943



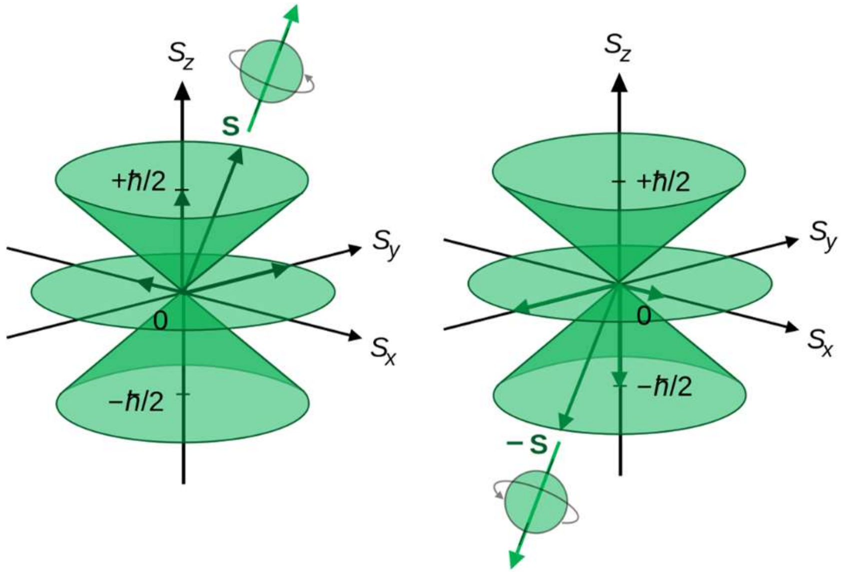


Spin o 4º número quântico

Wolfgang Pauli
1900-1958
Nobel 1945

Momento angular intrínseco com apenas 2 projeções

$$S_Z = \pm\frac{1}{2}\hbar$$



Principio de exclusão: partículas com um spin intrínseco igual á ½ $\hbar$ nunca são encontrados no mesmo estado quântico. È o resultado dum efeito de interferência

