Principio de Incerteza

W. Heisenberg
Nobel 1932

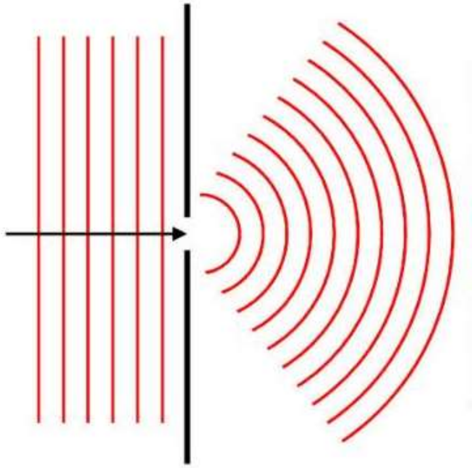
Uma consequência do comprimento de onda de Broglie

É impossível determinar simultaneamente
a posição e o momento linear duma partícula
até uma precisão arbitrária

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

$$\hbar = h / 2\pi$$

$$\hbar = 1.0545718x10^{-34}\,Js$$



Louis de Broglie
1892-1987
Nobel 1929

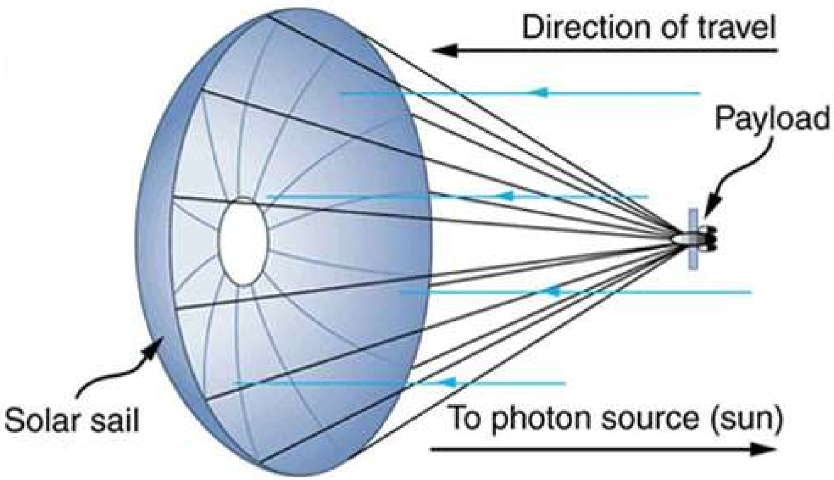
Se a luz comporta como partículas com
uma energia $E = hf$ $$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

e um momento $p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$

Então talvez partículas com um momento p,
podem se comportar como ondas com um
comprimento de onda

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$$

Aplicação Velas Espaciais



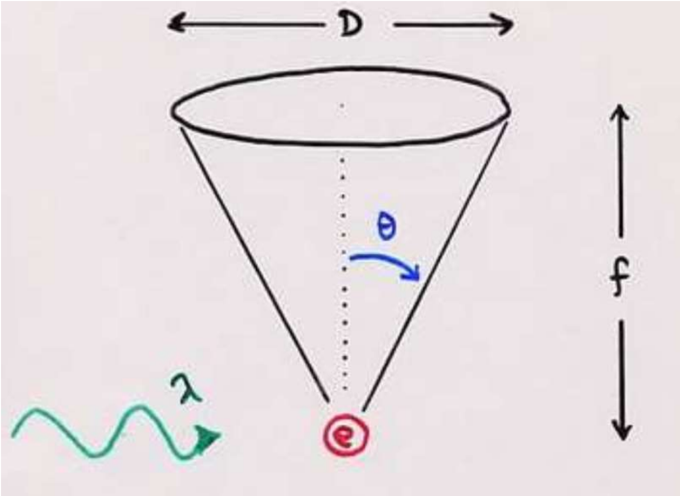
(a)

(b)

(a) Space sails have been proposed that use the momentum of sunlight reflecting from gigantic low-mass sails to propel spacecraft about the solar system. A Russian test model of this (the Cosmos 1) was launched in 2005, but did not make it into orbit due to a rocket failure.

(b) A U.S. version of this, labeled LightSail-1, is scheduled for trial launches in the first part of this decade. It will have a 40-m2 sail. (credit: Kim Newton/NASA)

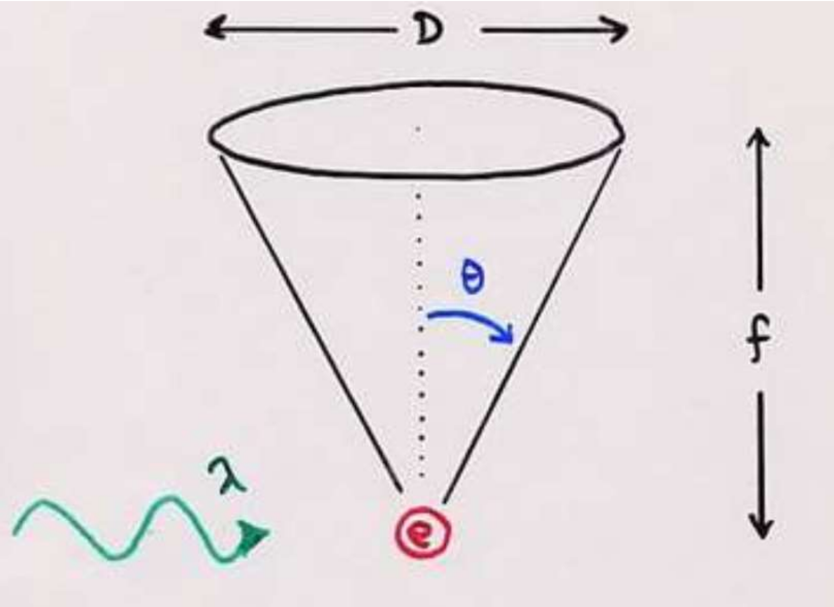
Principio de Incerteza do Heisenberg

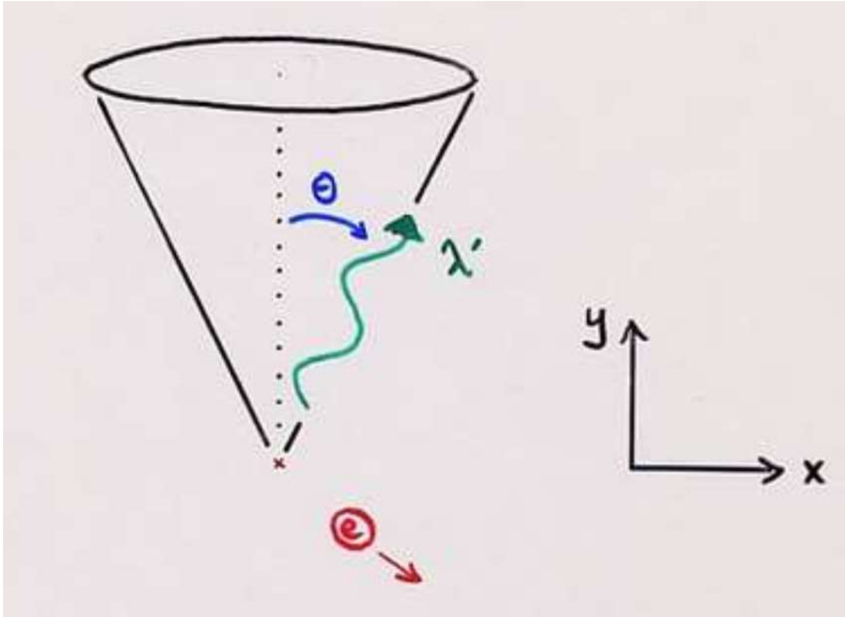


Werner Heisenberg
1901-1976
Nobel 1932

Imagine que tentamos “observar” a posição dum eletrão através a dispersão dum único fotão

O microscópio de Heisenberg





Colisão do fotão com o eletrão → o eletrão ganha um momento linear
Consideremos apenas os componentes ao longo o eixo horizontal.
Aqui temos a situação quando o eletrão adquira o menor momento linear.

