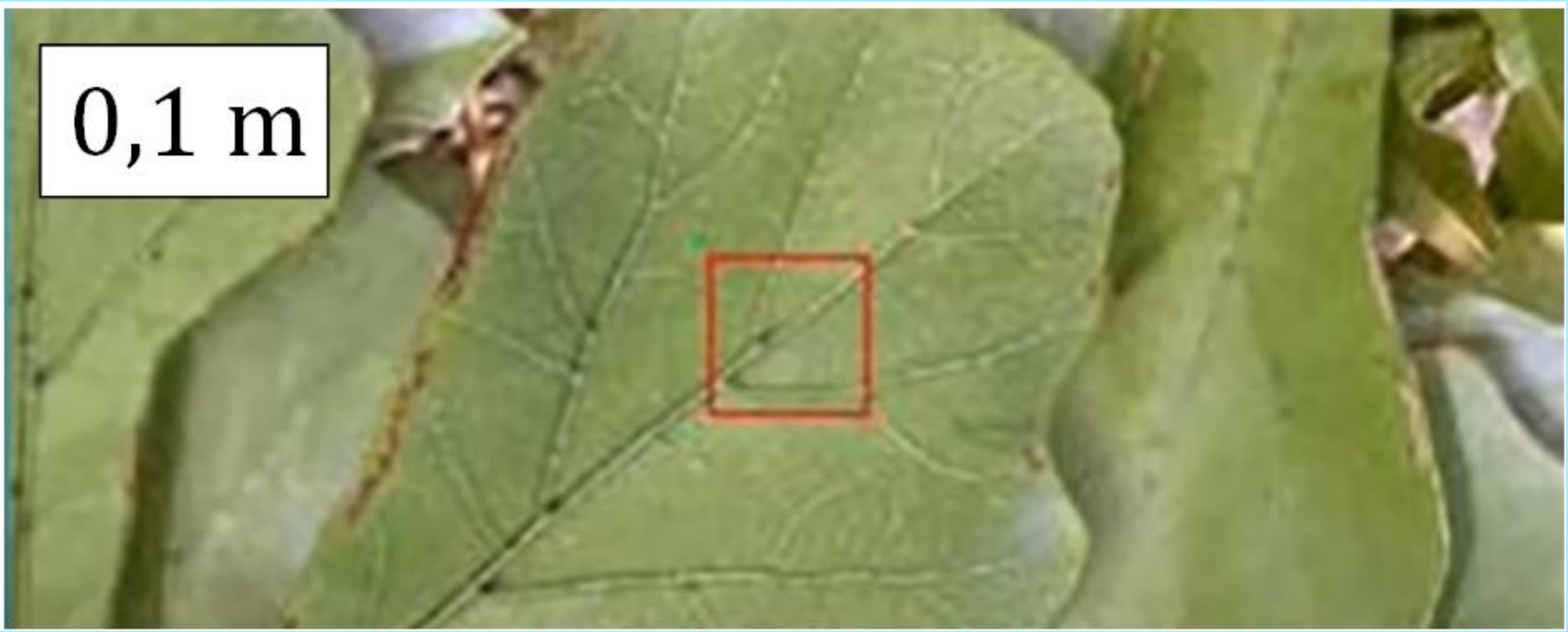
Ondas e a equação de Schrödinger

Marcos Degani
Faculdade de Ciências Aplicadas
Unicamp

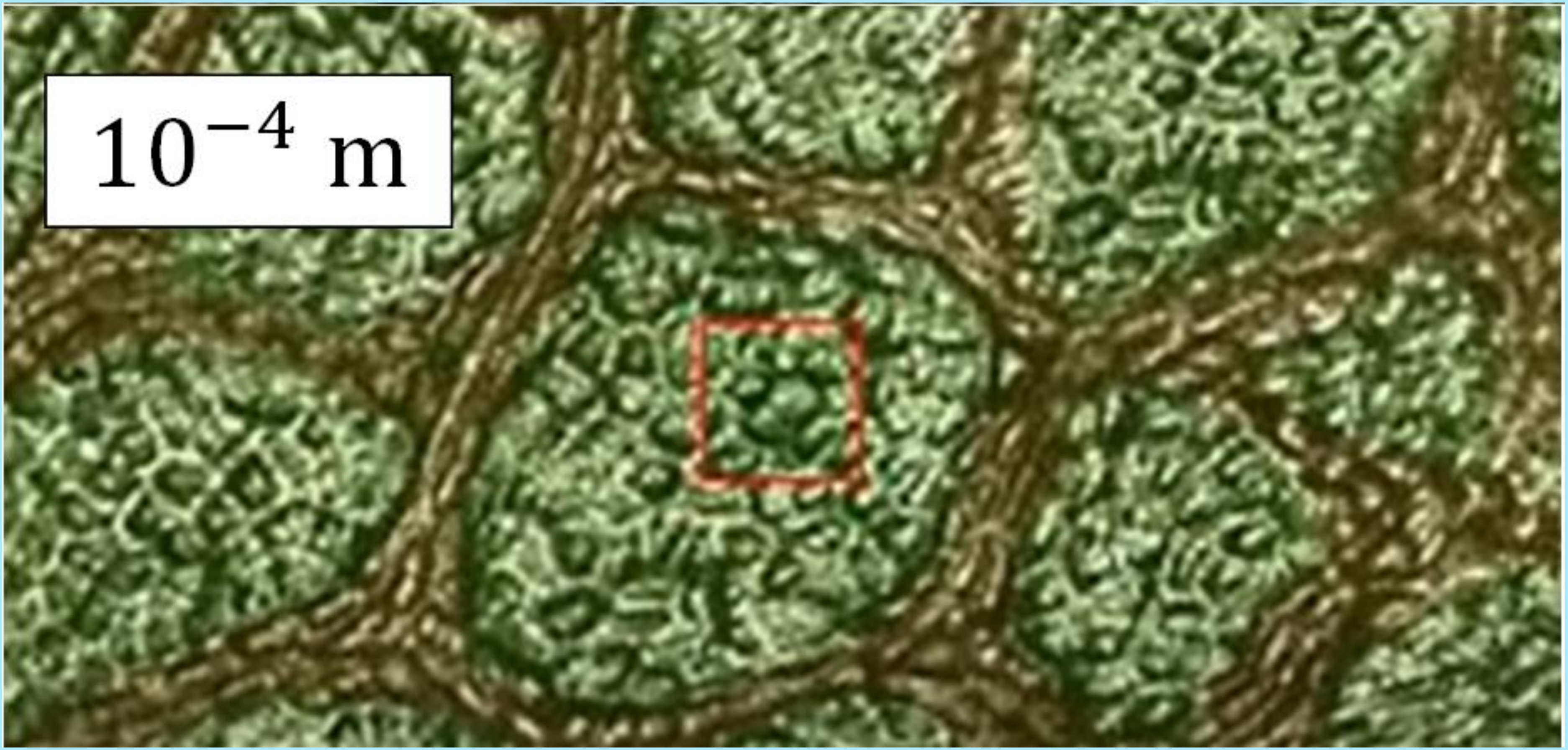
Dimensão

Folhas em um ramo de carvalho


0,1 m

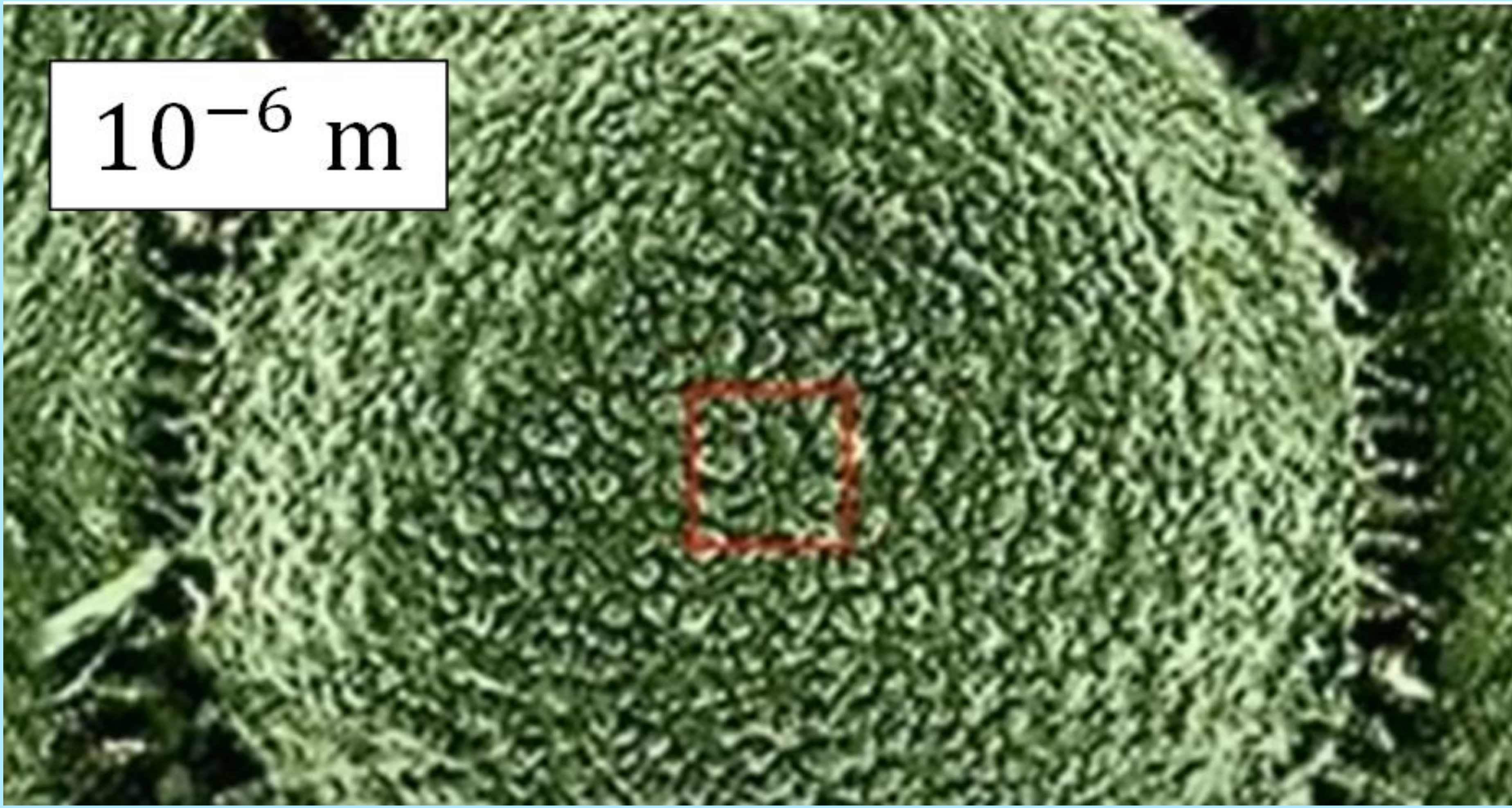

0,01 m


0,001 m

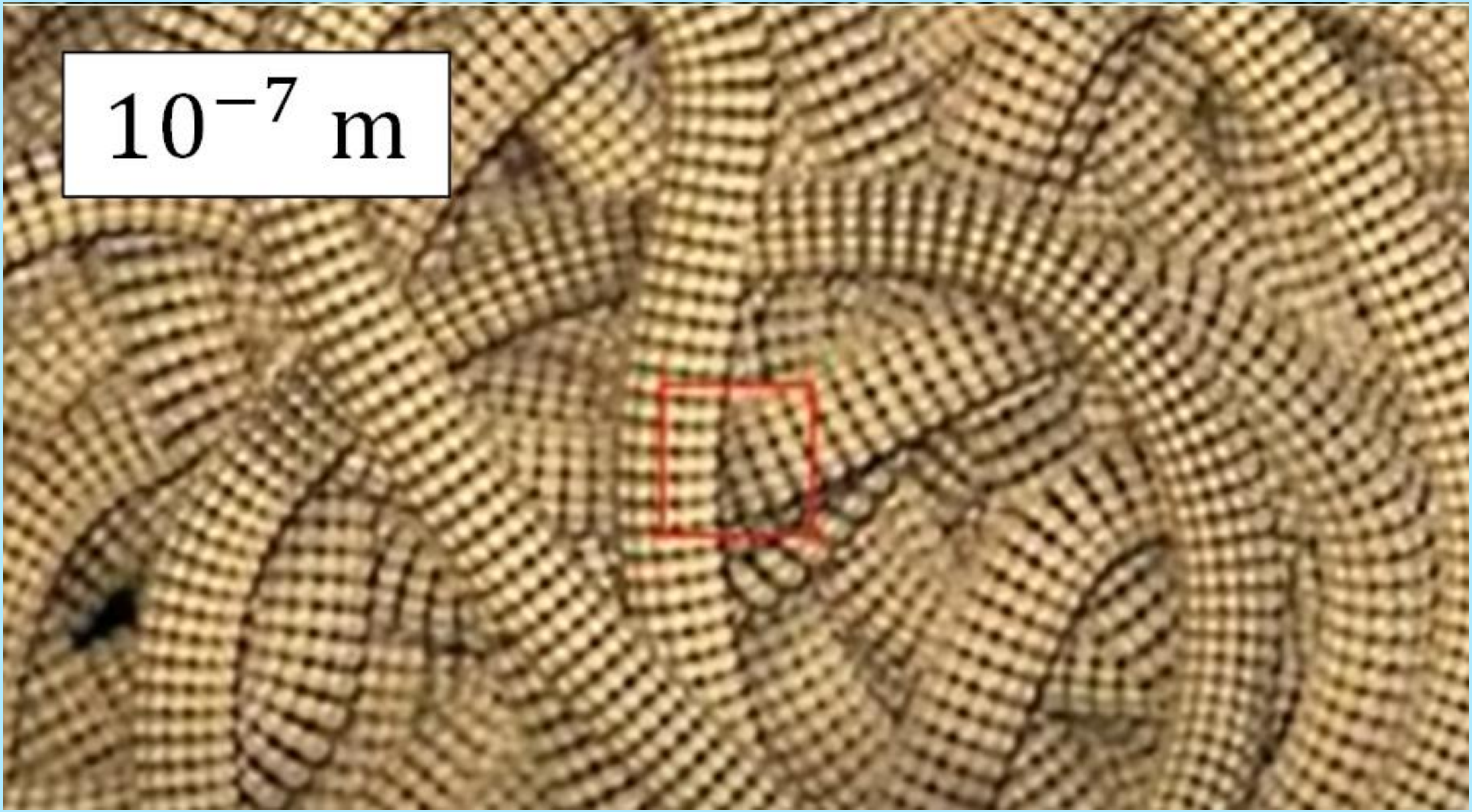