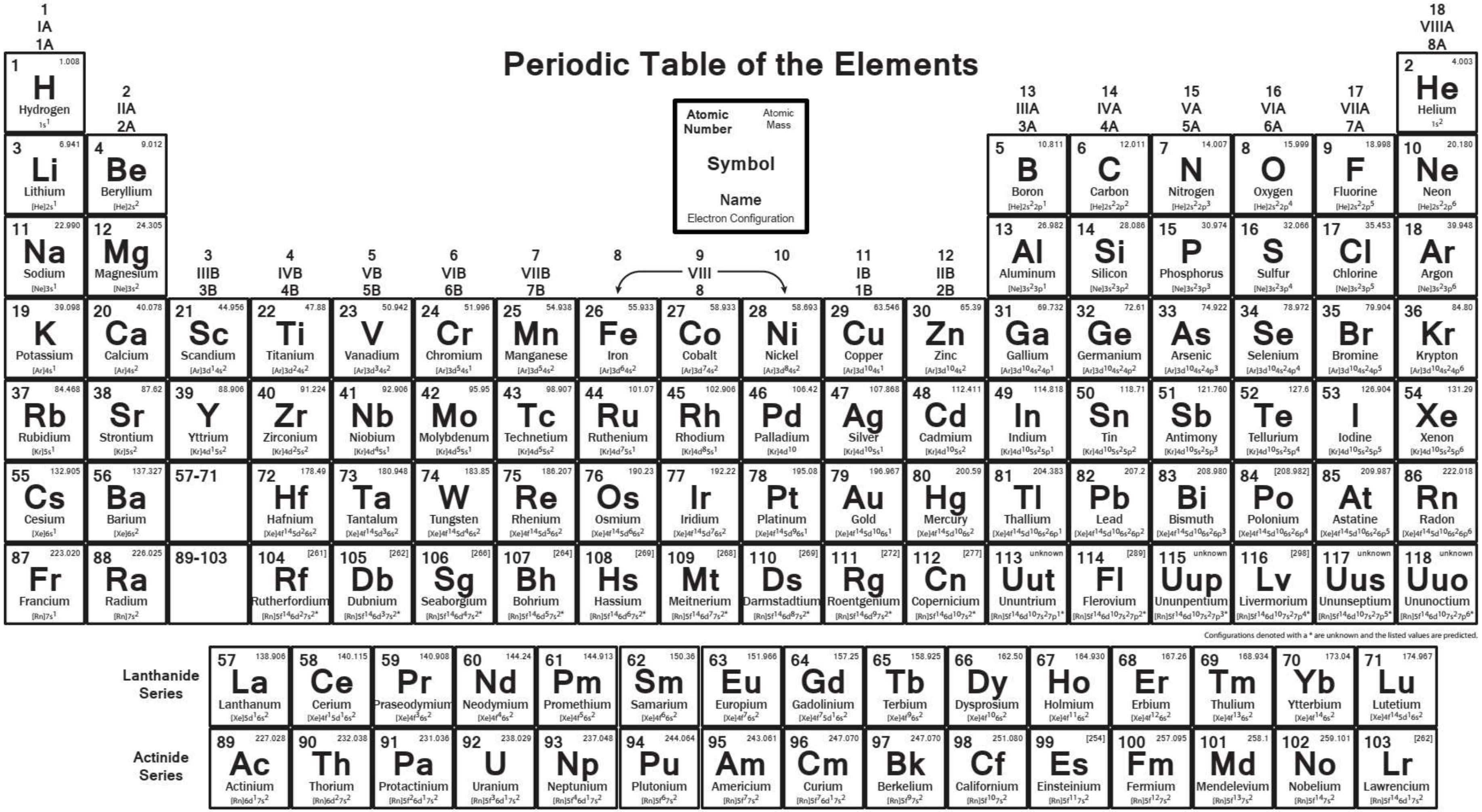
Estrutura da tabela Periódica

Atom	1s	2s	2p			Electron configuration
Li	↑↓	↑				$1s^2 2s^1$
Be	↑↓	↑↓				$1s^2 2s^2$
B	↑↓	↑↓	↑			$1s^2 2s^2 2p^1$
C	↑↓	↑↓	↑	↑		$1s^2 2s^2 2p^2$
N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$1s^2 2s^2 2p^5$
N	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	$1s^2 2s^2 2p^6$

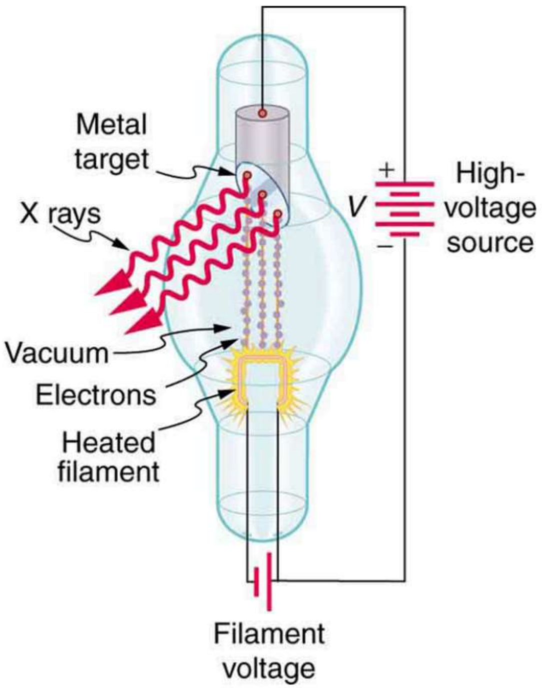
$n = 1,2,3,\ldots$
$L = 0,1,\ldots n-1$
$m_L = -L,\ldots;L$
$Sz = \uparrow, \downarrow$