Antes da colisão

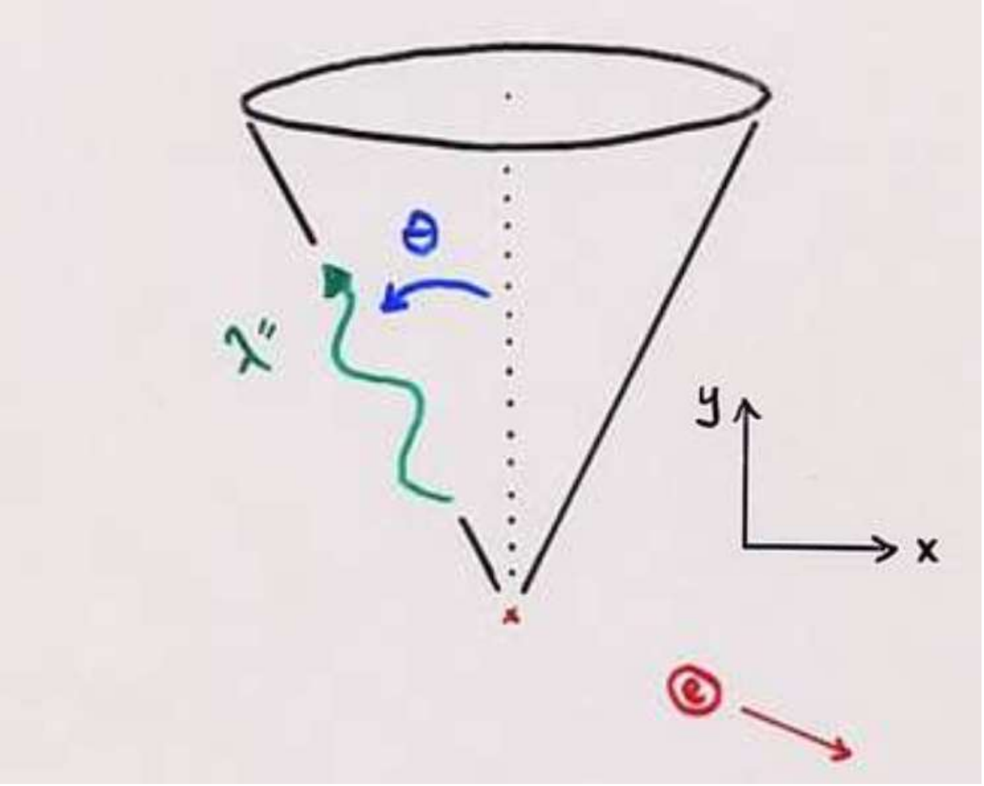
$$p_x^{fotão} = \frac{h}{\lambda} \qquad p_x^{e-} = 0$$

Depois da colisão

$$p_x^{fotão} = \frac{h}{\lambda'}\sin\theta \qquad p_x^{e-} = m_e v_x^{e-}$$

$$\left(p_x^{e-}\right)_{\min} = \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\sin\theta$$

Transferência máxima do momento linear



Antes da colisão

$$p_x^{fotão} = \frac{h}{\lambda} \qquad p_x^{e-} = 0$$

Depois da colisão

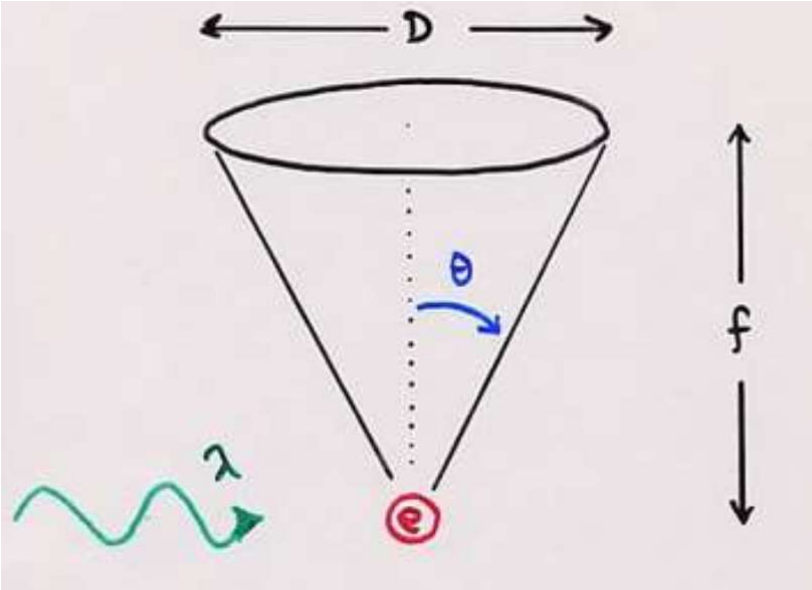
$$p_x^{fotão} = -\frac{h}{\lambda''}\sin\theta \qquad p_x^{e-} = m_e \mathrm{v}_x^{e-}$$

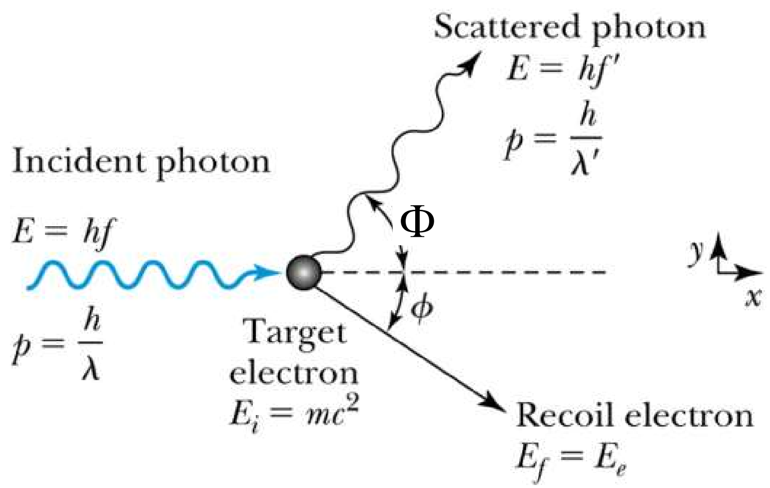
$$\left(p_x^{e-}\right)_{\max} = \frac{h}{\lambda} + \frac{h}{\lambda''}\sin\theta$$

$$\left(p_x^{e-}\right)_{\min} = \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\sin\theta$$

$$\Delta p_x^{e-} = \left(p_x^{e-}\right)_{\max} - \left(p_x^{e-}\right)_{\min} = \frac{h}{\lambda''}\sin\theta + \frac{h}{\lambda'}\sin\theta$$

Microscópio do Heisenberg





Expressão do Compton

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}[1 - \cos\Phi]$$

Se $\theta << 1$ $\qquad \sin\theta \approx \tan\theta = \frac{D}{2f}$

$$\Phi \approx \pi/2 \qquad \frac{h}{mc} = 0.0024nm$$

$$\Delta p_x^{e-} = \left(p_x^{e-}\right)_{\max} - \left(p_x^{e-}\right)_{\min} = \frac{h}{\lambda''}\sin\theta + \frac{h}{\lambda'}\sin\theta$$