Diâmetro de um fio de cabelo $\approx$ 0,07 mm

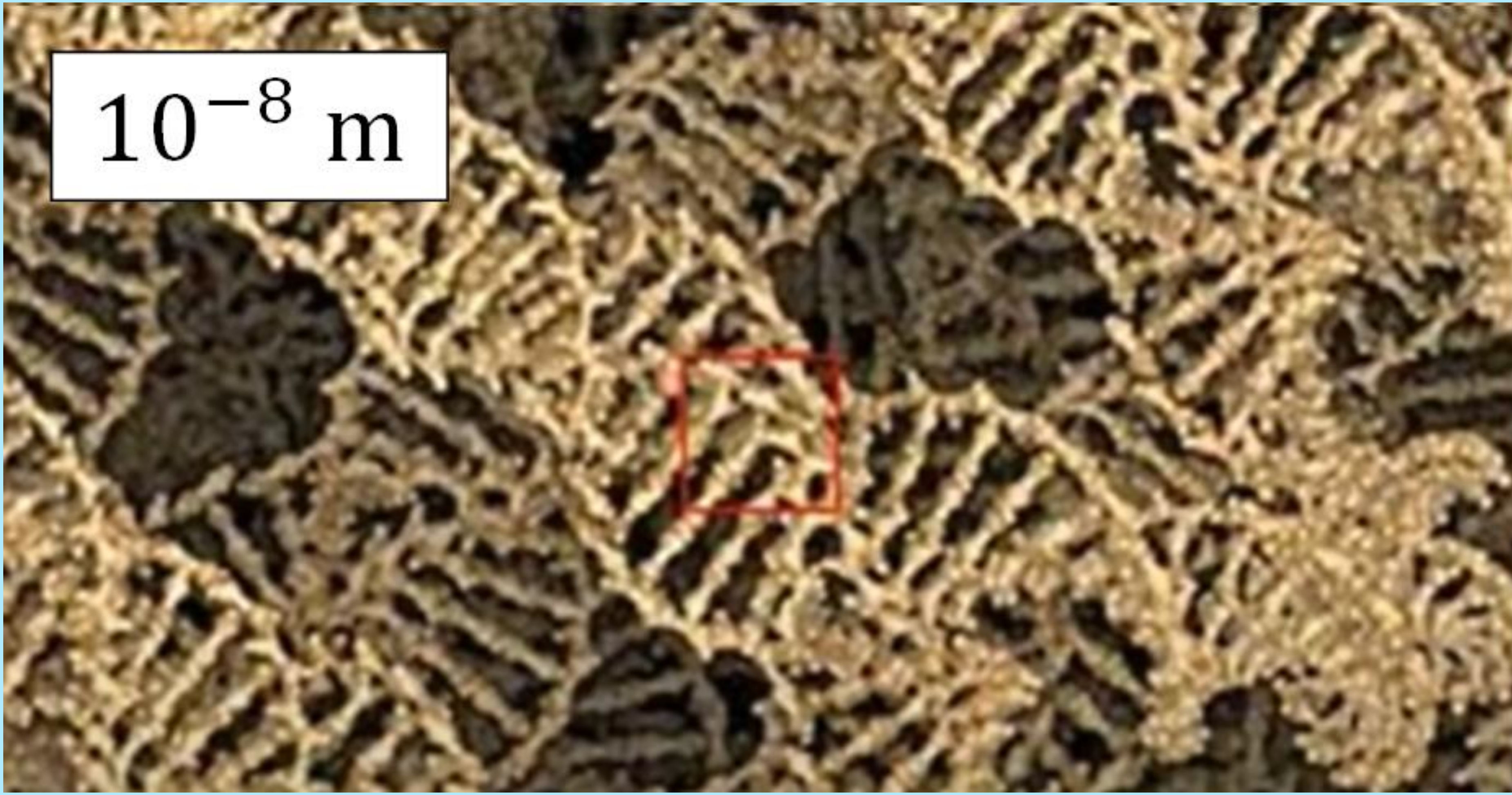
Algumas células na superfície da folha



Núcleo de uma célula das folhas

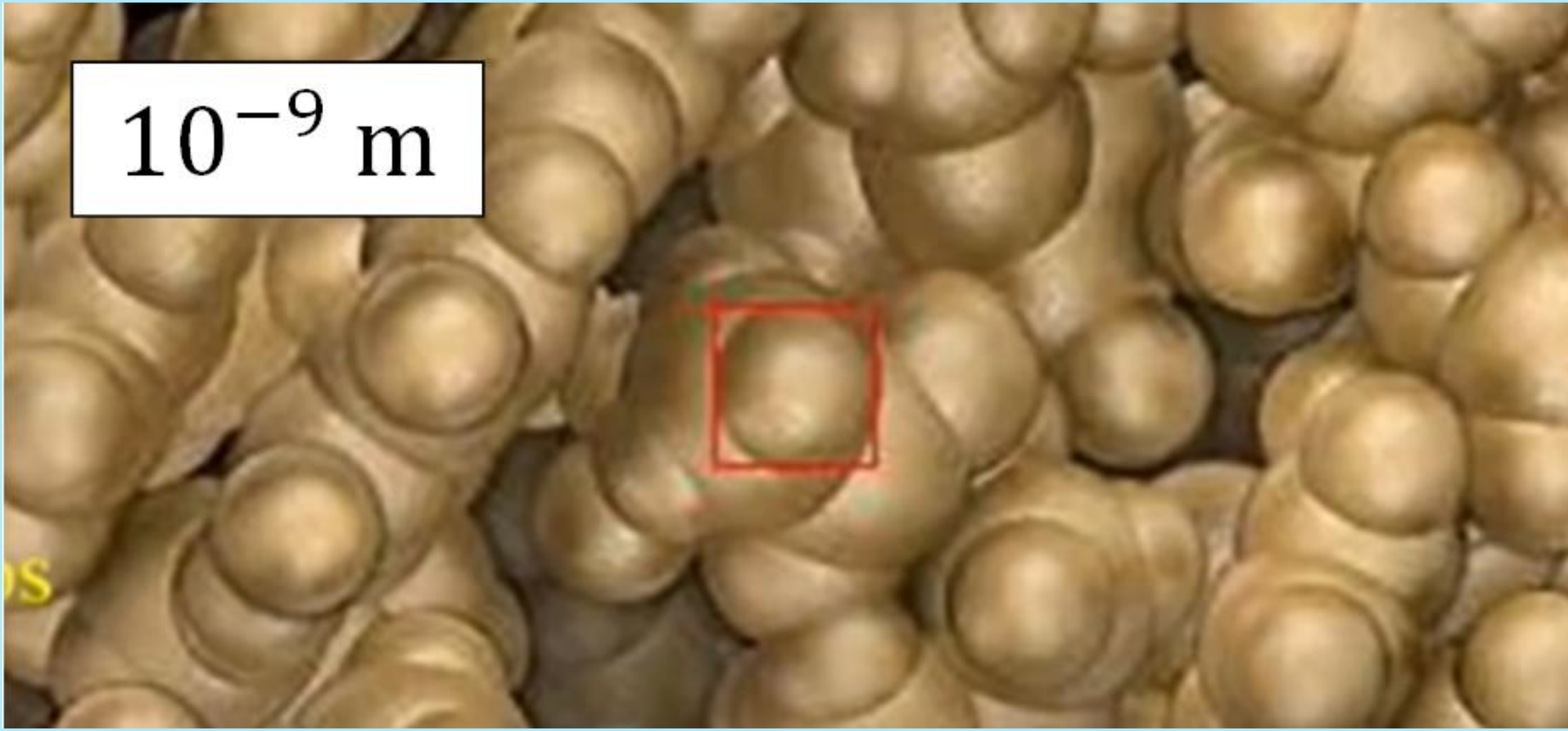


Cromatina no núcleo das células das folhas



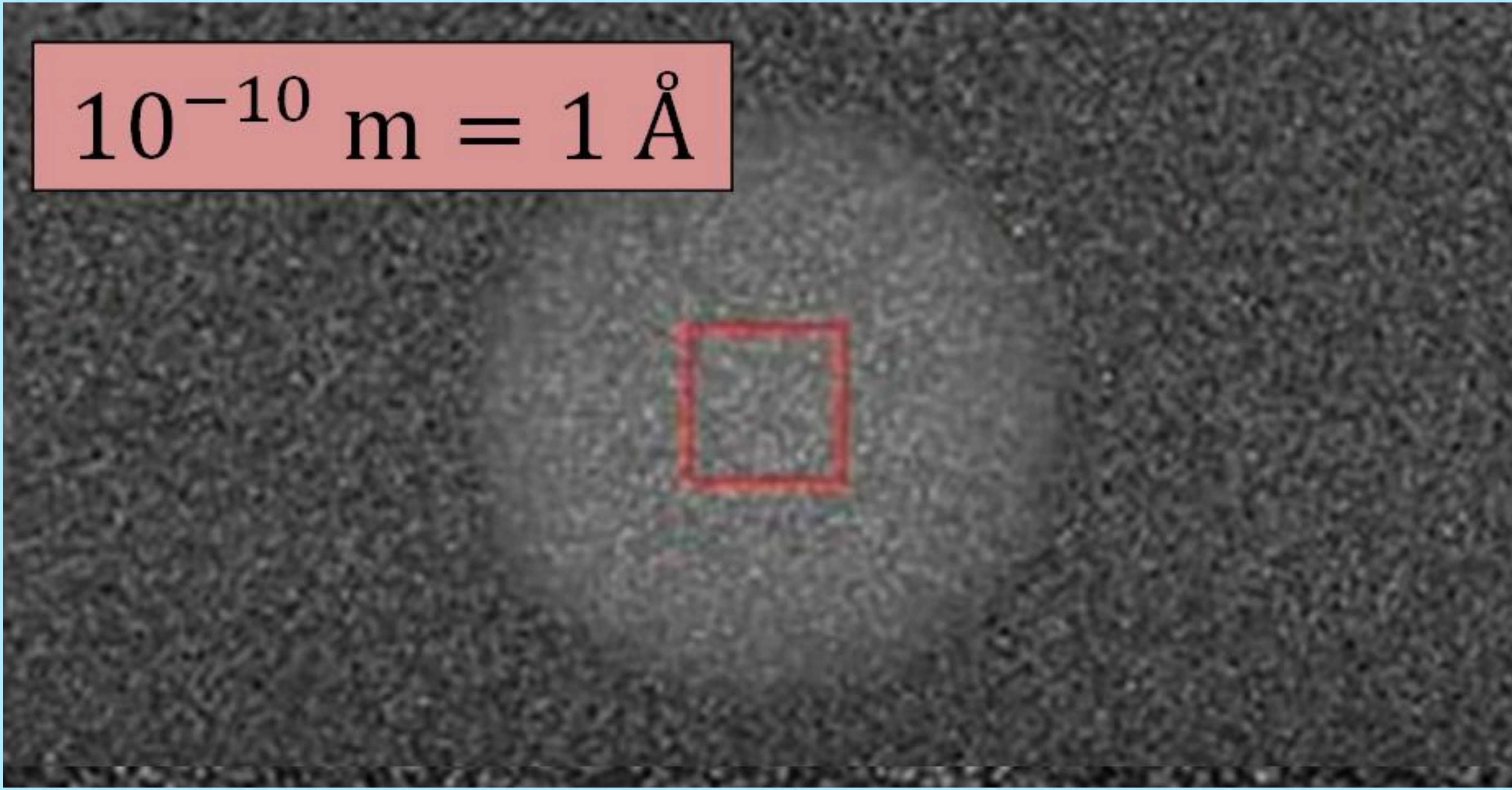
Cadeias de DNA (ácido desoxirribonucleico)