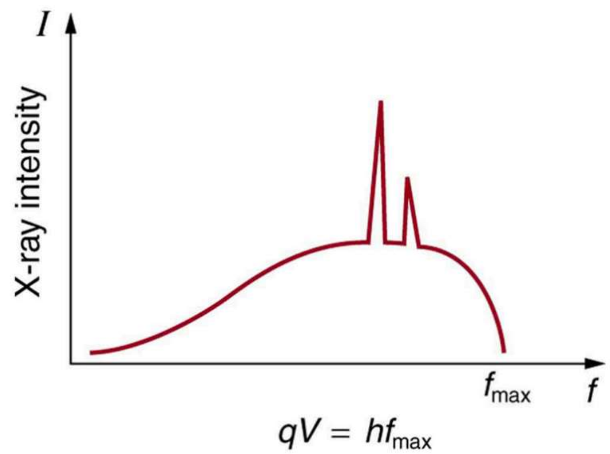
$L = 0 \quad s \quad m_L = 0$
$L = 1 \quad p \quad m_L = -1,0,1$

Tabela Periódica

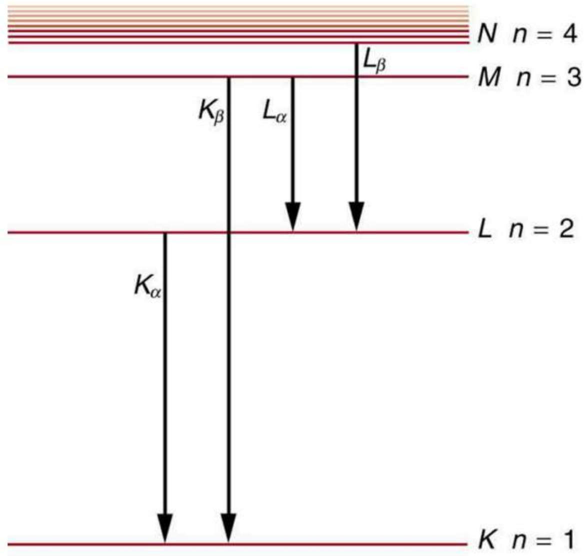


Produção de Raios X





Picos no espetro corresponde a energia libertada por um eletrão excitado que transita para um nível inferior



Se Tungsténio (Z=74) fosse ionizado ate haver apenas 1 eletrão, o modelo de Bohr dá para as energias

$$E_n^Z = -\frac{Z^2}{n^2}(13.6eV)$$

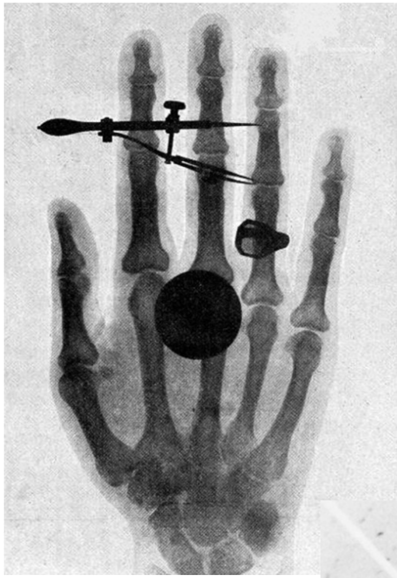
$$E_2^{Z=74} \approx -17.6keV$$

$$E_1^{Z=74} \approx -70.5keV$$

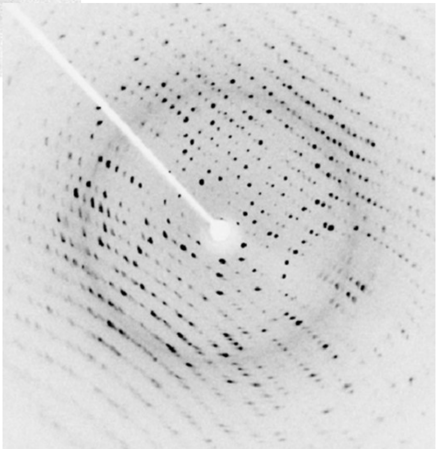
$$\Delta E \approx 53keV \quad \lambda \approx 20\,pm$$

Aplicações de Raios X

A radiação dos raios X passam facilmente através materiais com átomos leves (H,C,N,O), mas são absorvidos pelas materiais feitos dos átomos mais pesados



Mão de Sra. Röentgen



Padrão de difração – estrutura cristalina proteína