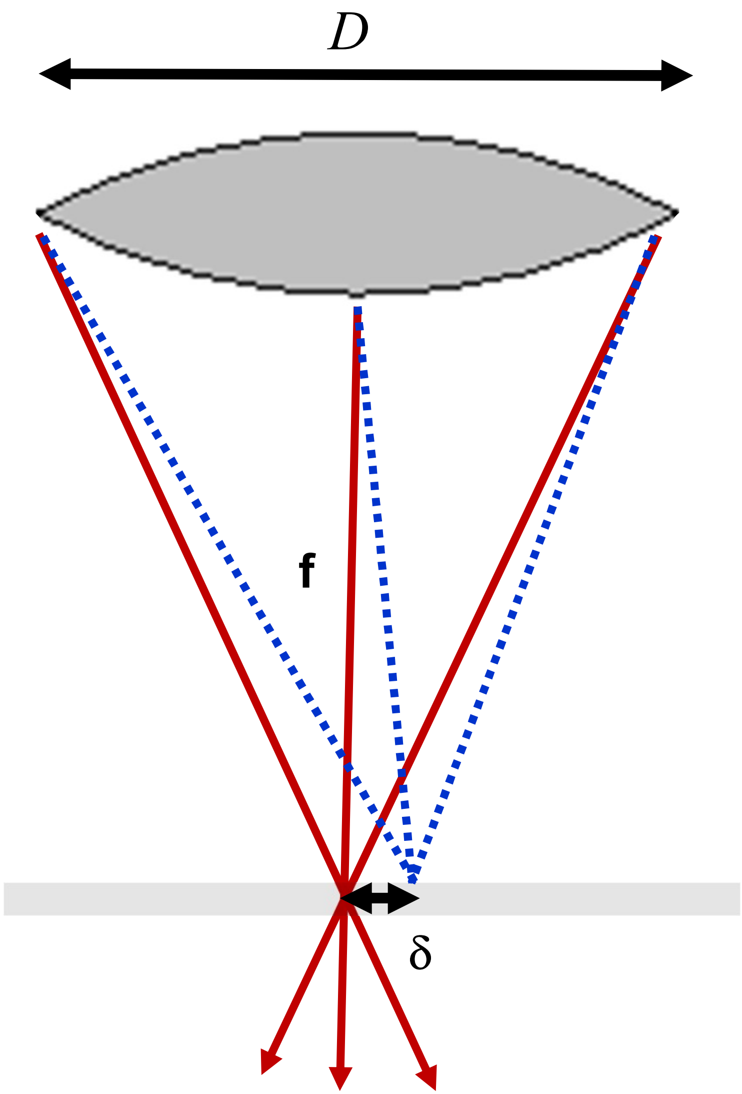
Luz visível λ: 400nm – 750nm

$$\lambda' \approx \lambda \approx \lambda''$$

Variação no momento do eletrão $\Delta p_x^{e-} \approx \frac{h}{\lambda}\frac{D}{f}$

Microscópio do Heisenberg

Na aula anterior vimos que a resolução dum microscópio é aproximadamente



Interferência destrutiva quando

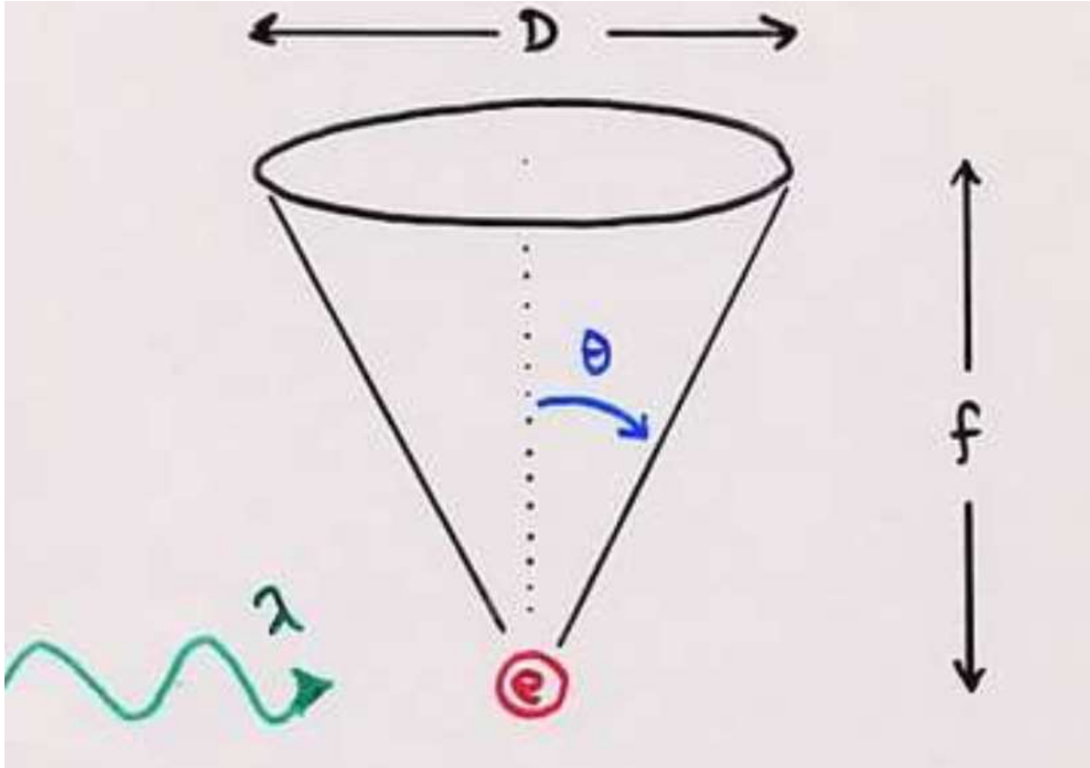
$$y_{escuro} = D\sin\theta = \frac{m\lambda D}{a} \quad a \to D; D \to f$$

$$\delta \approx \lambda \frac{f}{D}$$

Logo a incerteza na posição do eletrão seria

$$\Delta x^{e-} \approx \lambda \frac{f}{D}$$

Principio de Incerteza de Heisenberg



Se definimos

$$\Delta x = \sqrt{\left\langle \left(x - \overline{x} \right)^2 \right\rangle}$$

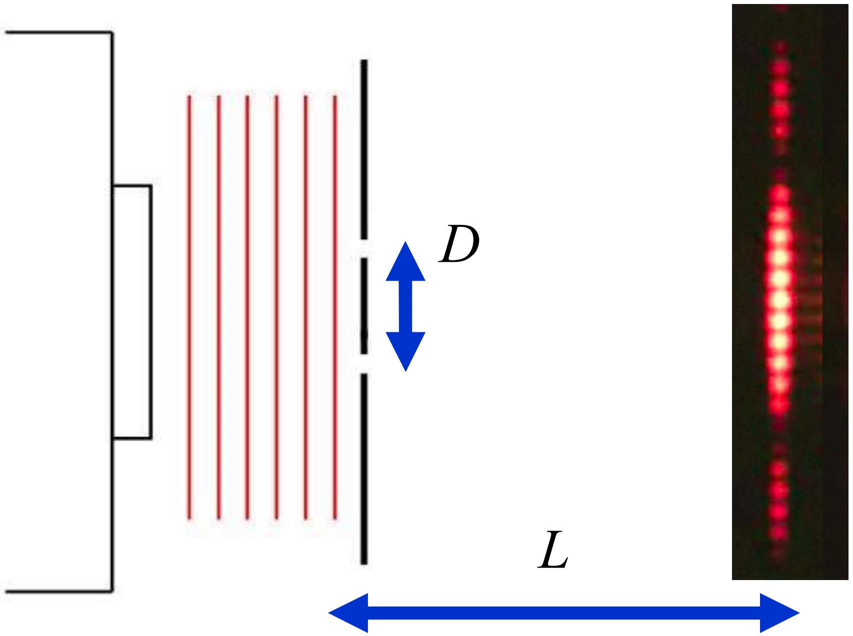
$$\Delta p_x = \sqrt{\left\langle \left(p_x - \overline{p}_x \right)^2 \right\rangle}$$

$$\Delta x^{e-} \approx \lambda \frac{f}{D} \qquad \Delta p_x^{e-} \approx \frac{h}{\lambda} \frac{D}{f} \qquad \Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x^{e-} \Delta p_x^{e-} \approx h$$

Maior precisão em x (por exemplo usar λ menor) provoca maior incerteza no p_x

Experiência Dupla fenda revista



Distância entre franjas

$$\approx \frac{\lambda L}{D}$$

Usar um "microscópio de Heisenberg" para observar os eletrões provoca uma incerteza no momento linear vertical

$$\Delta p_y \approx \frac{h}{\Delta y} \geq \frac{2h}{D}$$

No limite em p <<mc

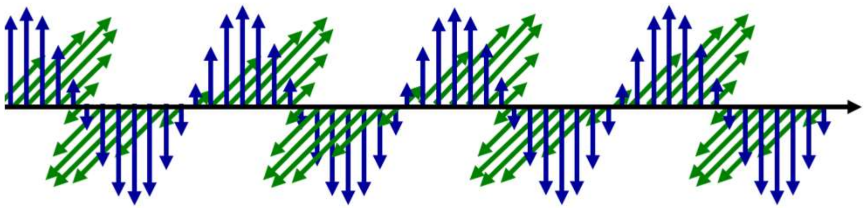
Tempo chegar ao alvo $t_{voo} = \frac{L}{\mathrm{v}_x^{e-}} \approx \frac{mL}{p} = \frac{mL\lambda}{h}$

Variação na posição do alvo devido incerteza no momento vertical

$$\Delta y_{alvo} = \frac{\Delta p_y}{m} t_{voo} \approx \frac{\Delta p_y \lambda L}{h} = 2\frac{\lambda L}{D}$$

Obter informação sobre qual fenda o eletrão passou destrói a padrão de interferência !