$$10^{-9} = 1\ \text{nm}$$

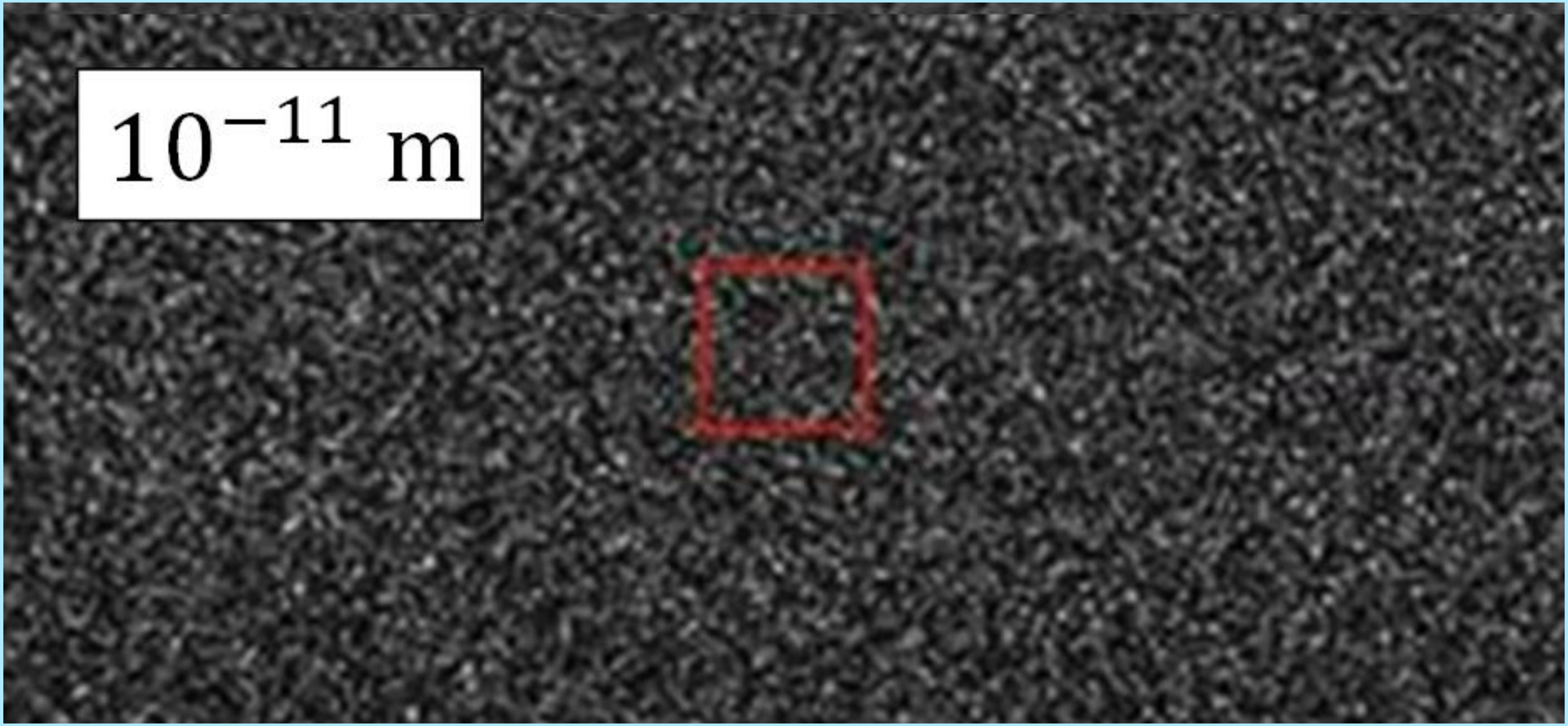


Blocos de construção do DNA

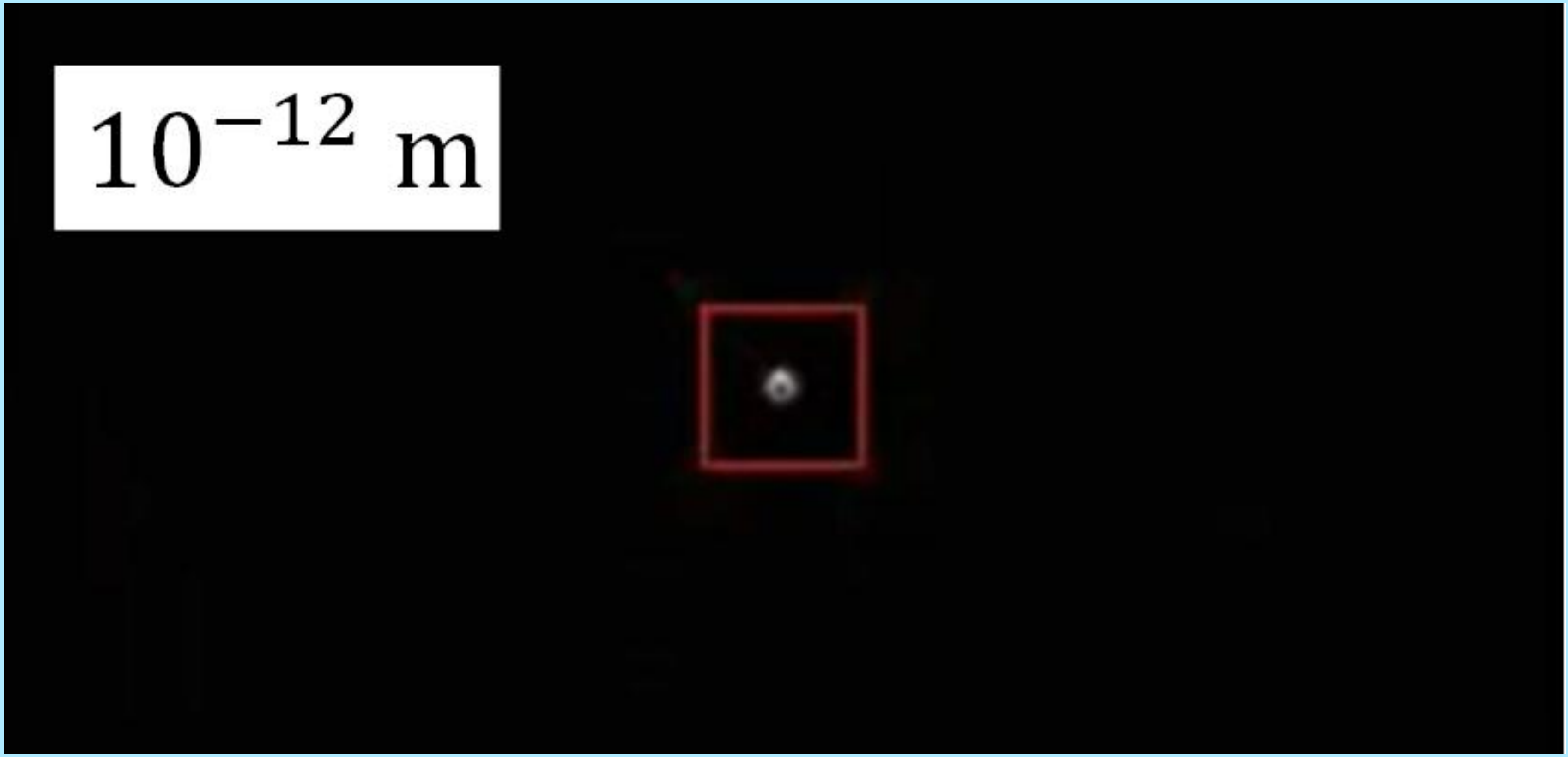
$$10^{-10} = 0{,}0000000001$$

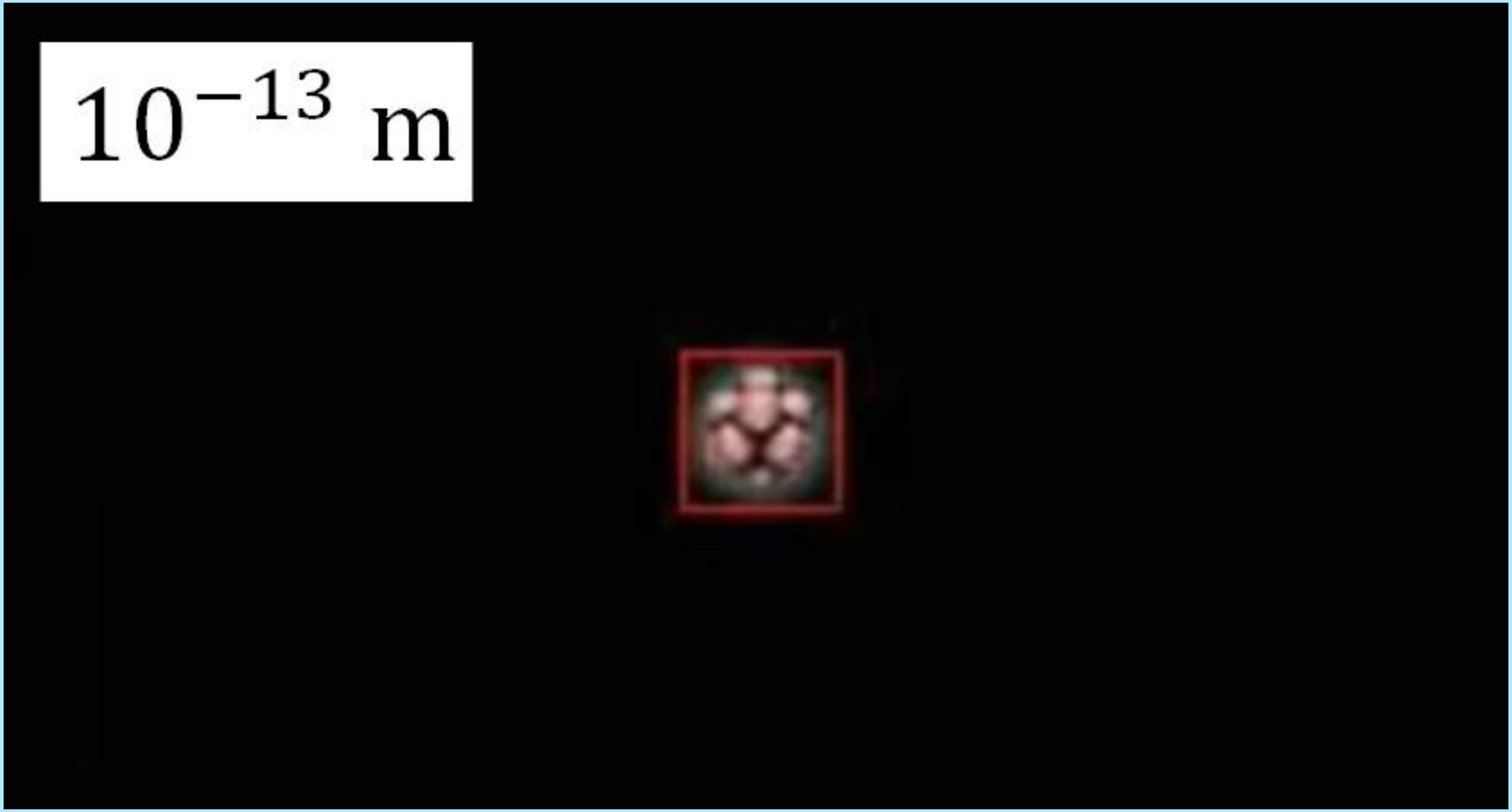


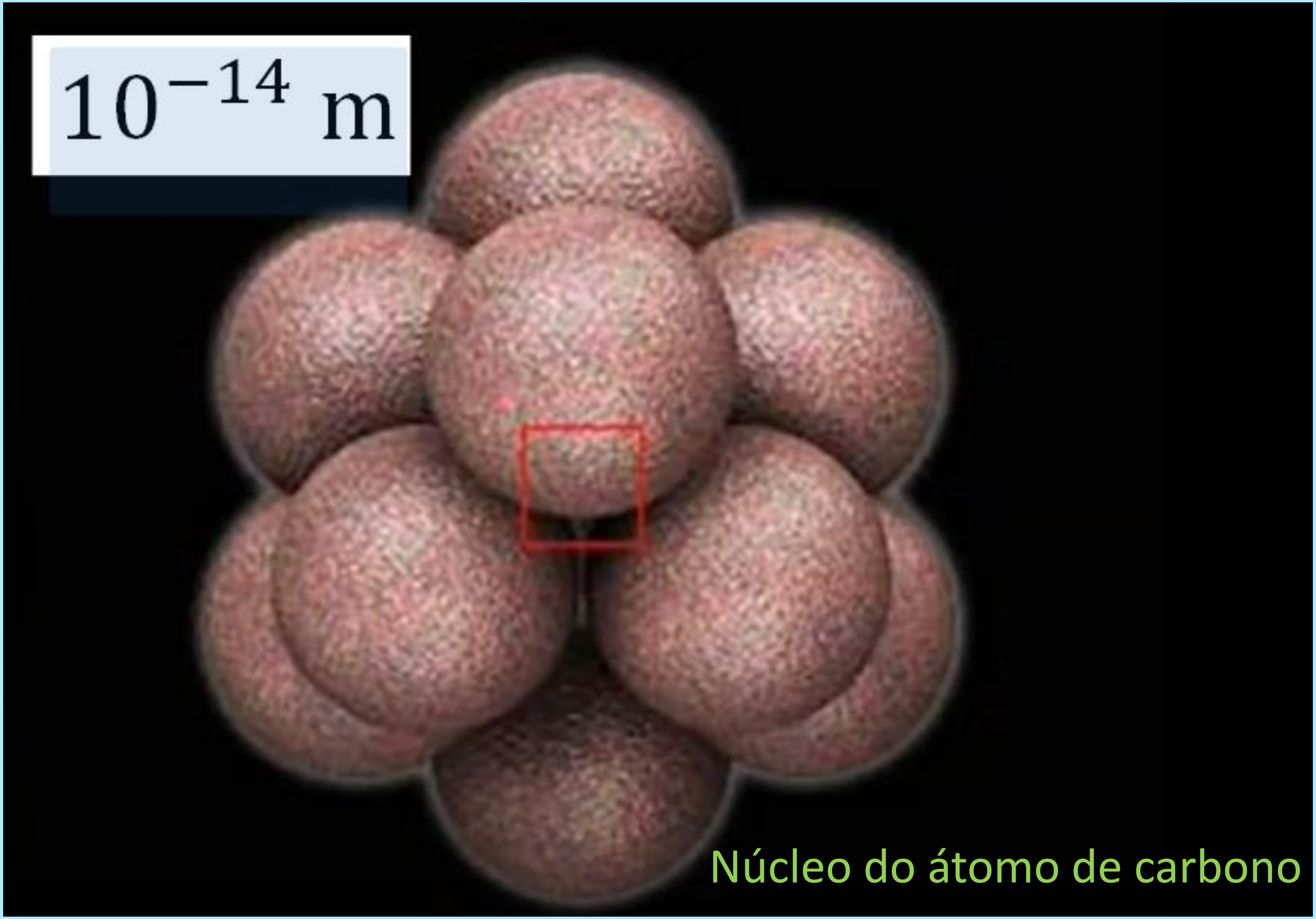
Nuvem eletrônica do átomo de carbono



Interior da nuvem eletrônica


10^{-12} m


10^{-13} m


10^{-14} m
Núcleo do átomo de carbono

Cronologia:

Até o final do século 19, a mecânica, a termodinâmica e o eletromagnetismo explicavam quase tudo.

As equações de Maxwell unificaram a eletricidade e o magnetismo, demonstrando que a luz é uma onda eletromagnética, tornando a ótica um ramo do eletromagnetismo.

James Clerk Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

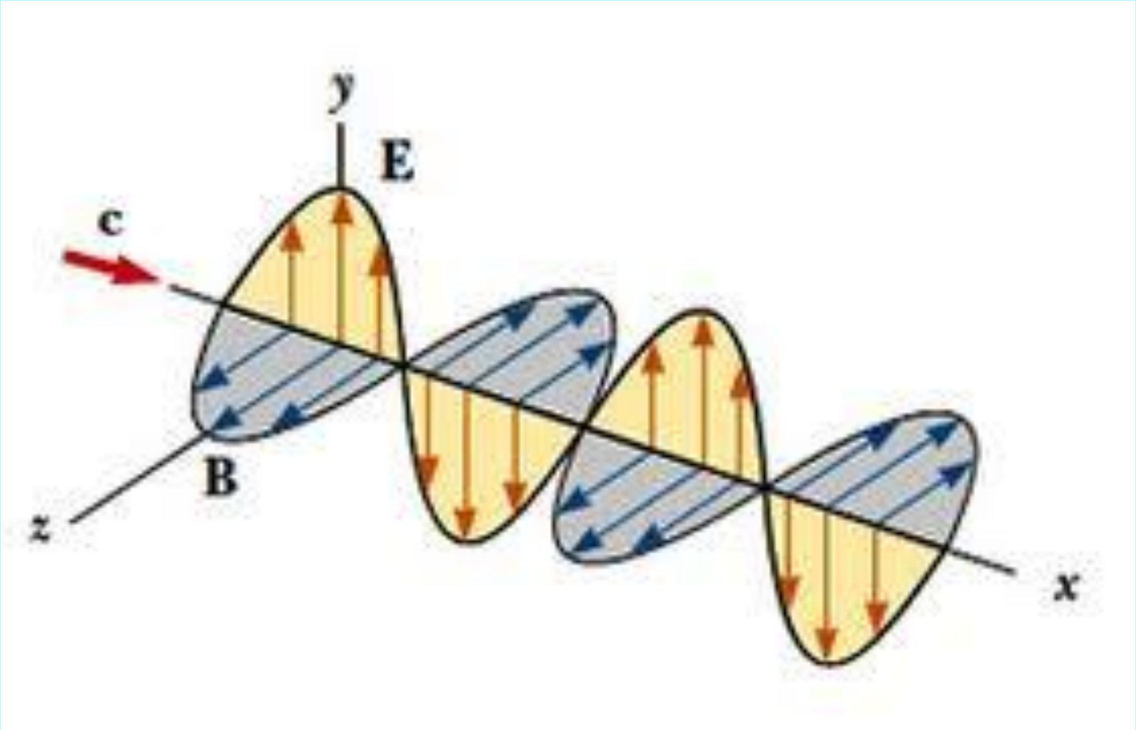
$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$$

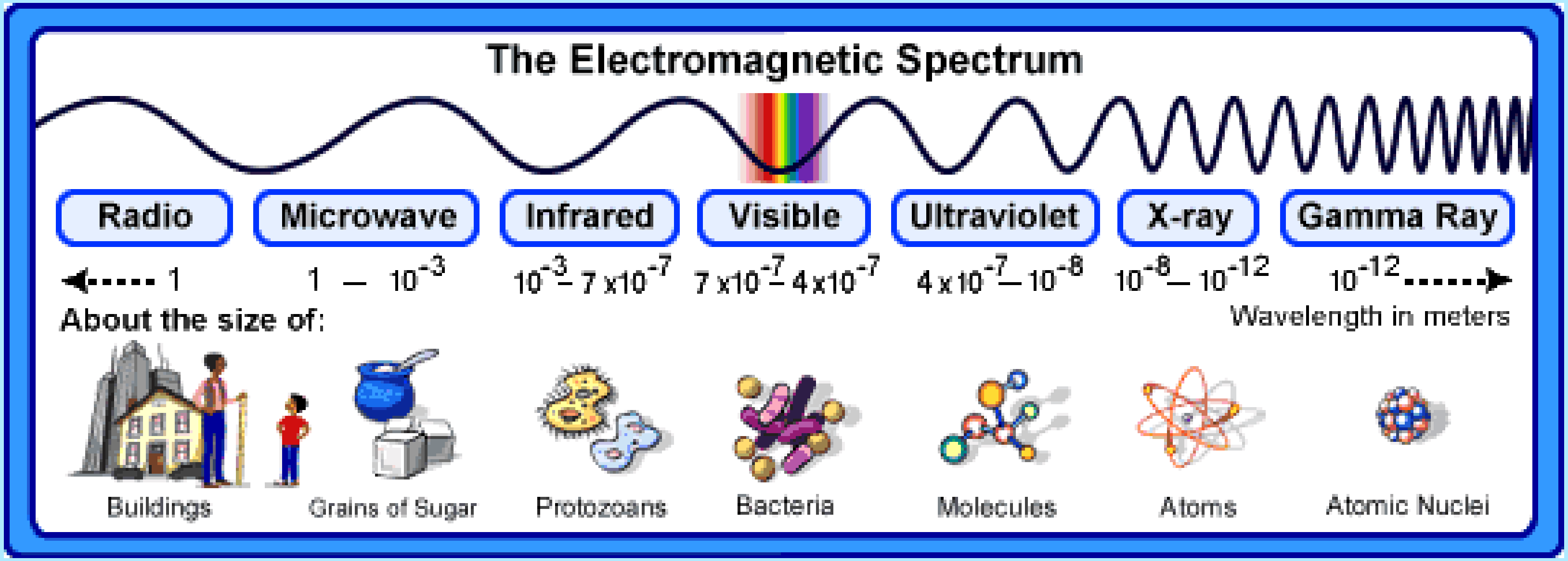
$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}$$

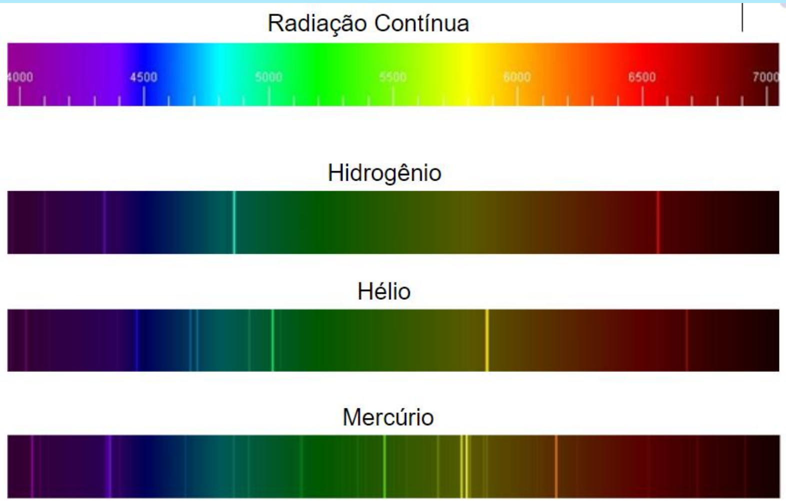
Equações de Maxwell (1865) para o eletromagnetismo