Principio de Incerteza: interpretação com ondas



Onda com um comprimento de onda bem definido

$$\psi(x,t) = \mathrm{A}\sin(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi ft)$$

de Broglie $\quad p = \frac{h}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \Delta p \approx 0;\ \Delta x \to \infty$

Para localizar a onda temos introduzir uma incerteza no p (i.e. l)

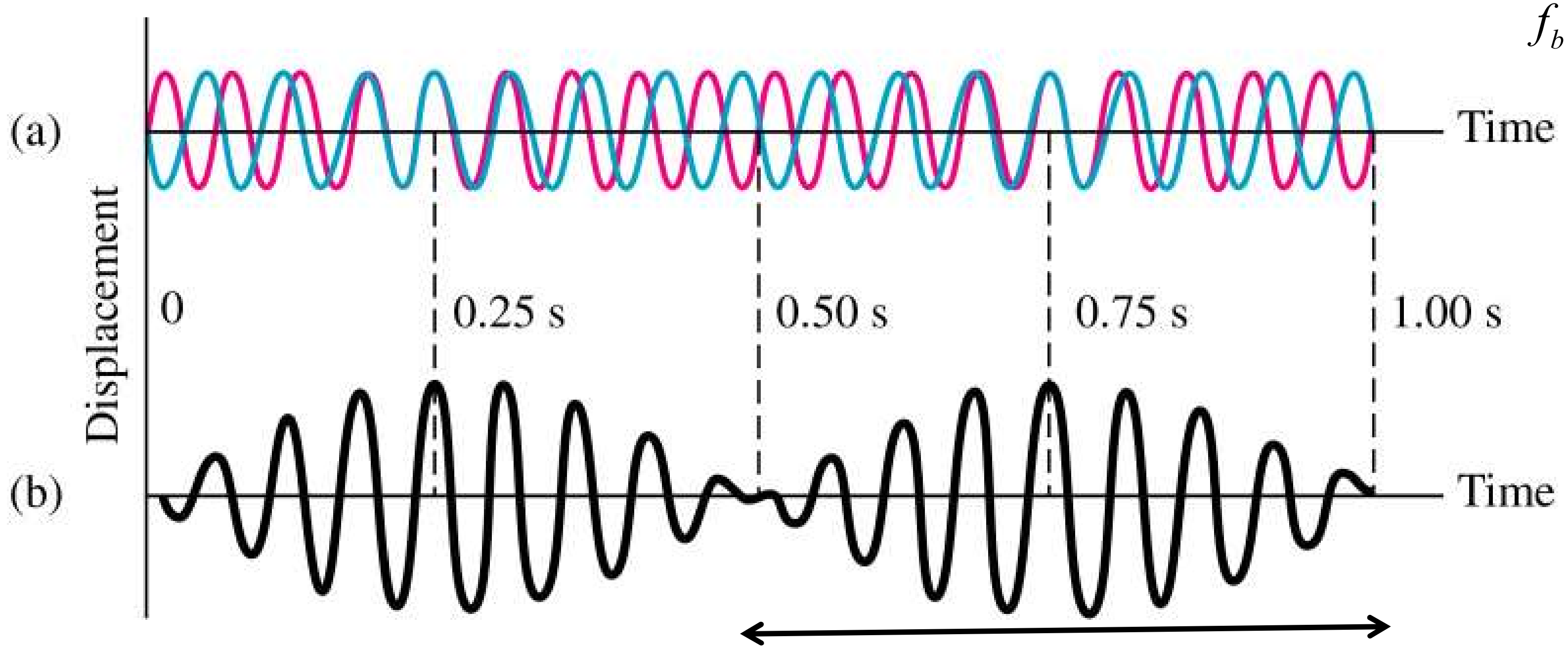
Para ondas eletromagnéticos no vácuo $f\lambda = c$
È mais fácil trabalhar com os variáveis f e tempo do que λ e posição…

Batimento entre duas ondas

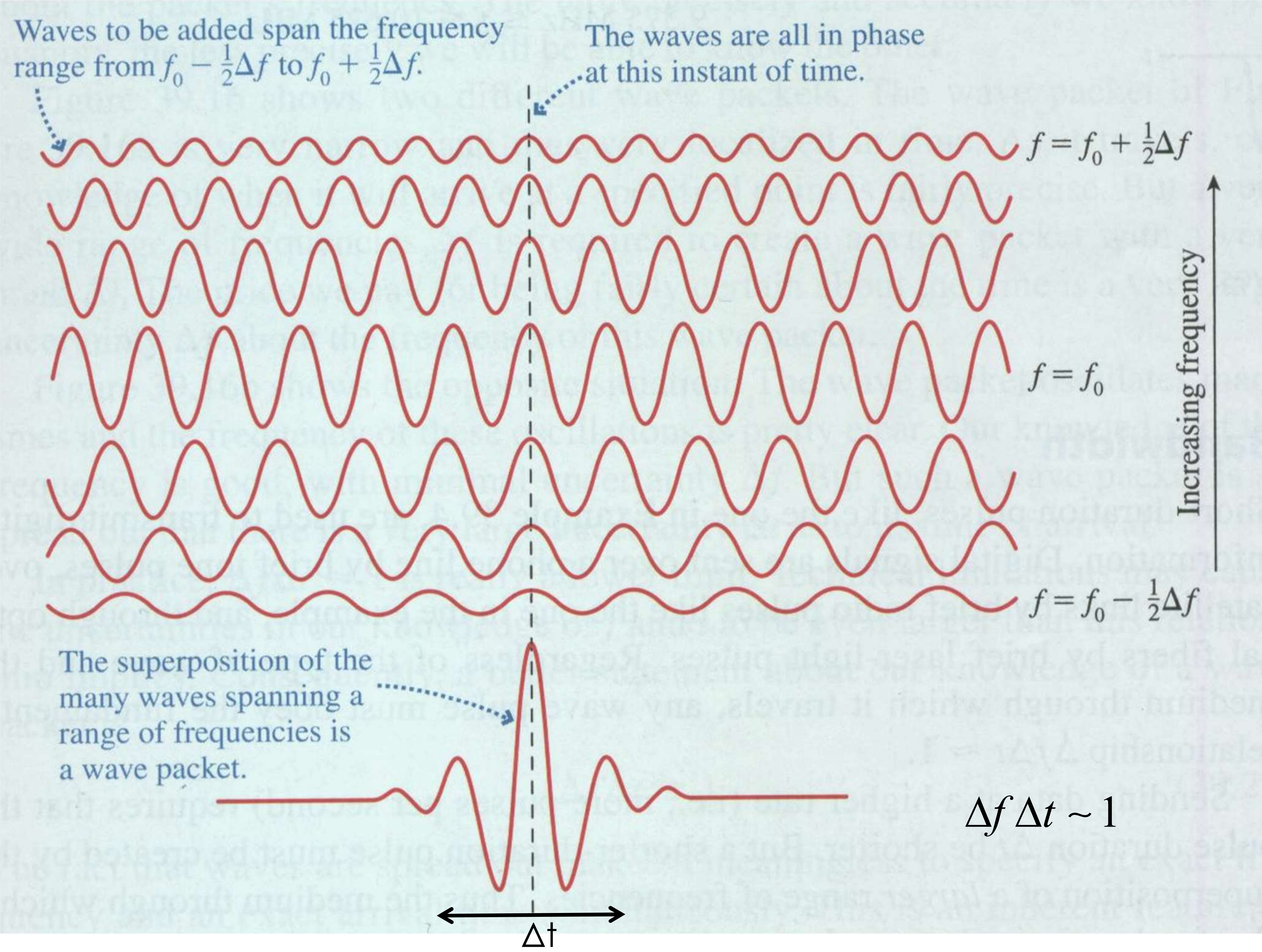
Sobreposição de duas ondas : $$f_{batimento} = f_a - f_b = \Delta f$$