A luz é uma onda eletromagnética

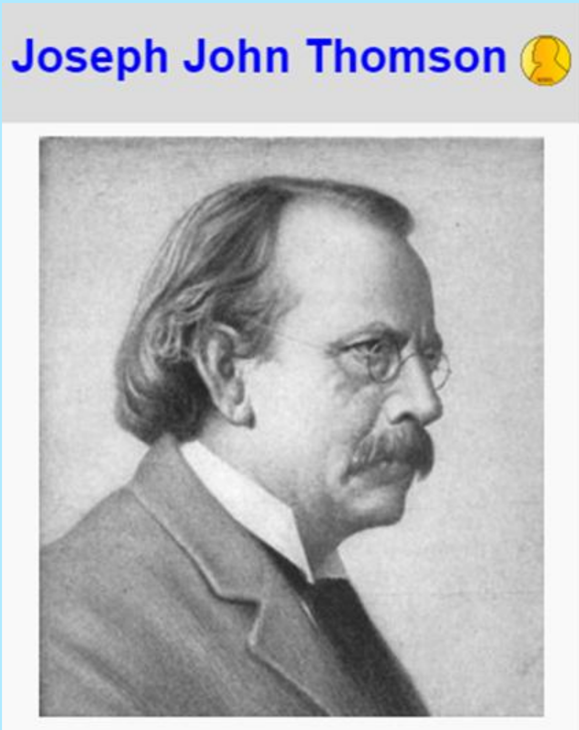


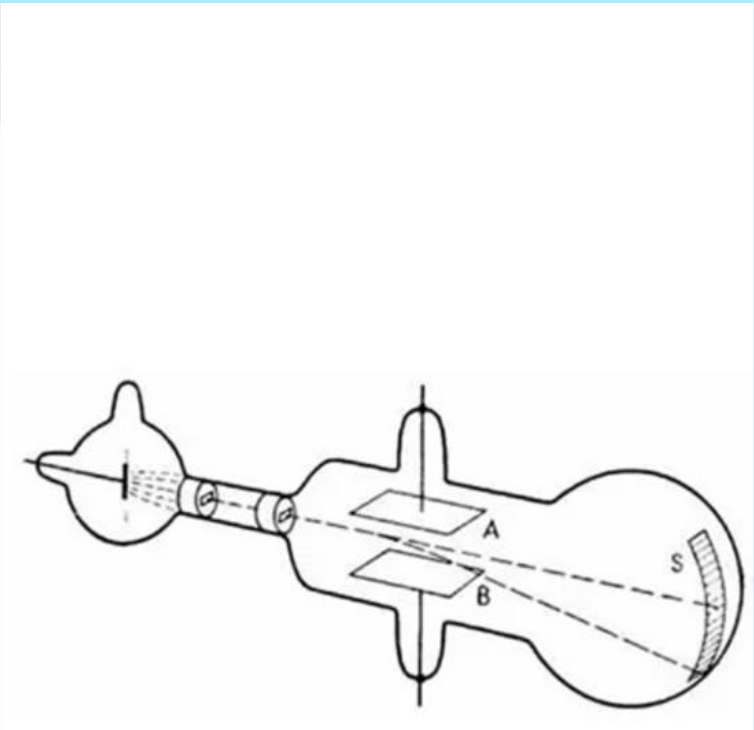
Espectro da onda eletromagnética



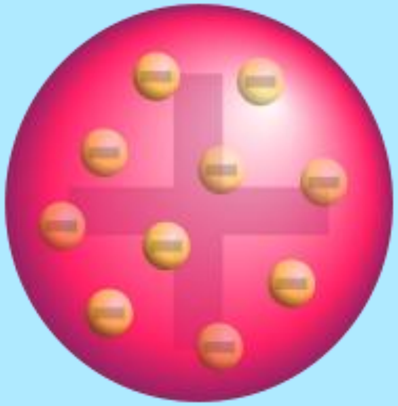


Descoberta do elétron J.J. Thompson 1895(Nobel 1906)
Átomo: pudim de ameixas



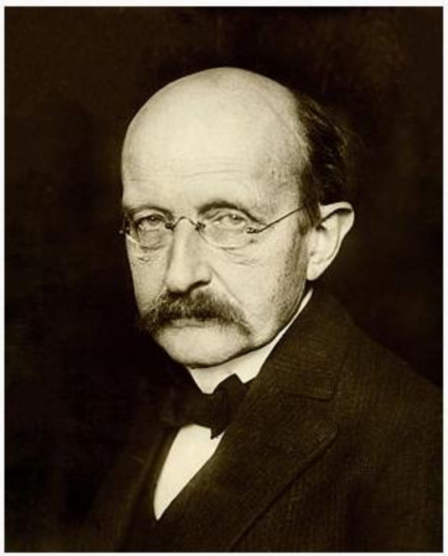


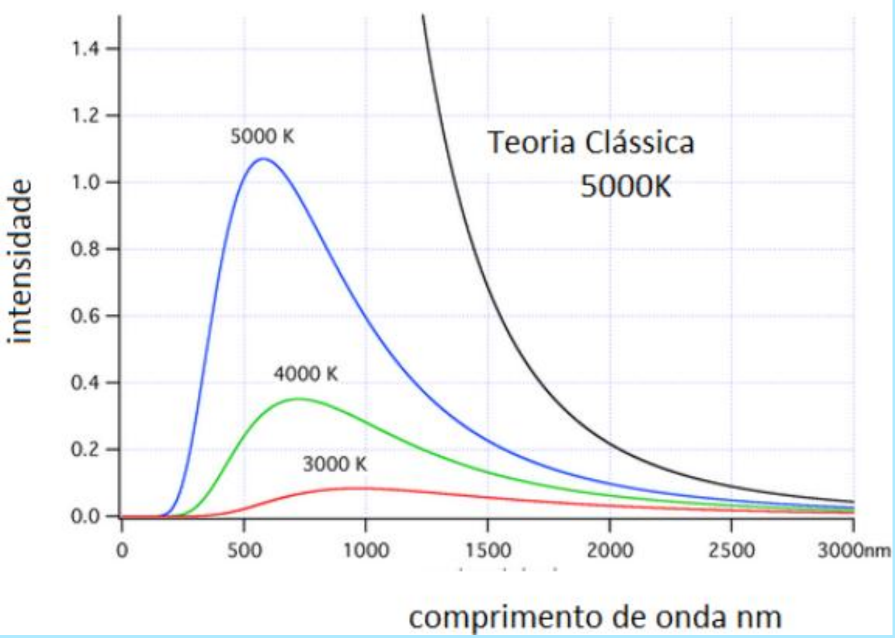
Novo Modelo
Atômico (1904)
“pudim de passas”



Planck (Nobel 1918): radiação do corpo negro 1900 a energia do oscilador é quantizada

Max Planck



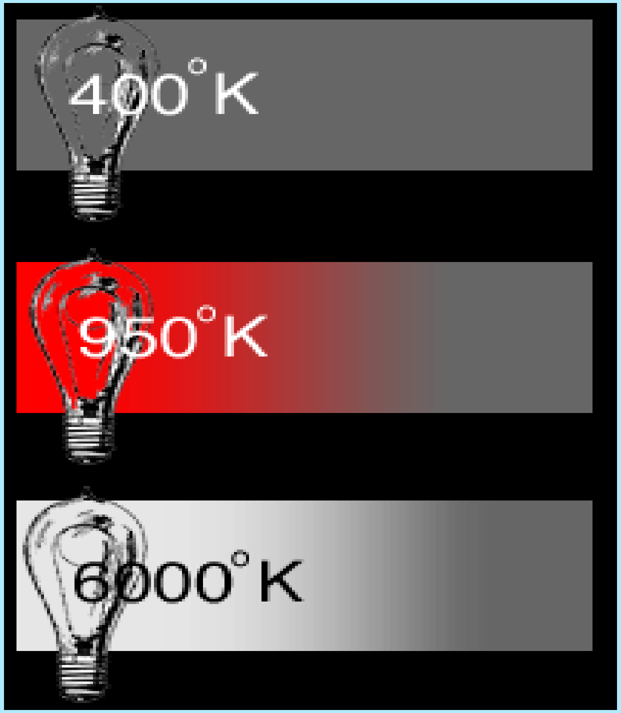


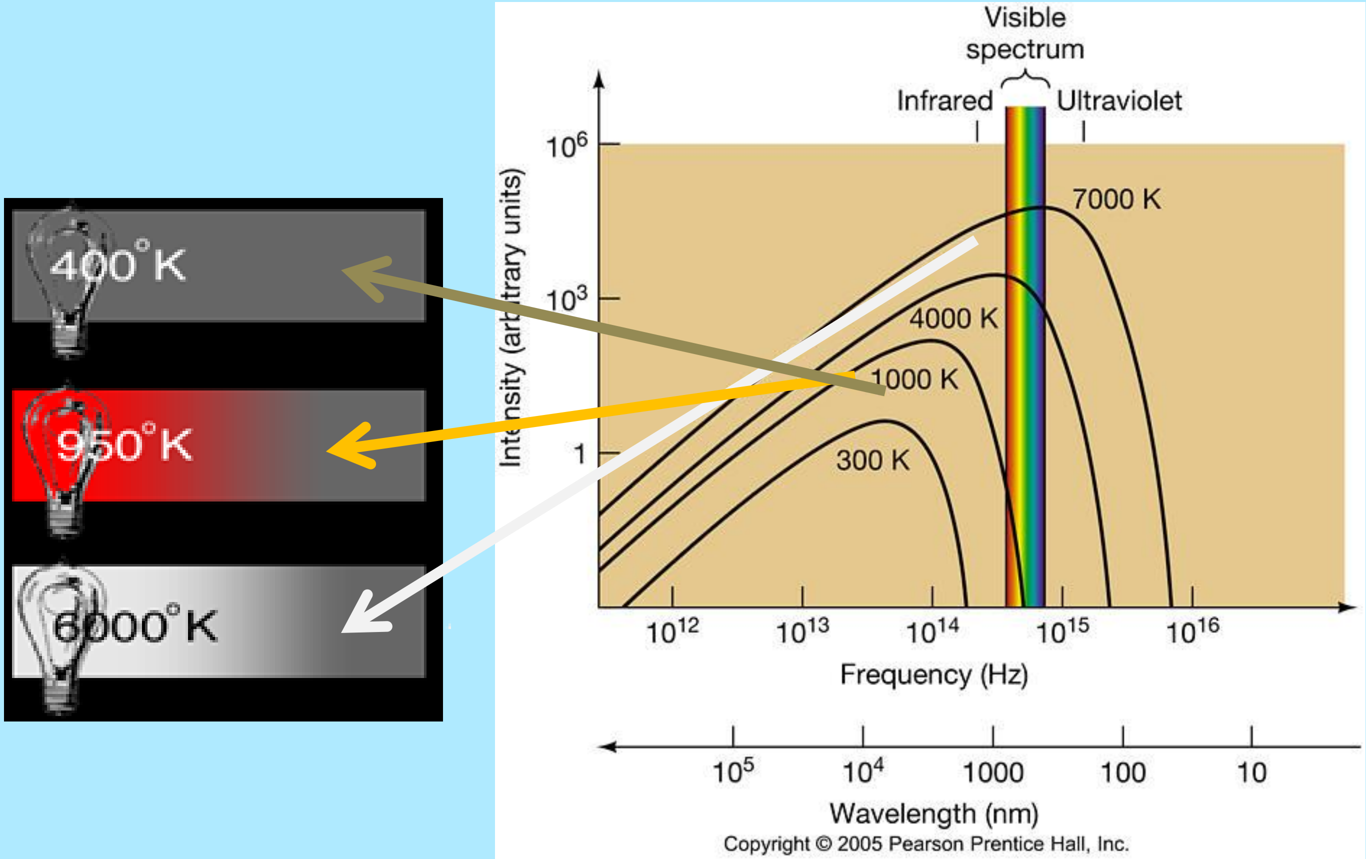
constante de Planck $h = 6{,}626076 \times 10^{-34}\, J.s$

Hipótese: a energia da radiação é quantizada

$$E = nhf\,, n = 1{,}2{,}3{,}4{,}\ldots$$

Metais Incandecentes
(Kirchhoff, 1859**)**

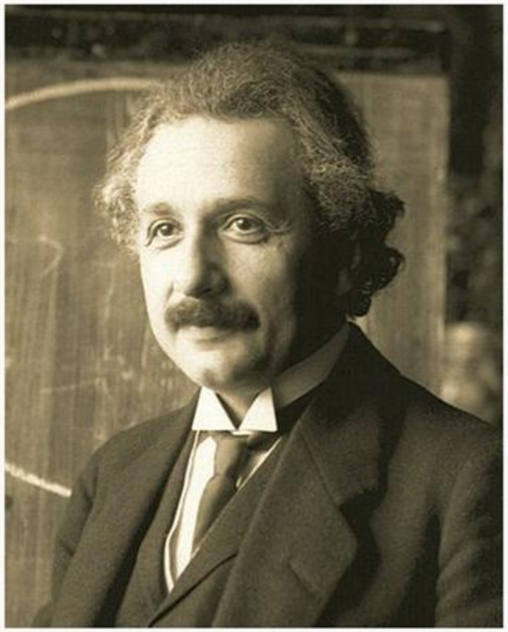


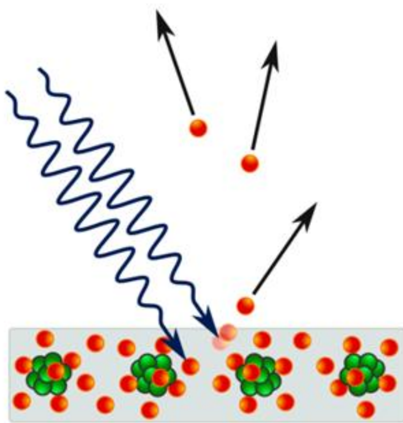


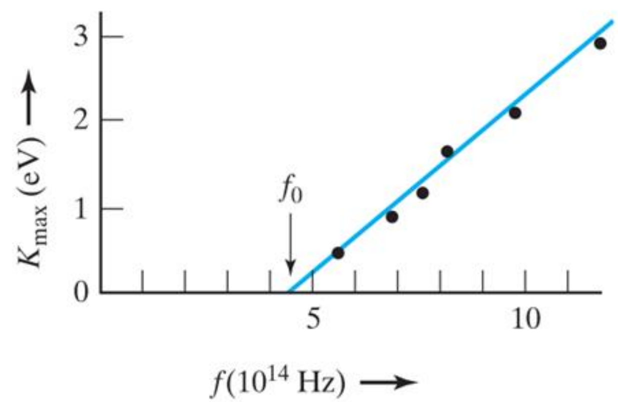
Corpos quentes (espectro)

Efeito fotoelétrico (Einstein 1905(Nobel 1921)): propõe uma teoria corpuscular para a luz – fóton

Albert Einstein







Onda de luz se comporta como partículas: fóton (quantum de luz)

$$E = hf = \frac{h}{2\pi} 2\pi f = \hbar\omega$$

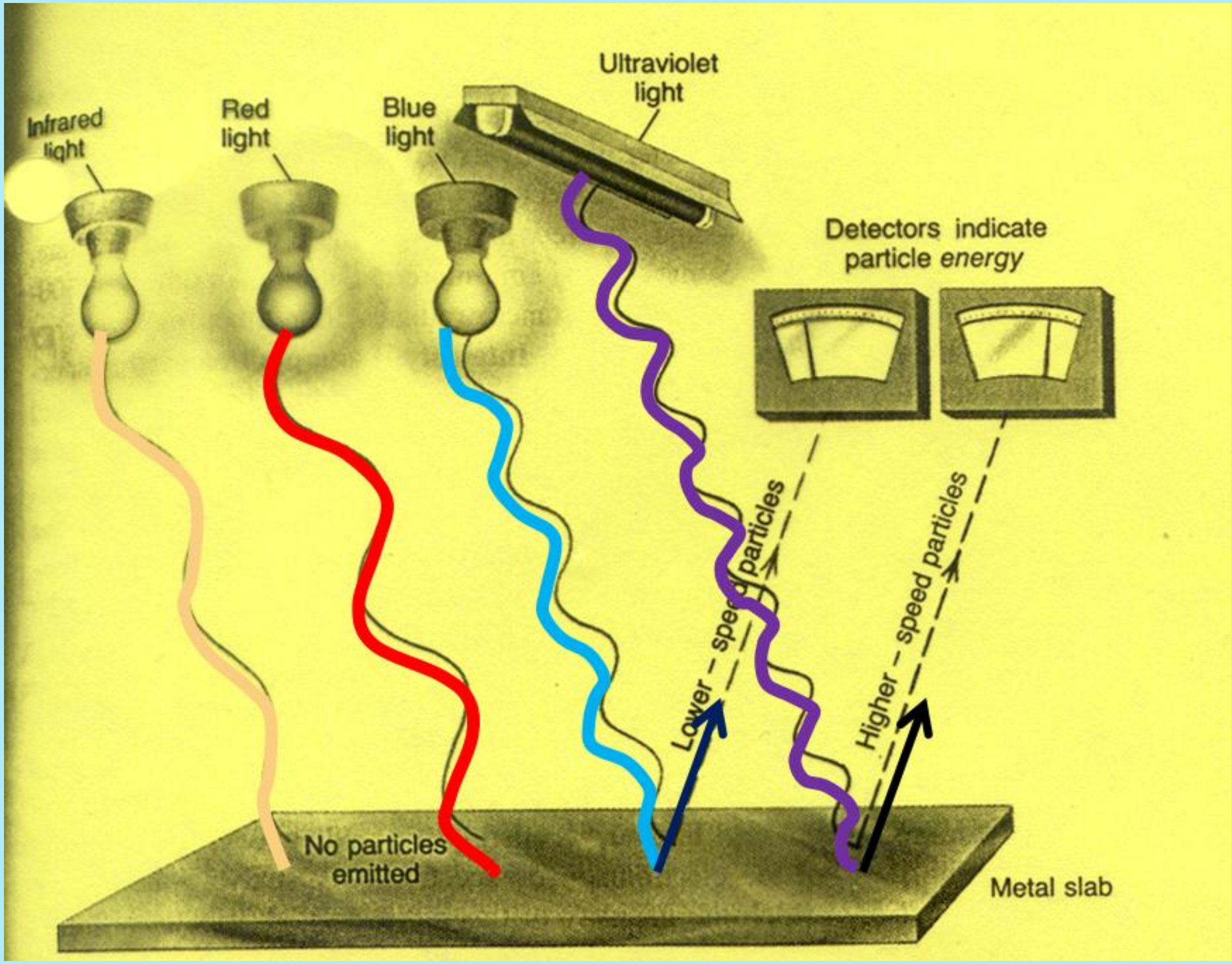
$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

Efeito Fotoelétrico (Hertz, 1887)