$f_a = 18\text{Hz}$

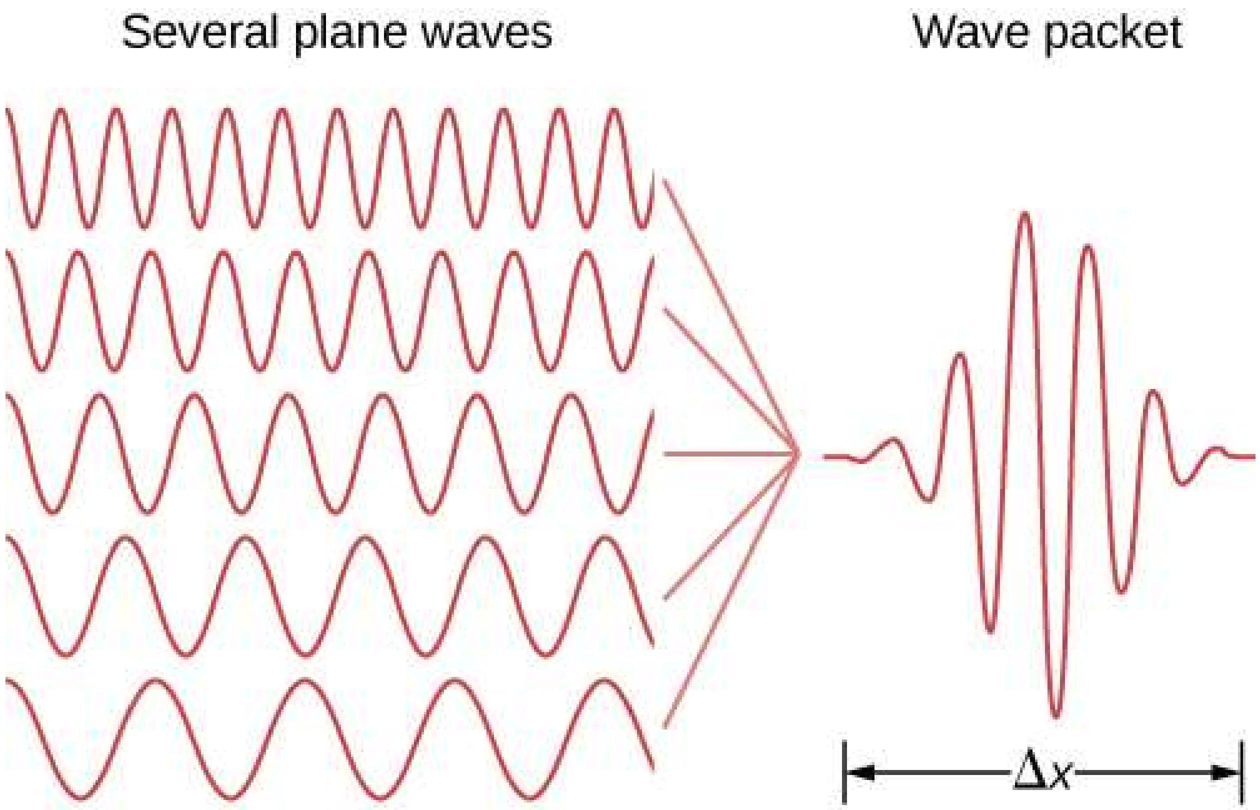
$f_b = 16\text{Hz}$



$$\Delta t \approx 1/\Delta f = 0.5s$$



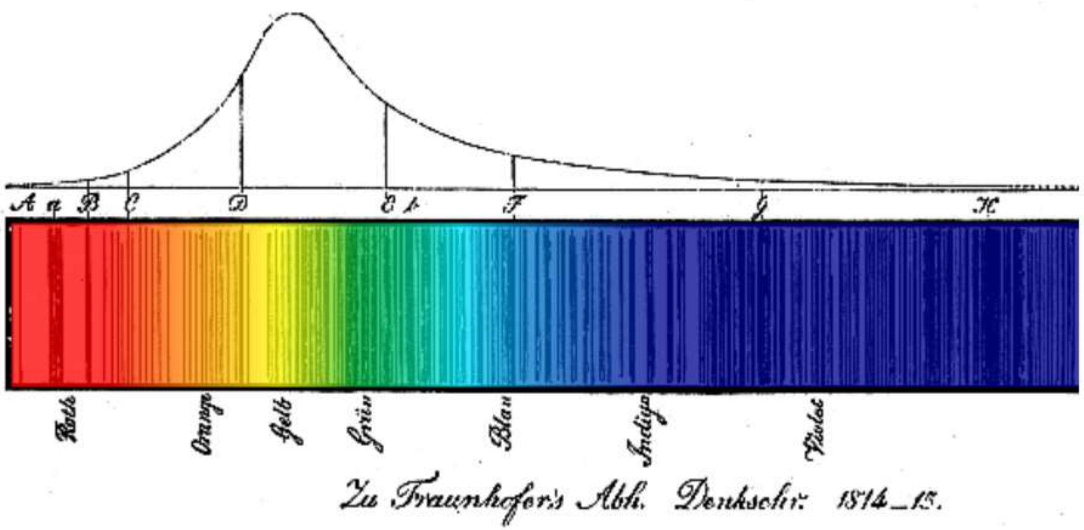
$$\Delta f \, \Delta t \sim 1$$



$$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right)\Delta x \sim 1$$

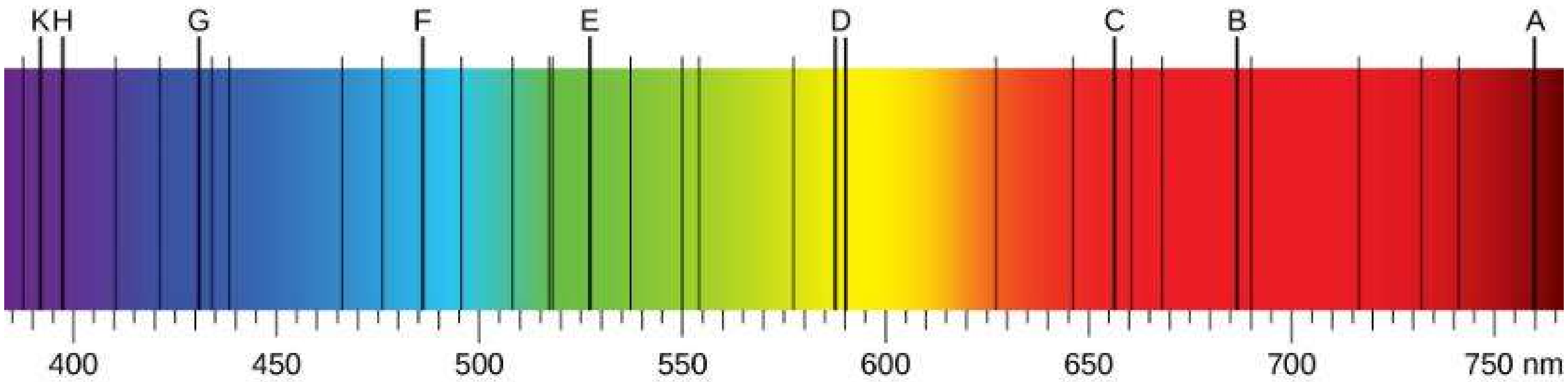
$$\underbrace{\Delta\left(\frac{h}{\lambda}\right)}_{p}\Delta x \sim h$$

Linhas espetrais

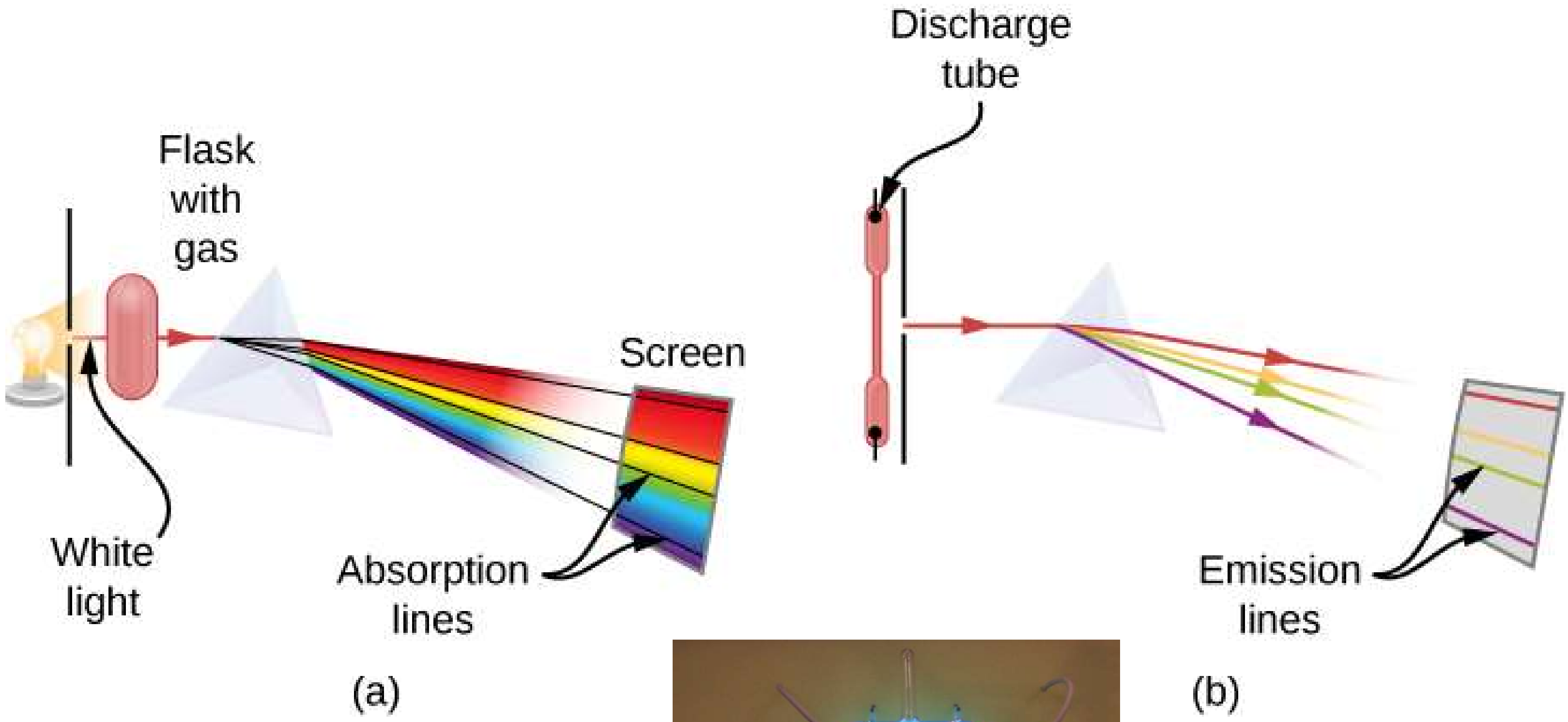


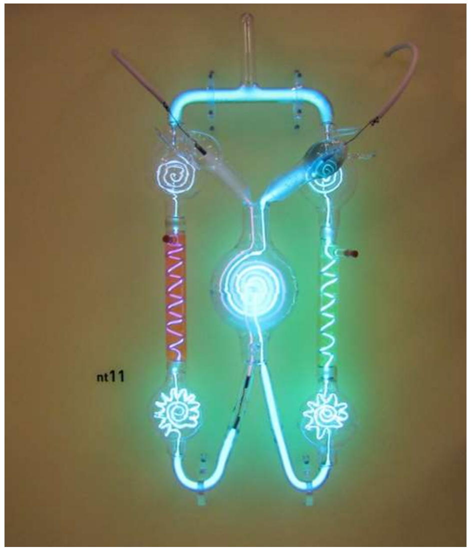
J Fraunhofer

Mediu com cuidado o espetro do Sol
Encontrou "linhas escuras" A, B, C, ...

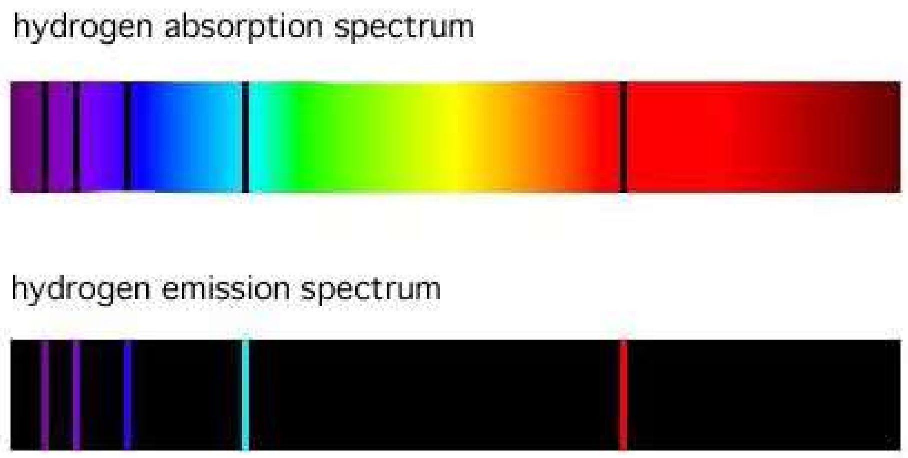


Emissão e Absorção





Hidrogénio



Johannes Rydberg
1900

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad m < n$$

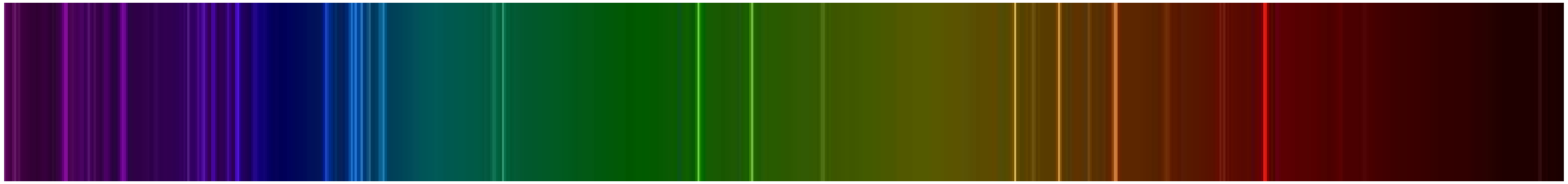
$$R = 1.097x10^7 m^{-1}$$

m = 1 Lyman
m = 2 Balmer
m = 3 Paschen
m = 4 Brackett

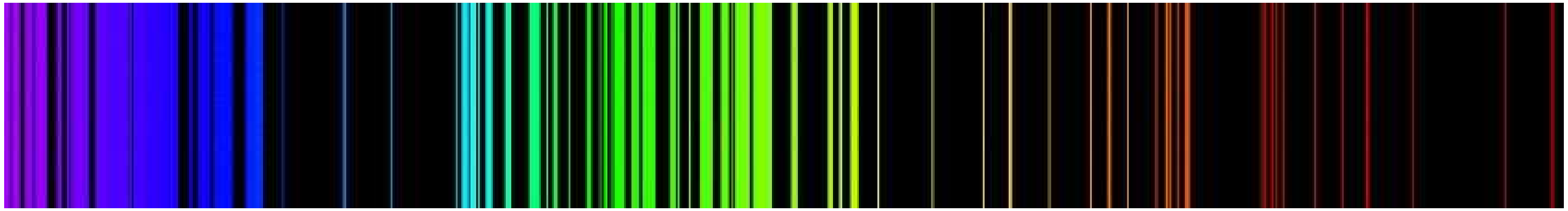
- Fundamentação física ausente
- Expressão apenas válida para H

Espetro de Oxigénio e Ferro

O_2

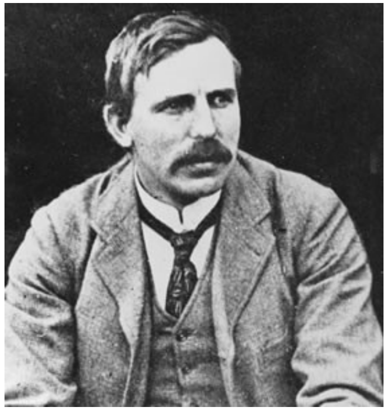


Fe

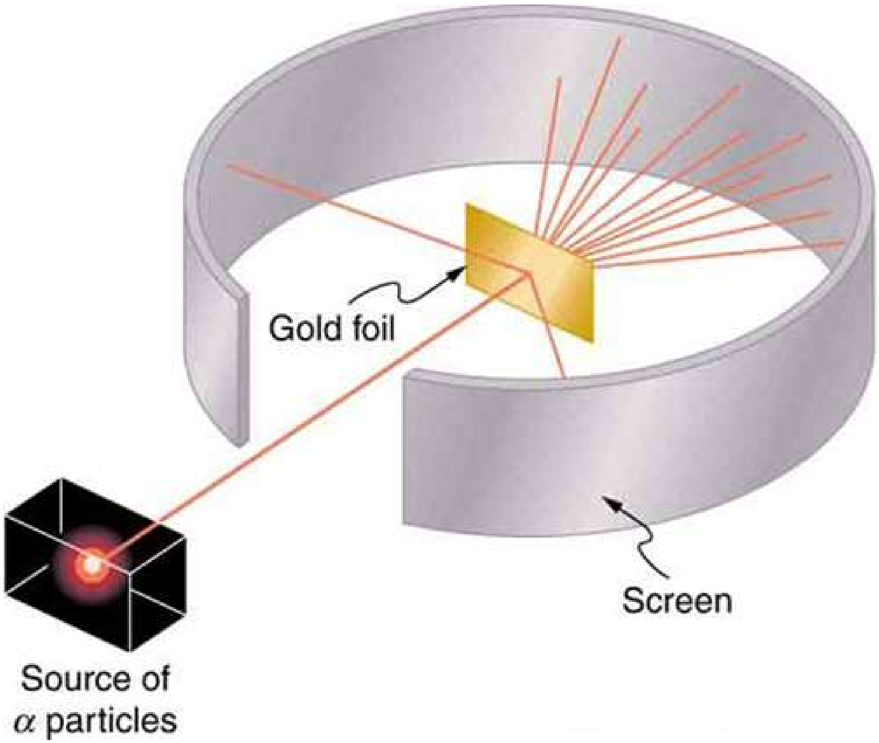


Os espetros atómicos e moleculares podem ser complexos.