Maior FREQUÊNCIA da luz incidente

⬇

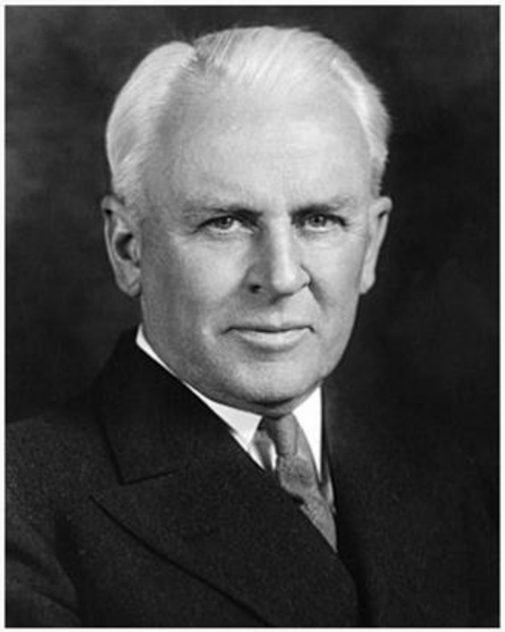
Maior ENERGIA dos elétrons ionizados

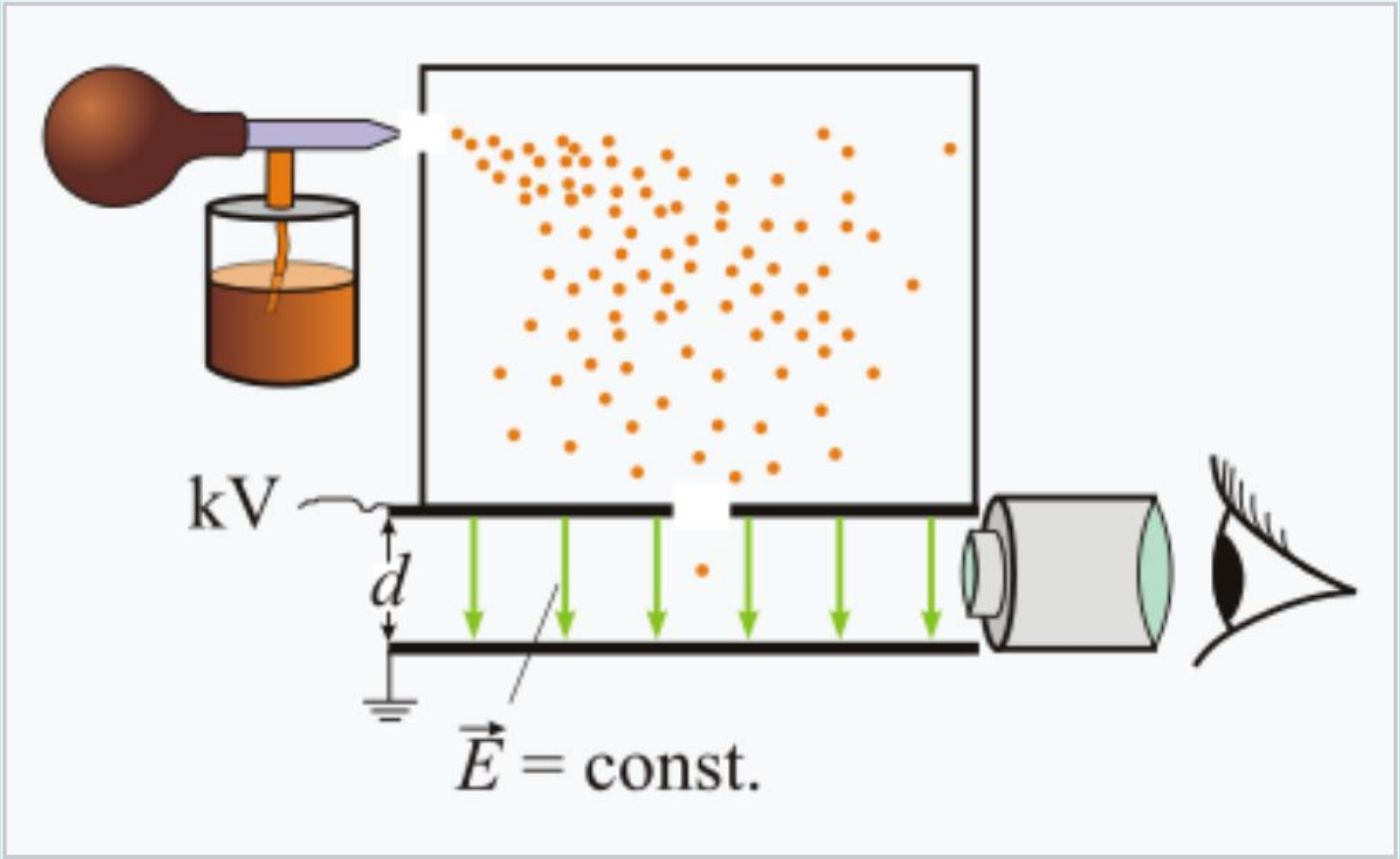


Robert Millikan 1911 (Nobel 1923): carga do elétron

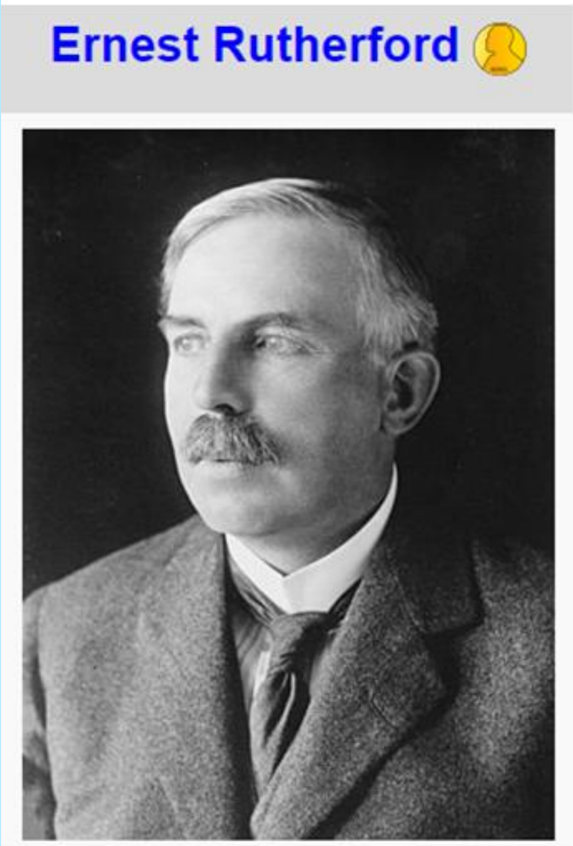
$$e = -1{,}602 \times 10^{-19}\ \text{C}$$

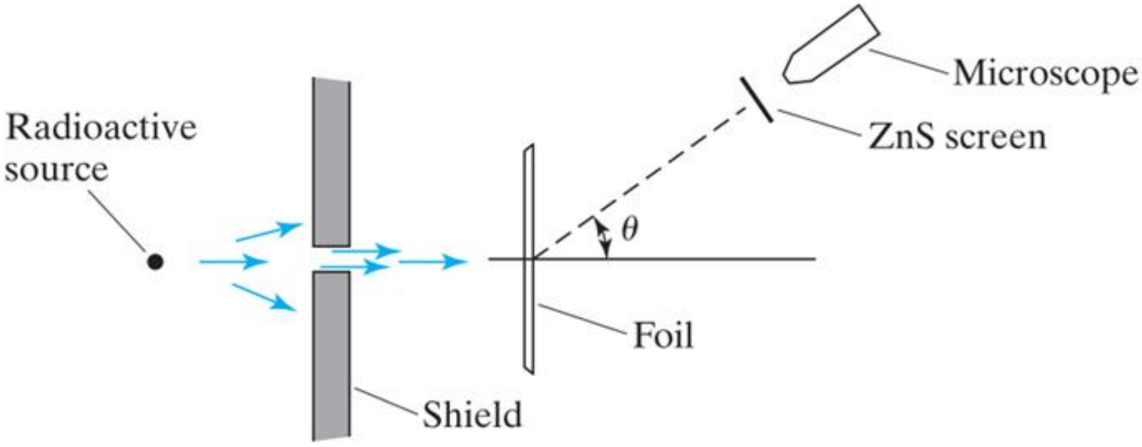
Robert Andrews Millikan

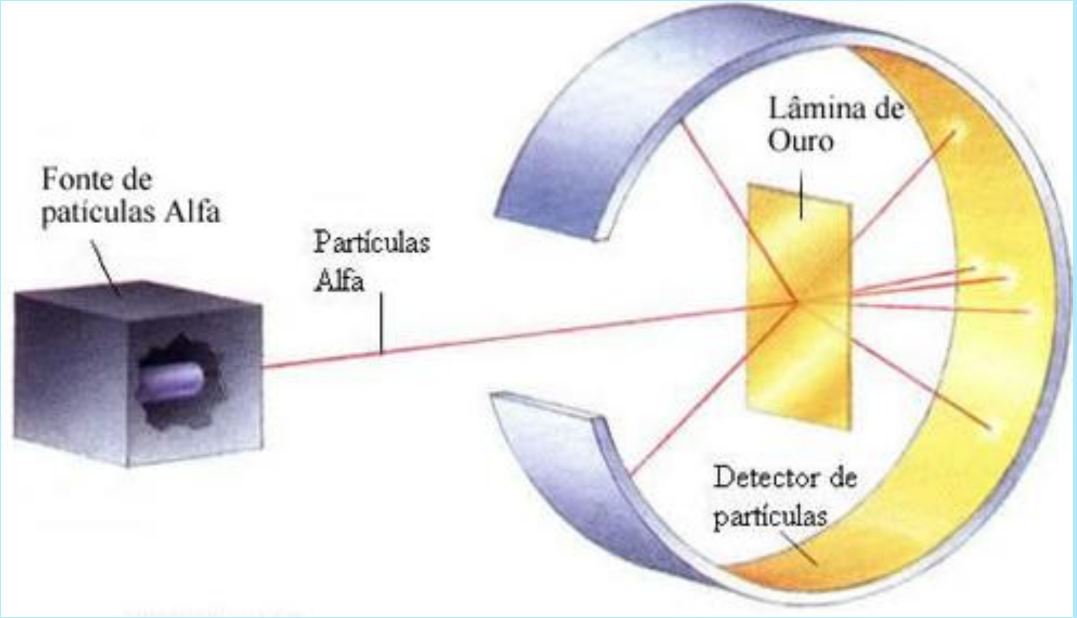



kV
d
$\vec{E}$ = const.

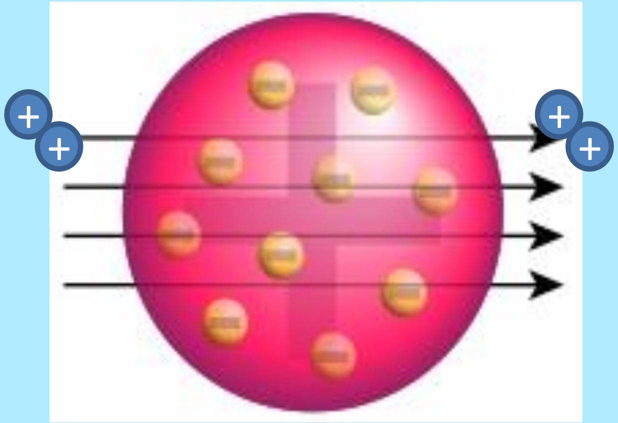
Ernest Rutherford (Nobel Química 1908) núcleo atômico, Modelo planetário do átomo, aluno de J. J. Thompson



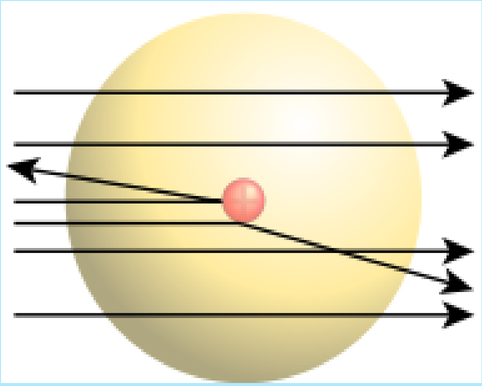




Esperado

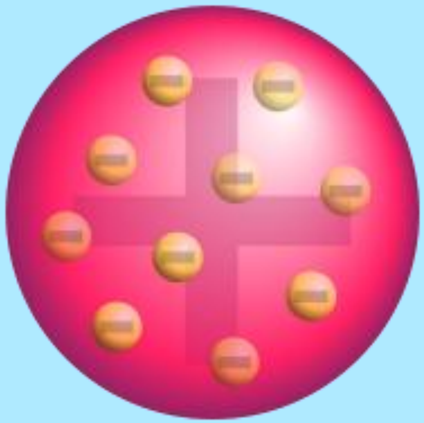


Observado



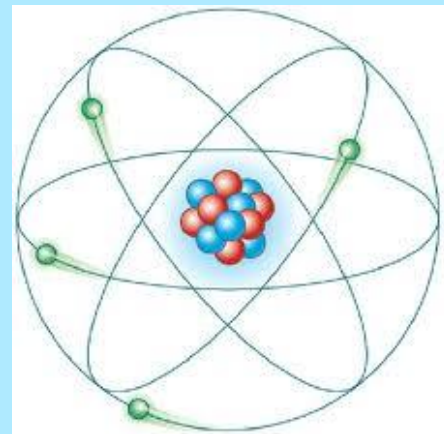
Descoberta do
Núcleo atômico (1911)

J.J. Thompson



Átomo
Estático
(1904)

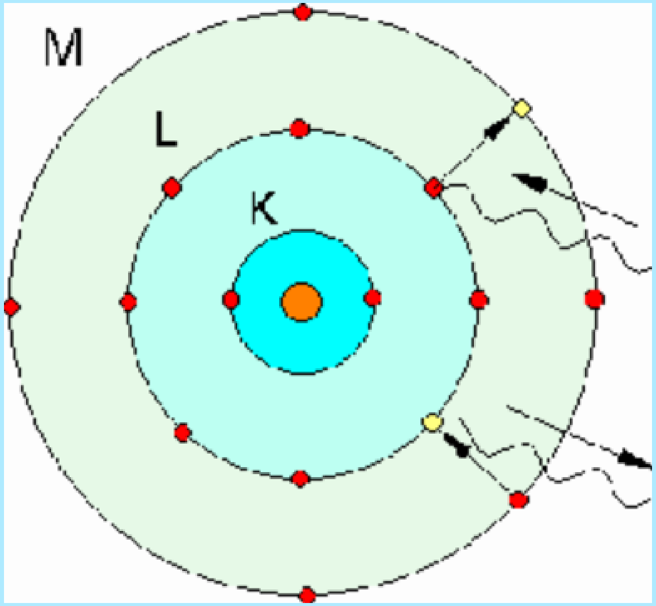
Ernest Rutherford



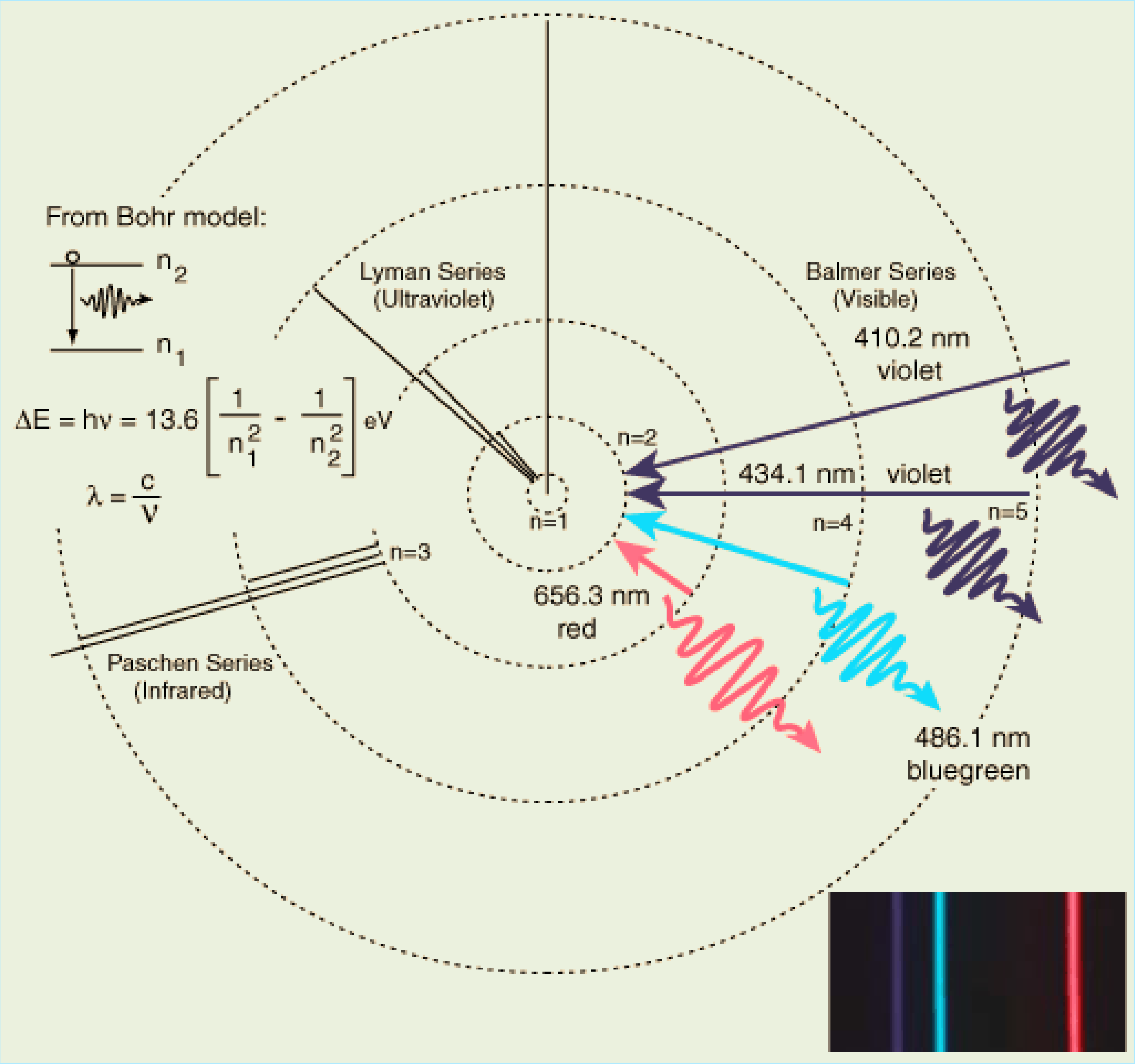
Átomo
Dinâmico (1911)
(órbitas eletrônicas)

Niels Bohr (Nobel 1922) – átomo de Bohr

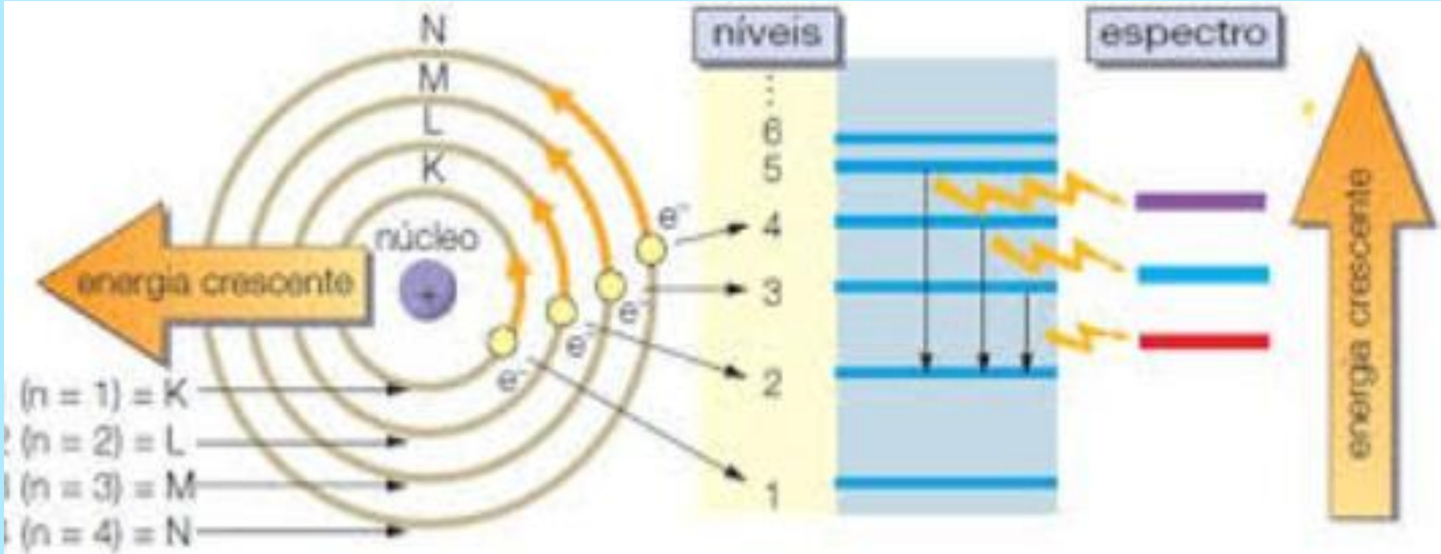
quantização do momento angular → órbitas estáveis

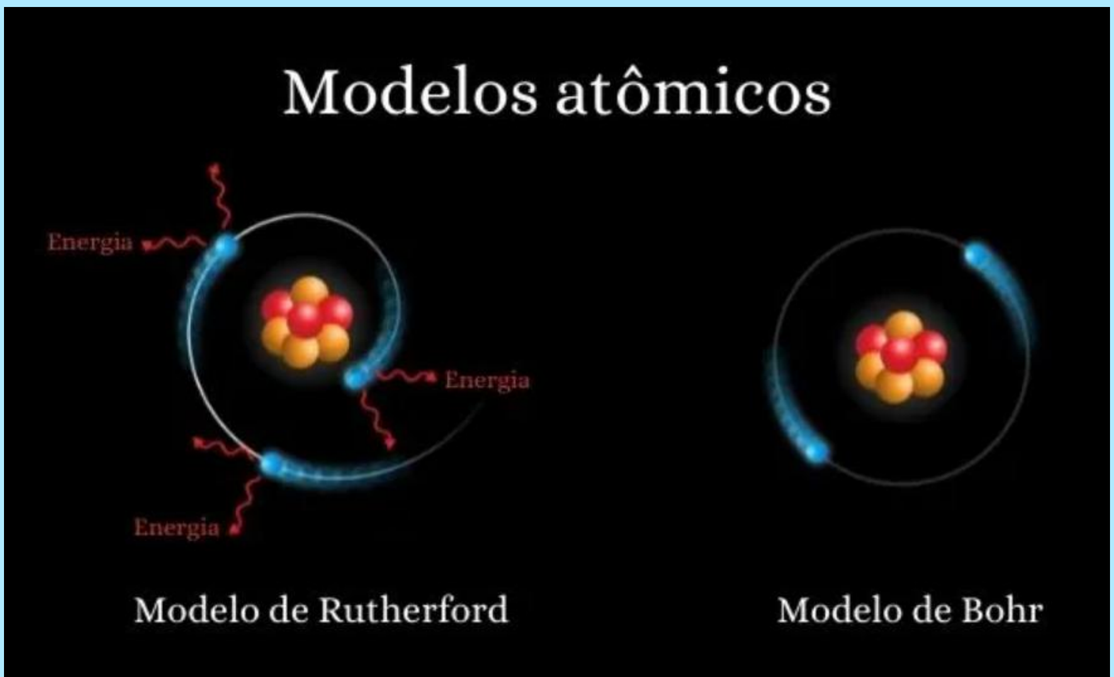


Postulado: $L = n\hbar, n = 1,2,3,4,\ldots$

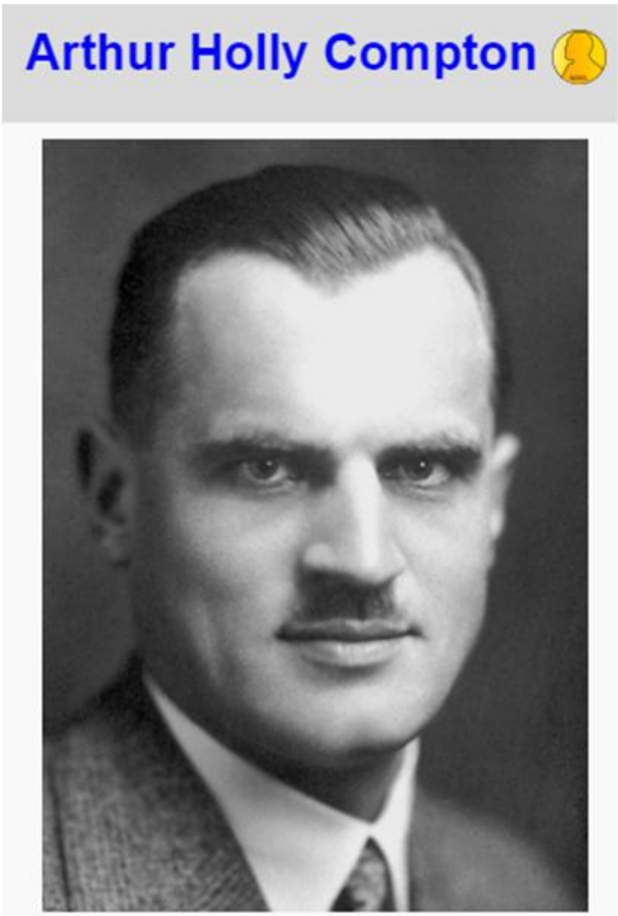


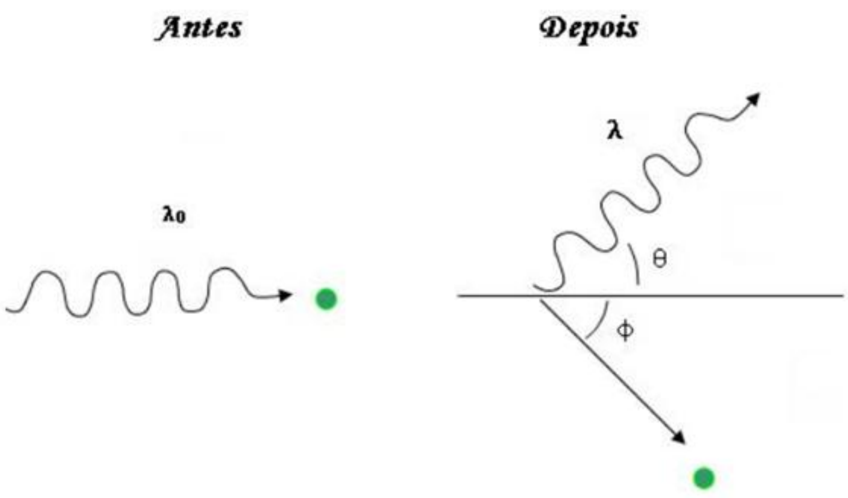
From Bohr model:
n_2
n_1
$\Delta E = h\nu = 13.6\left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right]$ eV
$\lambda = \frac{c}{\nu}$
Lyman Series
(Ultraviolet)
Balmer Series
(Visible)
410.2 nm
violet
n=2
434.1 nm
violet
n=1
n=4
n=5
n=3
656.3 nm
red
Paschen Series
(Infrared)
486.1 nm
bluegreen


N
M
L
K
núcleo
energia crescente
e^-
(n = 1) = K
(n = 2) = L
(n = 3) = M
(n = 4) = N
níveis
6
5
4
3
2
1
espectro
energia crescente


Modelos atômicos
Energia
Energia
Energia
Modelo de Rutherford
Modelo de Bohr

Compton em 1923 (Nobel 1927): espalhamento de raios X por elétrons. Mostrou que a interação pode ser interpretada como a colisão de um fóton e um elétron.

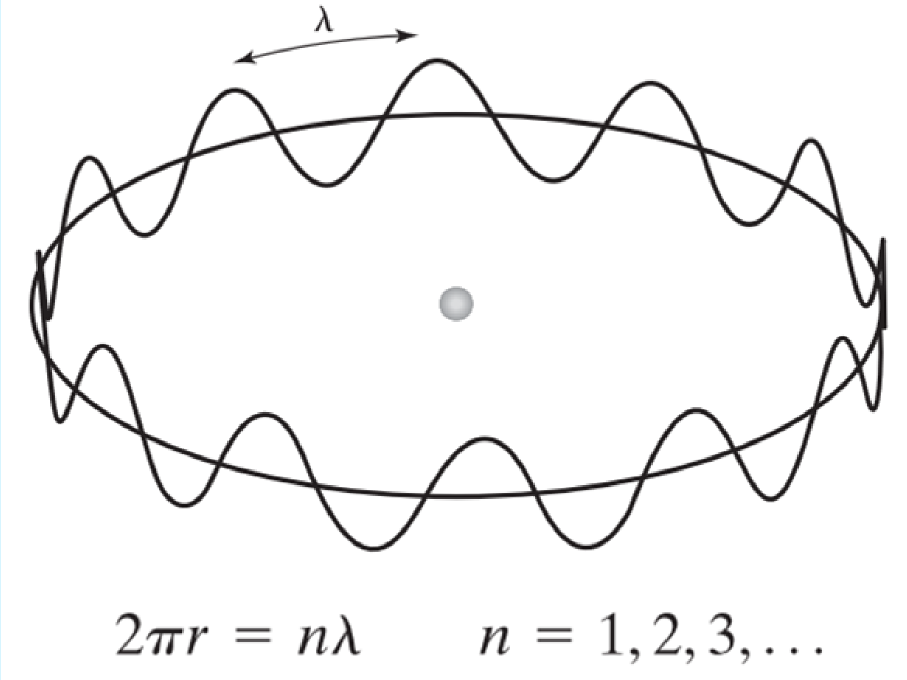




De Broglie 1924 (Nobel 1929)

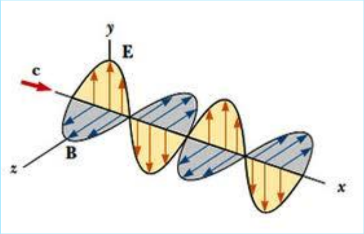
hipótese dualidade onda-partícula para partículas

$$E = hf = \frac{h}{2\pi} 2\pi f = \hbar\omega, \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$



Einstein (1905)–

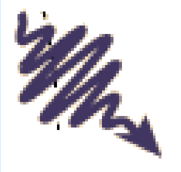
Luz é “partícula” (quanta=fóton)



partícula

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$$

onda



Louis de Broglie (1924)

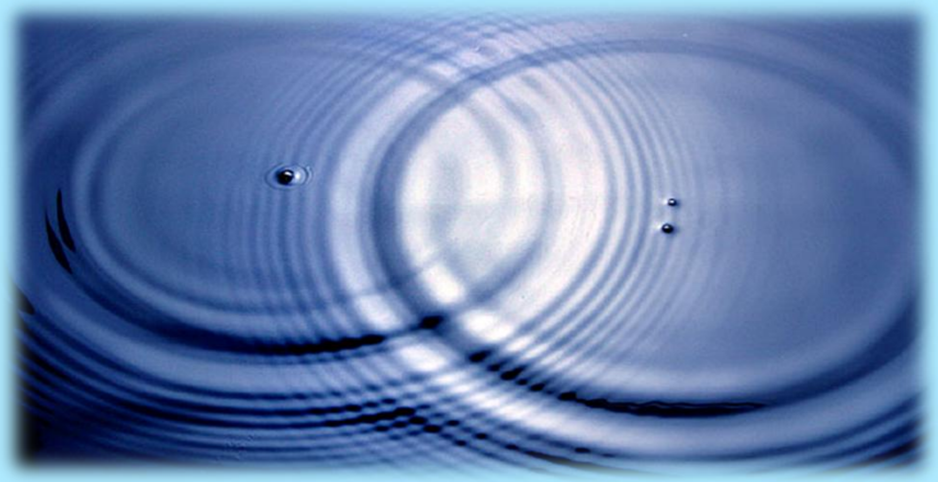
elétron é onda

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$$

Louis de Broglie
(1892-1987, Nobel 1929)

…Restava entender as órbitas de Bohr:

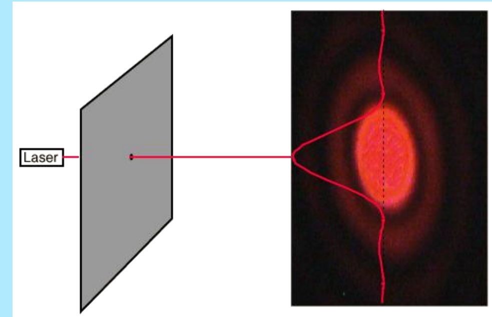
Natureza ondulatória
da partícula



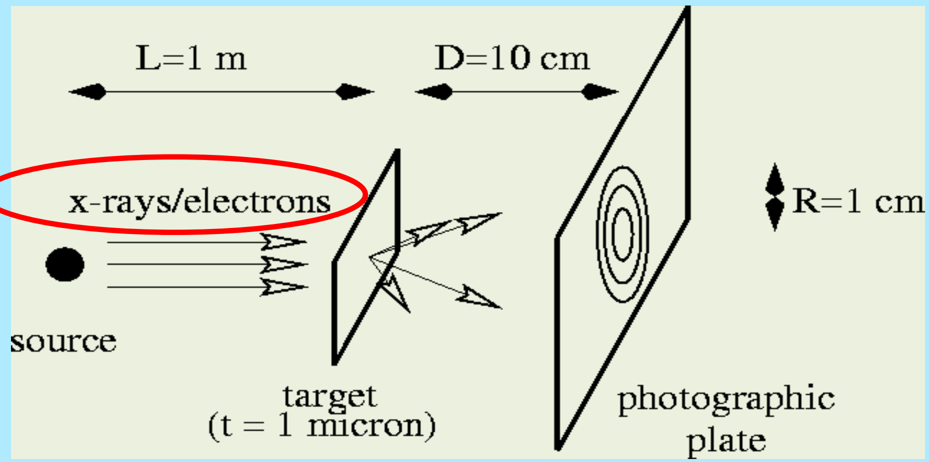
Louis de Broglie (1924)

- elétron é onda

Difração da luz (onda)



G.P. Thompson – (1928)



Difração do Elétron (onda)

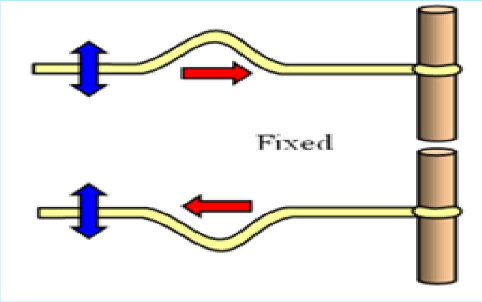
Tal pai tal filho ...