Experiência de Marsden-Rutherford

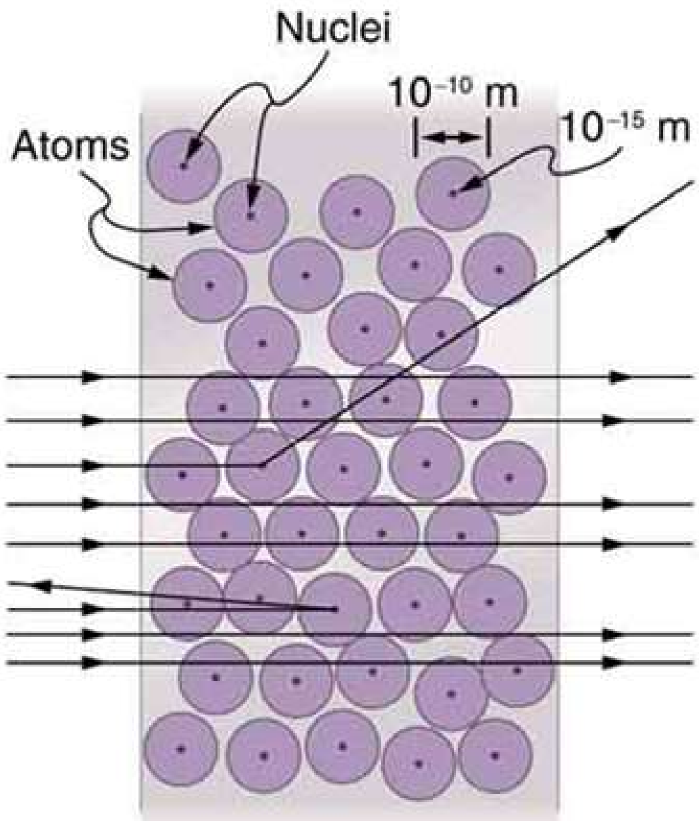


E. Rutherford
Nobel 1908 (química)



Núcleos de He

Cerca de 1 em cada 100,000 partículas alfa sofrerem desvios grandes



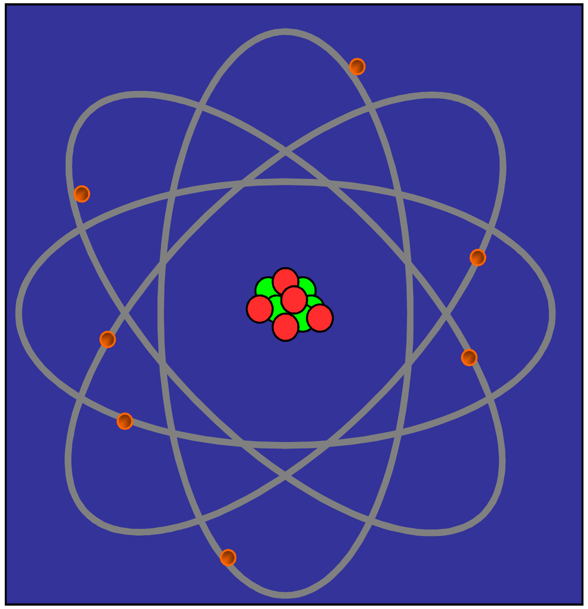
Rutherford deduziu que a maior parte da massa dum átomo era concentrada num “núcleo” muito pequeno

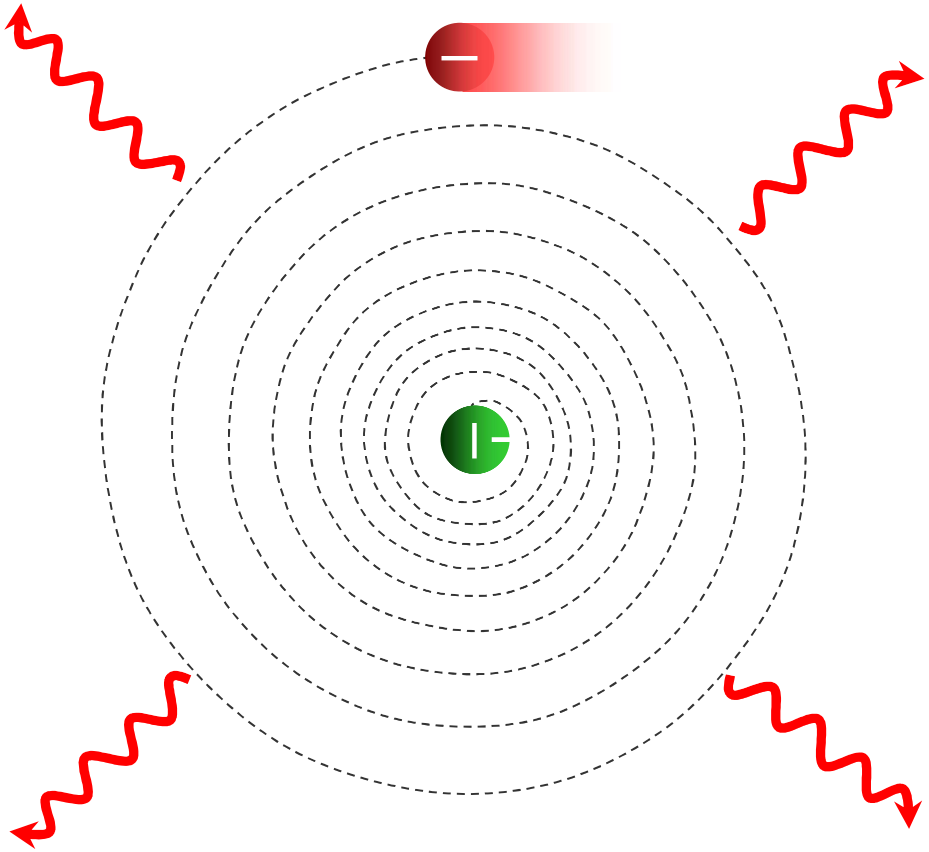
4-5 ordens de grandeza entre tamanhos dos átomos e dos núcleos

“Átomo” ~ vários estádios

“Núcleo”

Modelo Planetário do Rutherford



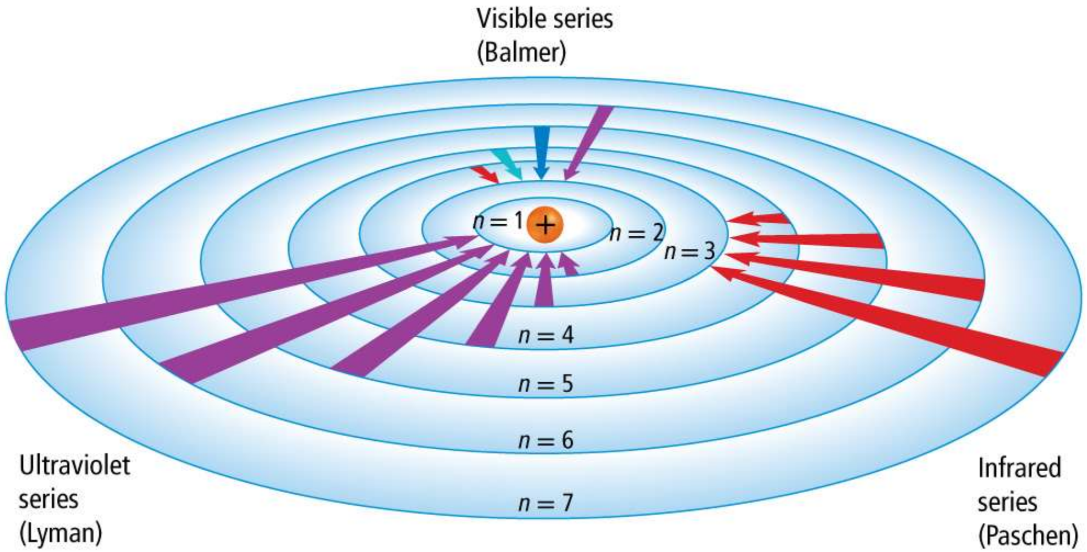


Hill, Petrucci, General Chemistry An Integrated Approach 2nd Edition, page 294

Problema:
Cargas aceleradas radiam energia!
O eletrão perdia energia e rapidamente aproxima o núcleo
No modelo do Rutherford os átomos não são estáveis.