G.P. Thompson filho de J. J. Thompson
ganhou o prêmio Nobel em 1937

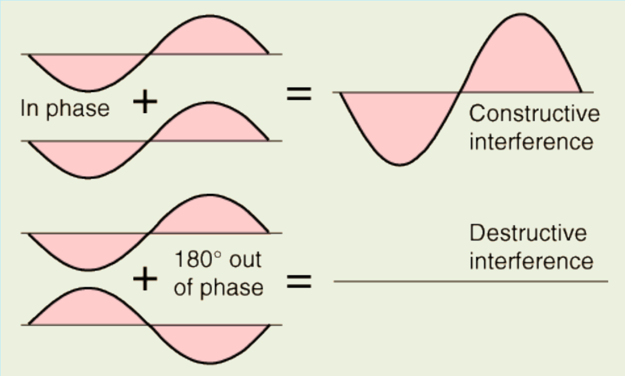
O pai ganhou o prêmio Nobel (1906)descobrindo o elétron (partícula)
O filho ganhou o prêmio Nobel mostrando o comportamento ondulatório do elétron

Um pouco de ondas…

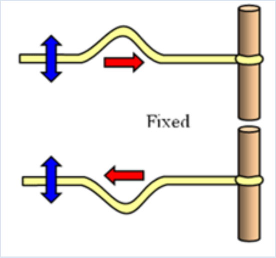
Ondas
(REFLEXÃO)



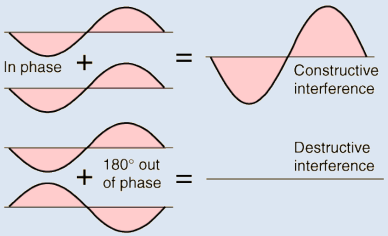
Ondas
(INTERFERÊNCIA)



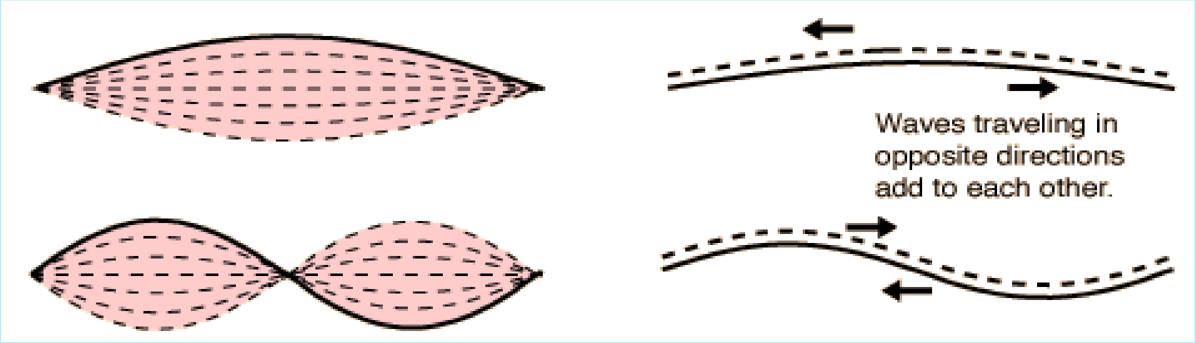
Um pouco de ondas…



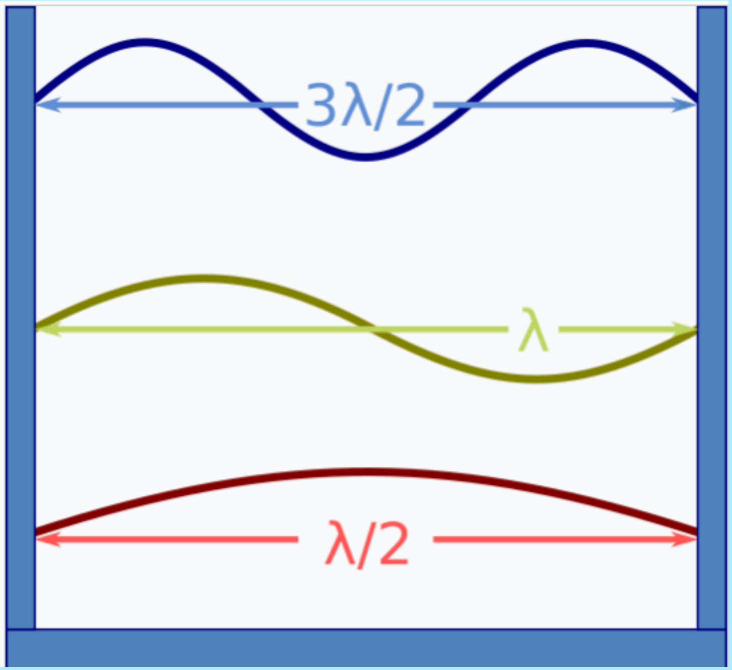
+

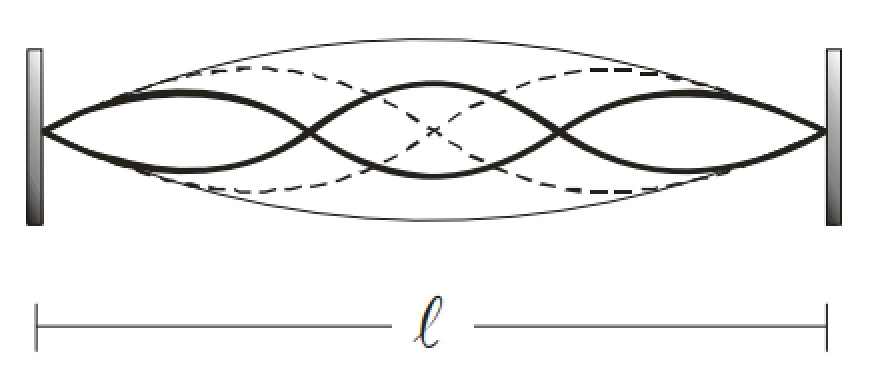


Ondas ESTACIONÁRIAS



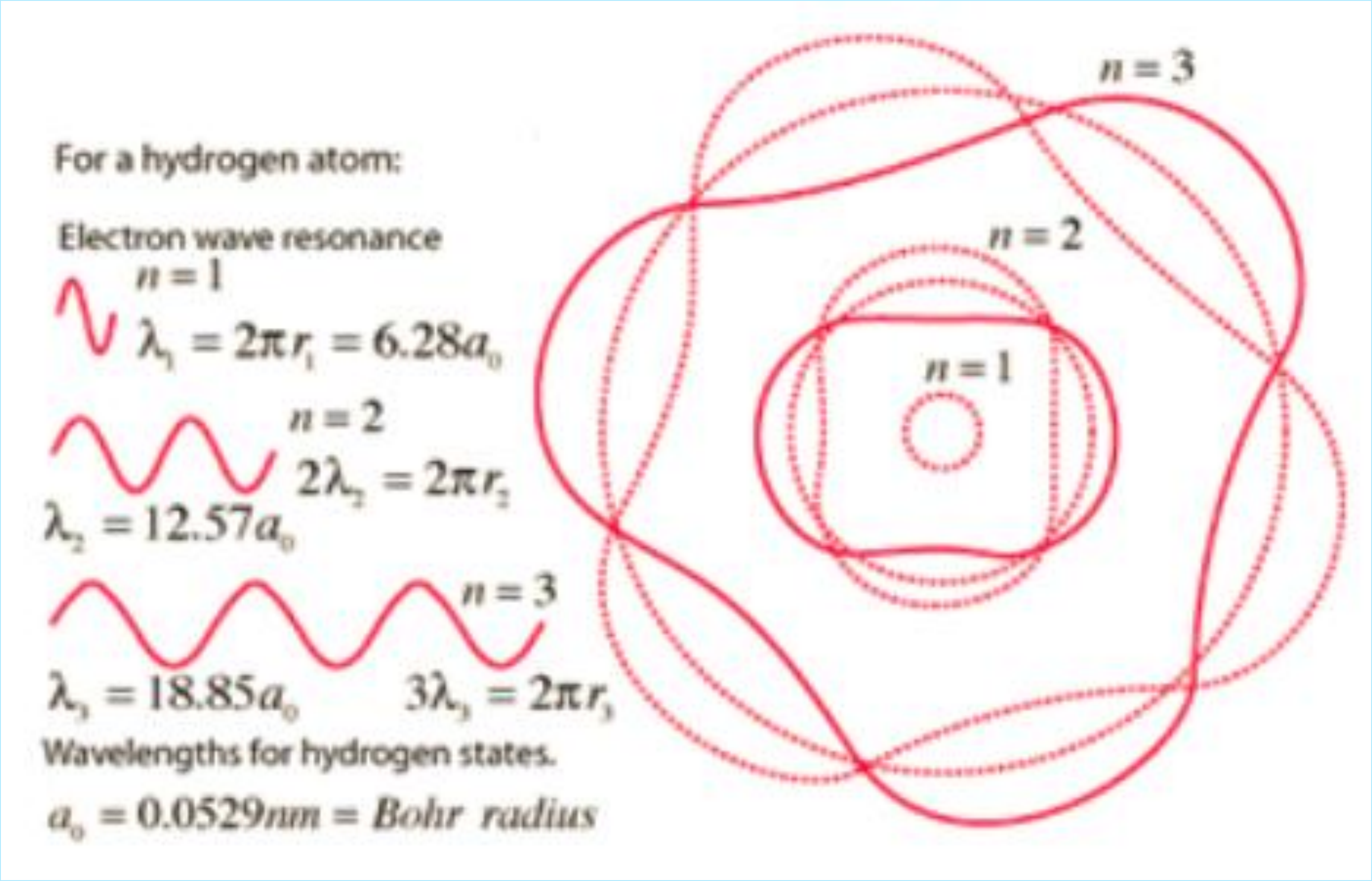
Ondas estacionárias





$$l = n\frac{\lambda}{2}, n = 1, 2, 3, \ldots$$

ondas estacionárias de de Broglie nas órbitas de Bohr

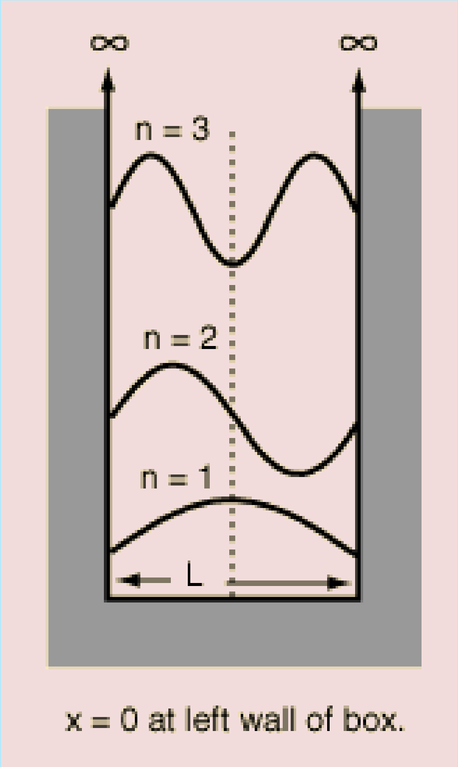


O Princípio da Correspondência

Enunciado de Bohr (1923)

1. *As previsões da teoria quântica para o comportamento de qualquer sistema físico deve corresponder às previsões da física clássica no limite em que os números quânticos que especificam o estado do sistema se tornem muito, muito grandes.*

Qual a interpretação desta onda (elétron)?



$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi$$

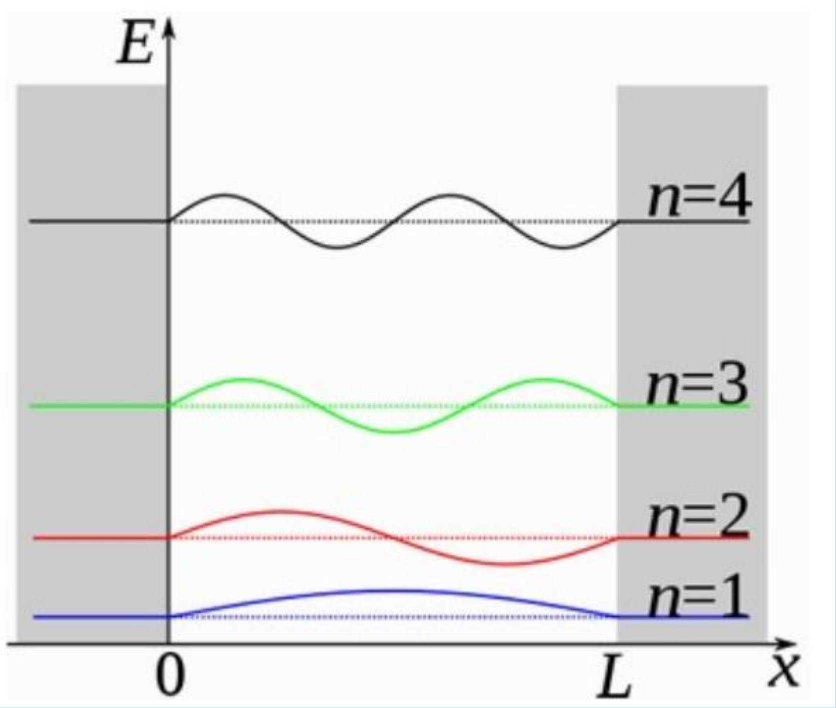
Erwin Schrödinger
(1887-1961, Nobel 1933)

$probabilidade\ de\ encontrar\ a\ partícula\ (elétron)$

$entre\ x$ e $x + \Delta x$ é:

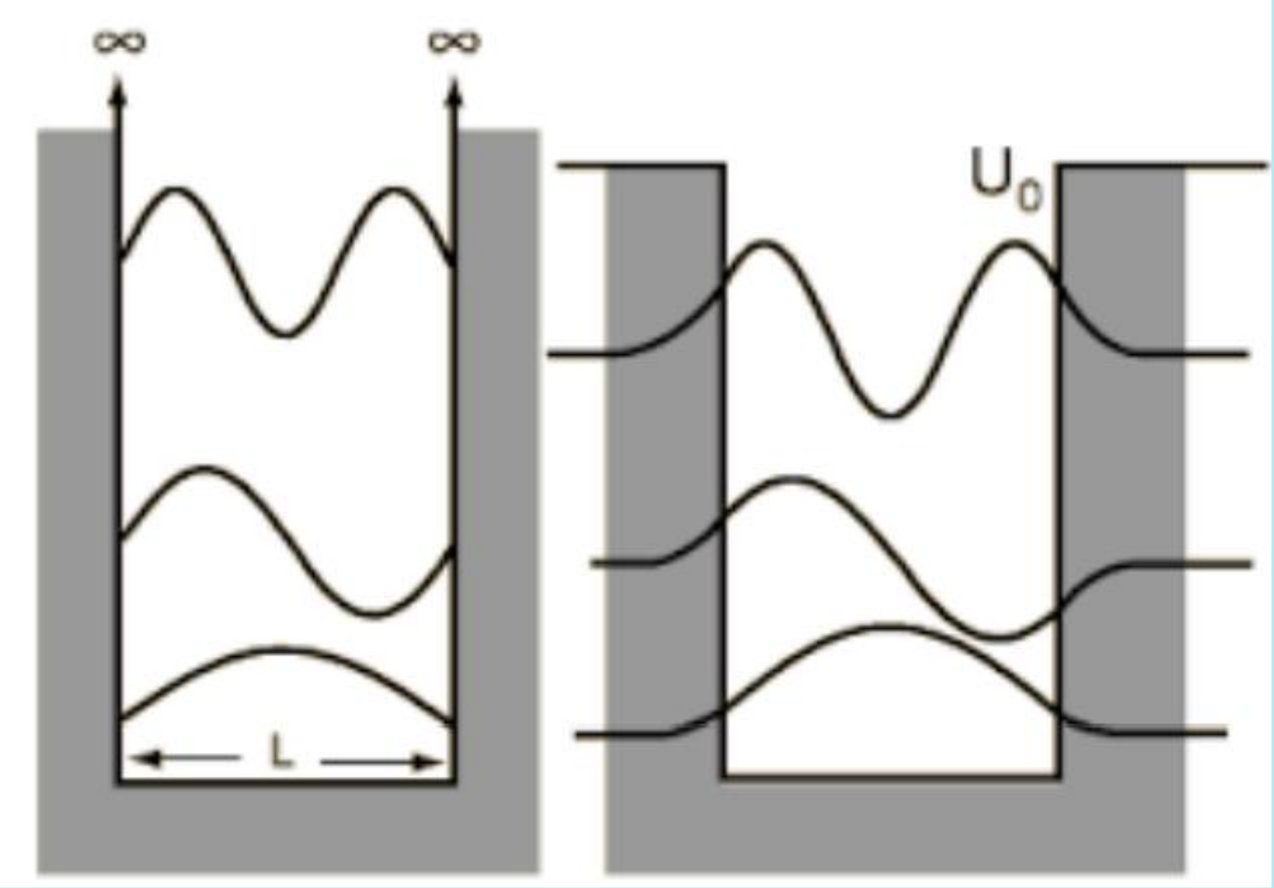
$$P(x) = |\psi(x)|^2\Delta x$$

Partícula em uma caixa com barreiras infinitas



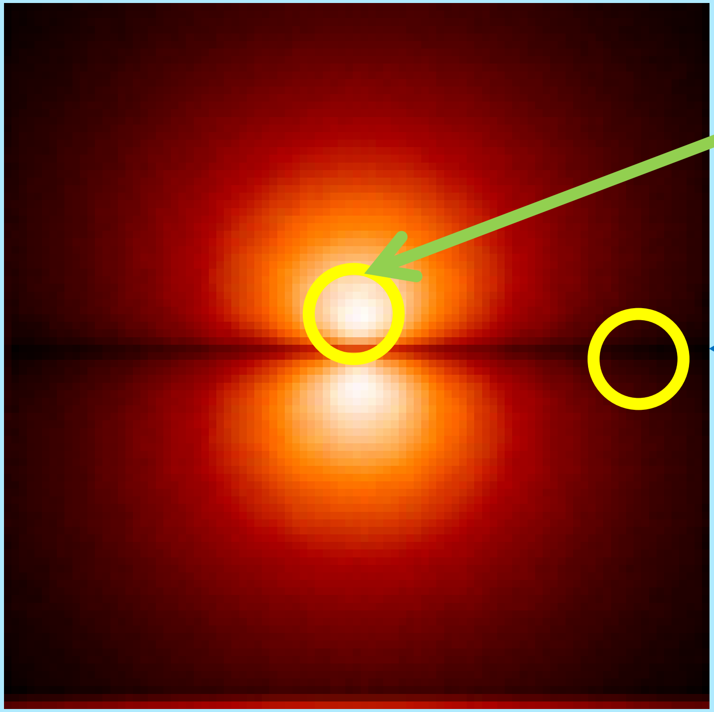
$$E_n = n^2h^2/8mL^2$$

$$\psi(x) = A \text{ sen } (n\pi x/L)$$


∞
∞
L
U_0

Qual a interpretação desta onda (elétron)?