Modelo de Bohr para H

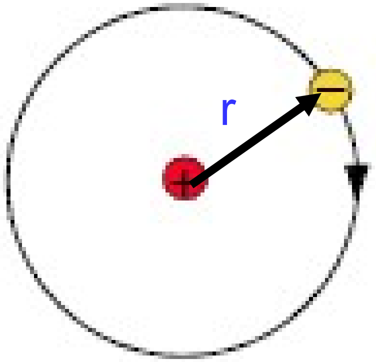
Niels Bohr
1885-1962
Nobel 1922



- 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)

Modelo de Bohr para H

1913
Prémio Nobel 1922



Aproximação: uma vez que a massa do núcleo é muito maior do que a massa do eletrão, consideremos o núcleo fixo e focaremos no eletrão

interação eletrostática

$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Qq}{r^2}$$

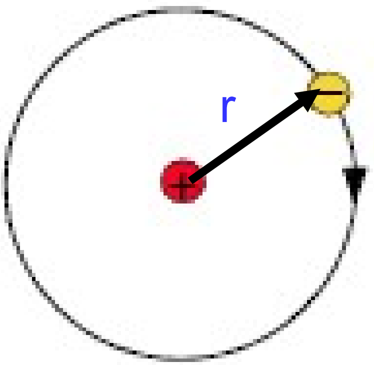
$$V = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Qq}{r}$$

Neste problema
Q = +Ze (Z protões no núcleo)
q = -e (só temos um eletrão)

Charles Coulomb

Expressões análogas as da força de gravitação

Modelo de Bohr para H



Energia total todo eletrão $$E_{tot} = \tfrac{1}{2} m\text{v}^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Newton II: $$m\frac{\text{v}^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} \Rightarrow \tfrac{1}{2} m\text{v}^2 = \tfrac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

$$E_{tot} = -\tfrac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Quantização de momento angular $$\boxed{L = m\text{v}r = n\hbar}$$ em Newton II $$\tfrac{1}{2}\frac{n^2\hbar^2}{mr^2} = \tfrac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

$$m^2\text{v}^2 = \frac{n^2\hbar^2}{r^2}$$

$$r = \frac{n^2}{Z}\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

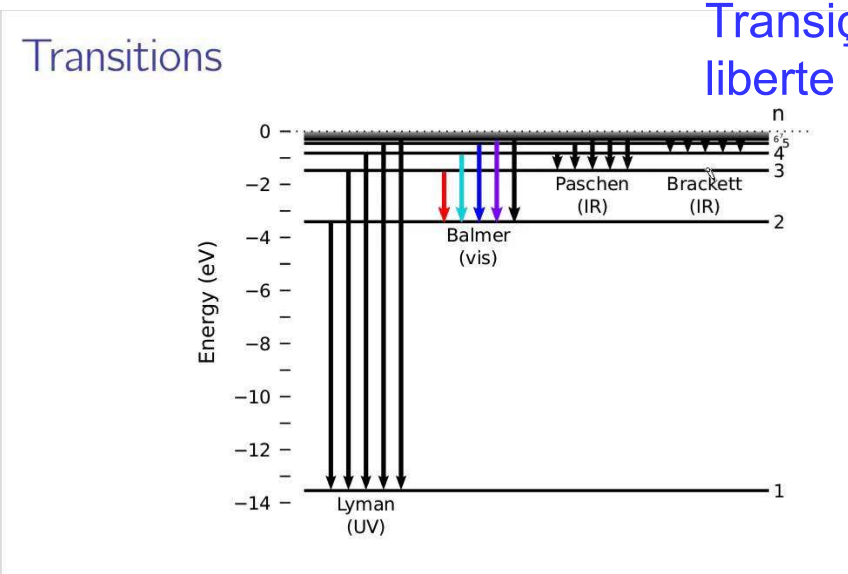
$$a_B \equiv \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.529177109x10^{-10}\,m$$ “Raio de Bohr”

Espetro das energia do átomo de H

$$E_{tot} = -\tfrac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \qquad r = \frac{n^2}{Z}\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{n^2}{Z}a_B$$

Hidrogénio (Z = 1)

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



Transição dum nível superior n até um nível inferior m liberte um fotão com comprimento de onda λ

$$\Delta E = -\tfrac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_B}\right)\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad \Delta E = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \underbrace{\frac{1}{2hc}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_B}\right)}_{R \approx 1.097 x 10^7 m^{-1}} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Descreve o espetro de hidrogénio!

Condição de quantização

$$L = m\mathrm{v}r = n\hbar$$

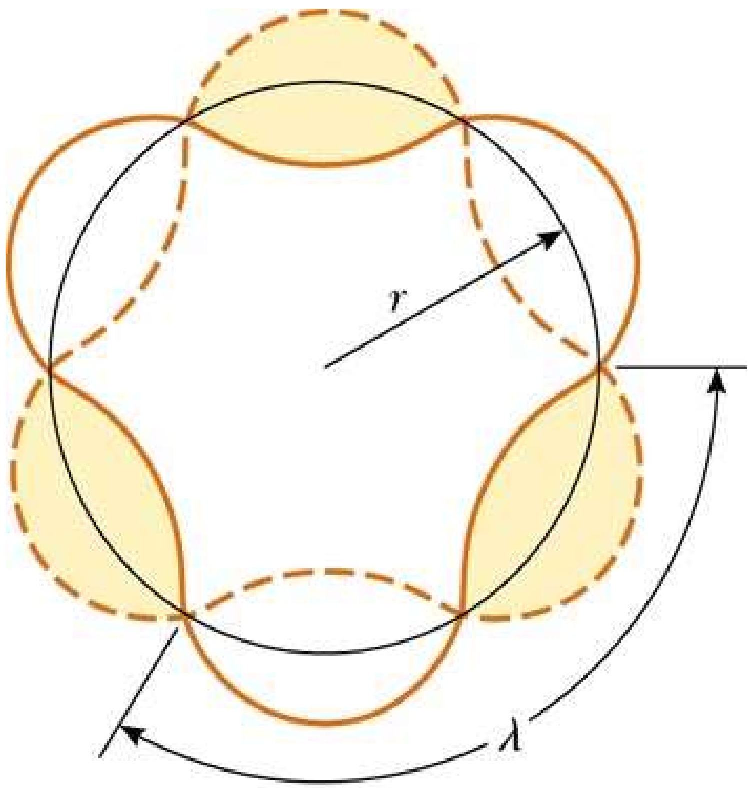
Relação de deBroglie

$$p = m\mathrm{v} = \frac{h}{\lambda}$$

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

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

n = 3



Ás órbitas “permitidas” são aquelas para qual existe um interferência construtiva das ondas do de Broglie…

Pormenores

$$r = \frac{n^2}{Z}\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \qquad\qquad m\mathrm{v}r = n\hbar$$

$$\mathrm{v} = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{Z}{n}c\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 c} \qquad\qquad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 c} \approx \frac{1}{137.06}$$

Constante de estrutura fina

Em geral, para os átomos mais leves, os efeitos de relatividade são pequenas perturbações.

Notar que

$$E_n^Z = -\tfrac{1}{2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 a_B}\right)\frac{Z}{n^2} \qquad\qquad a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

$$E_n^Z = -\tfrac{1}{2}mc^2\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\frac{Z^2}{n^2} = -\tfrac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{Z^2}{n^2}$$

Finalmente quero os avisar que embora o modelo de Bohr acerta nas energias e dá escalas certas para os tamanhos dos átomos e as velocidades típicos dos eletrões, falha gravemente na atribuição de momento angular as órbitas.