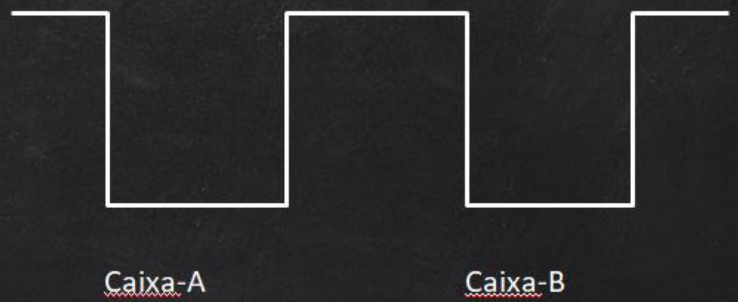
Orbital 2p



MAIOR probabilidade
de encontrar
o elétron aqui

MENOR probabilidade
de encontrar
o elétron aqui

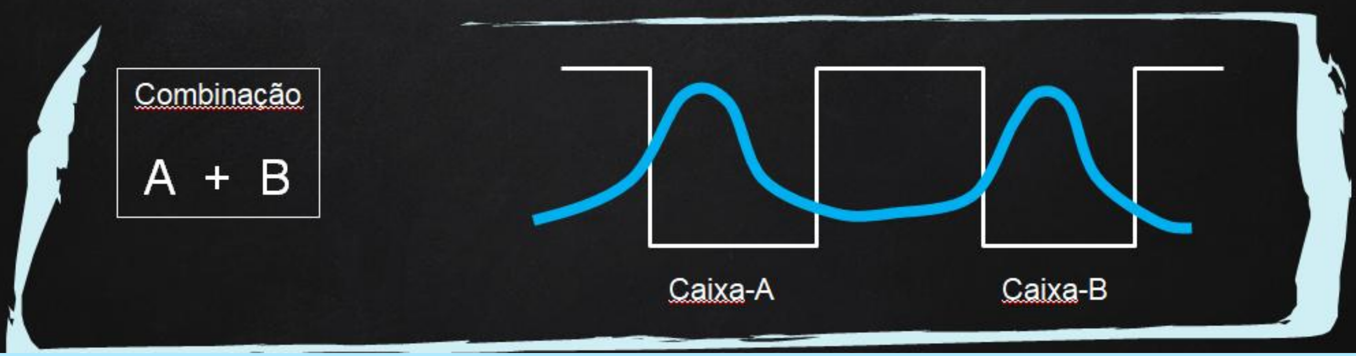
Comportamento quântico: Partícula numa caixa dupla



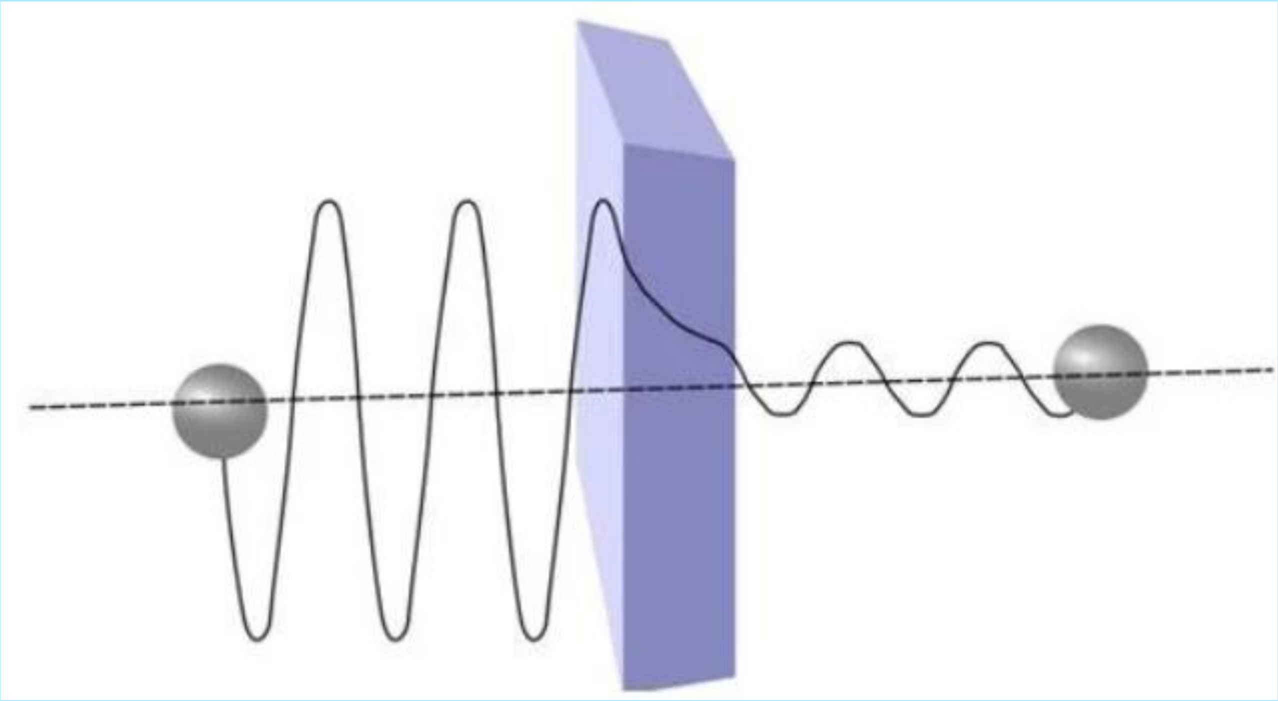
Estados “clássicos”

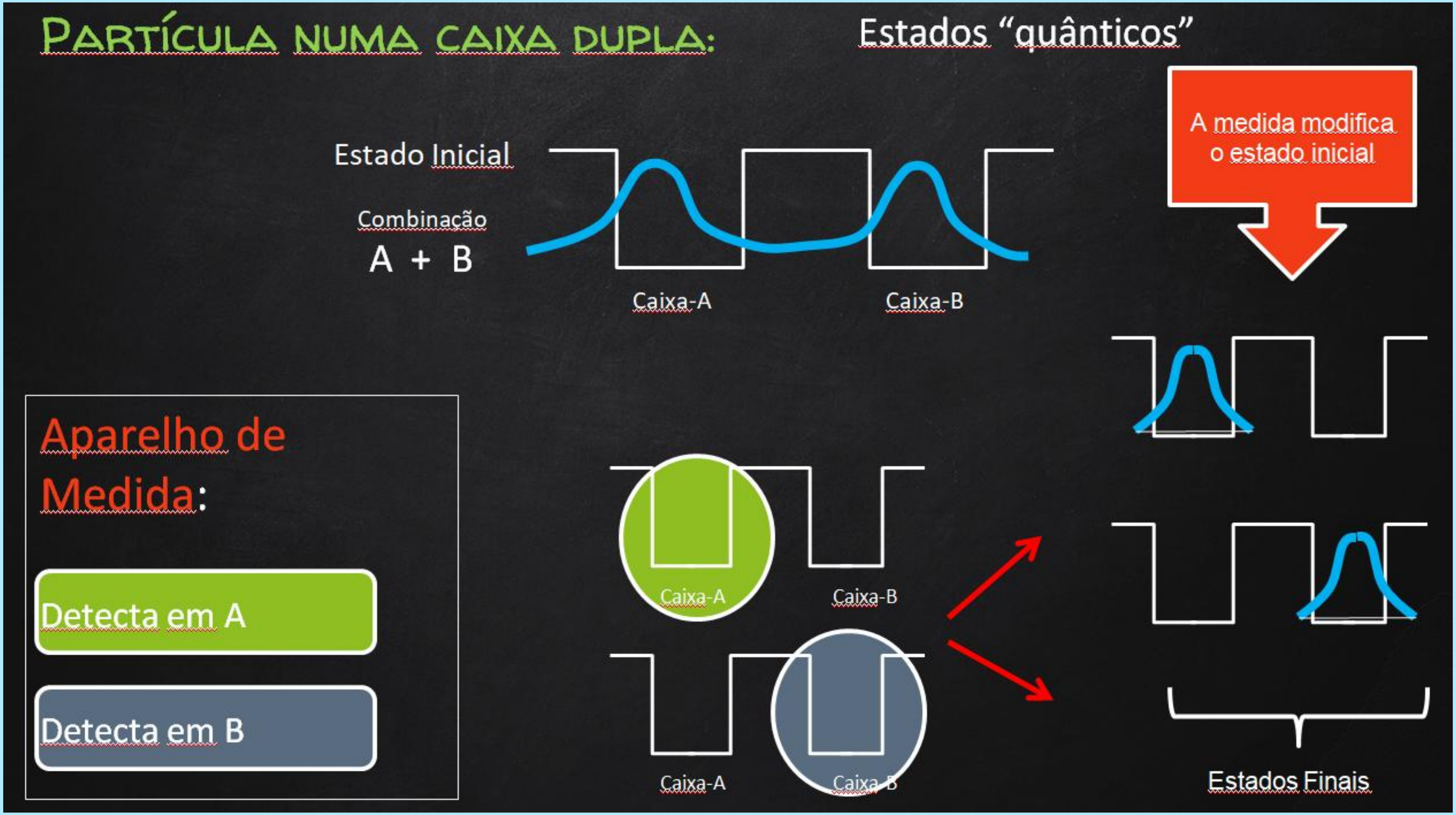
Comportamento quântico:
Partícula numa caixa dupla

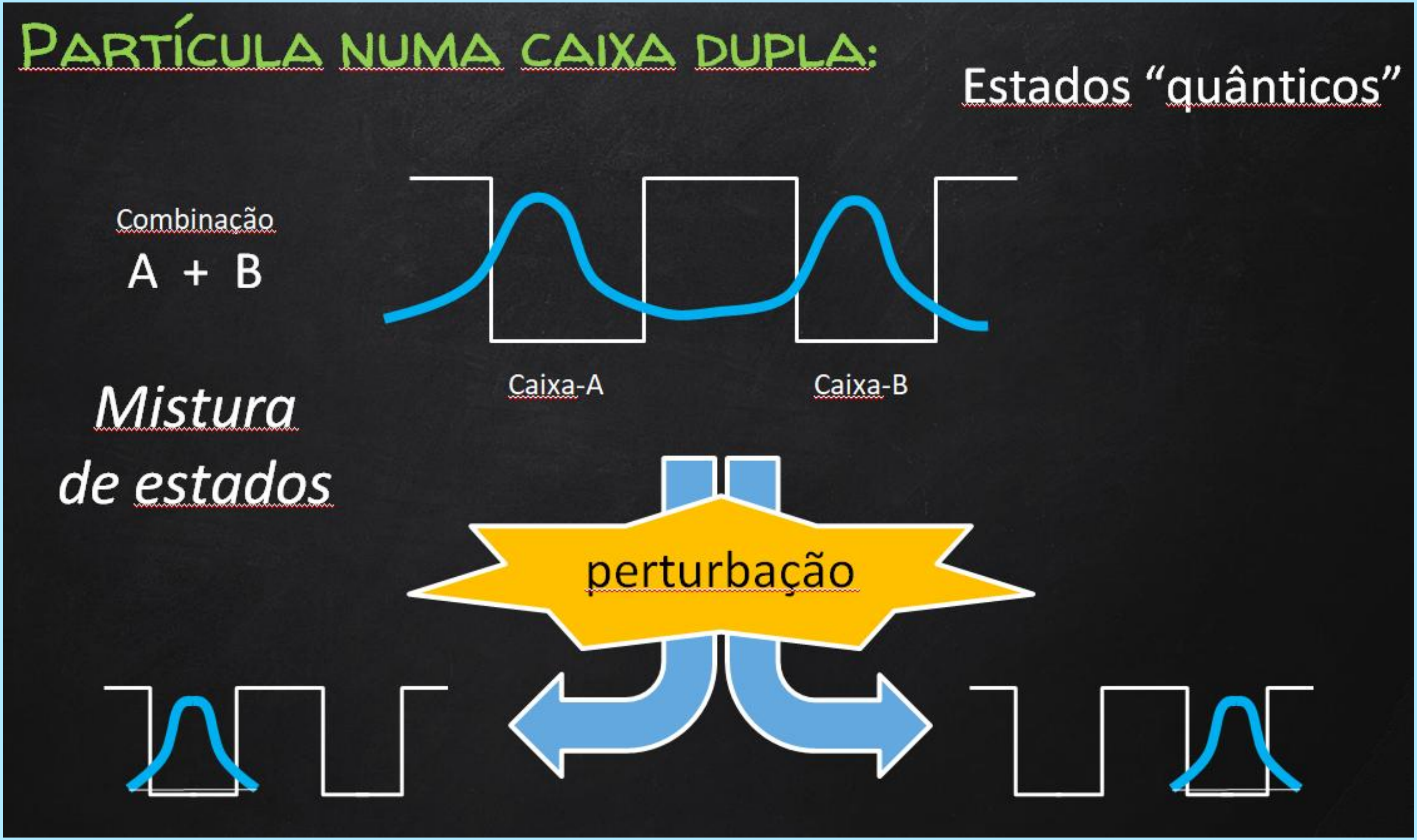
Estados "quânticos"



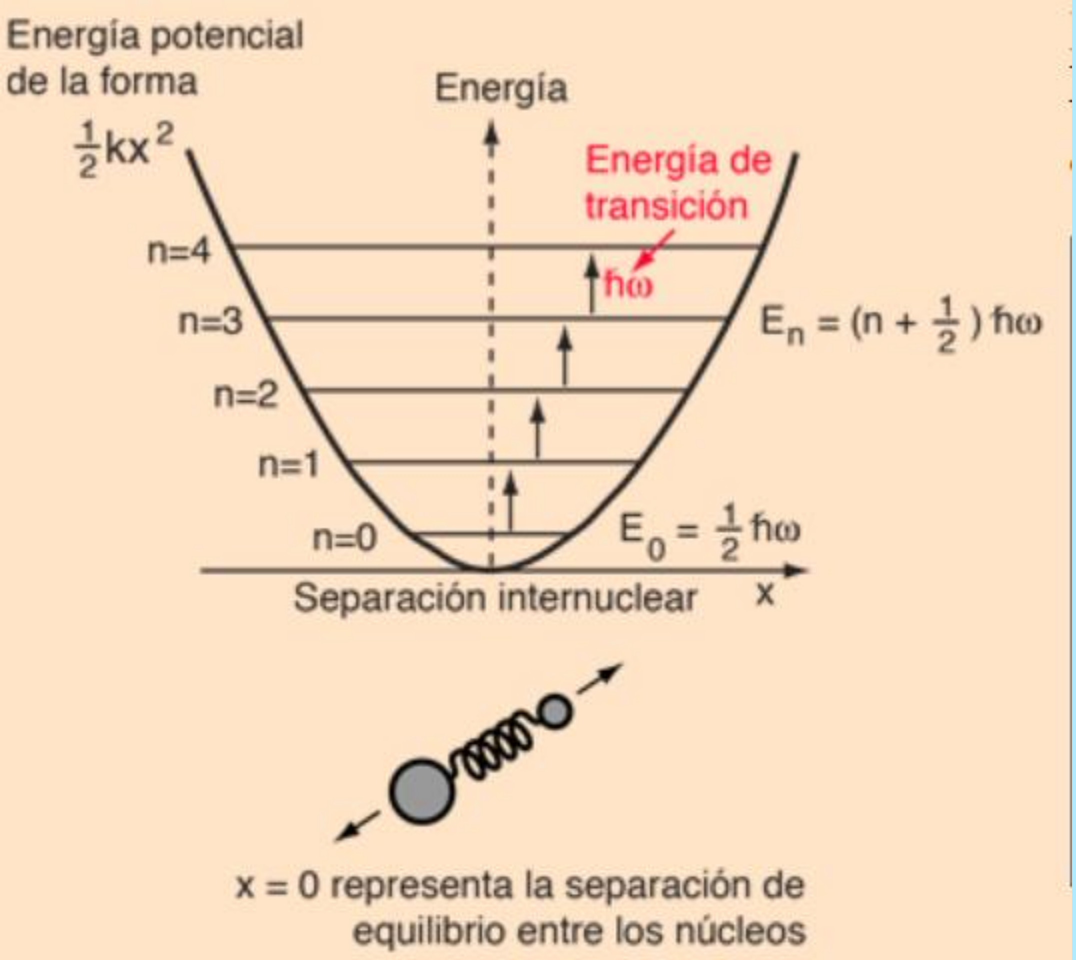
Tunelamento quântico

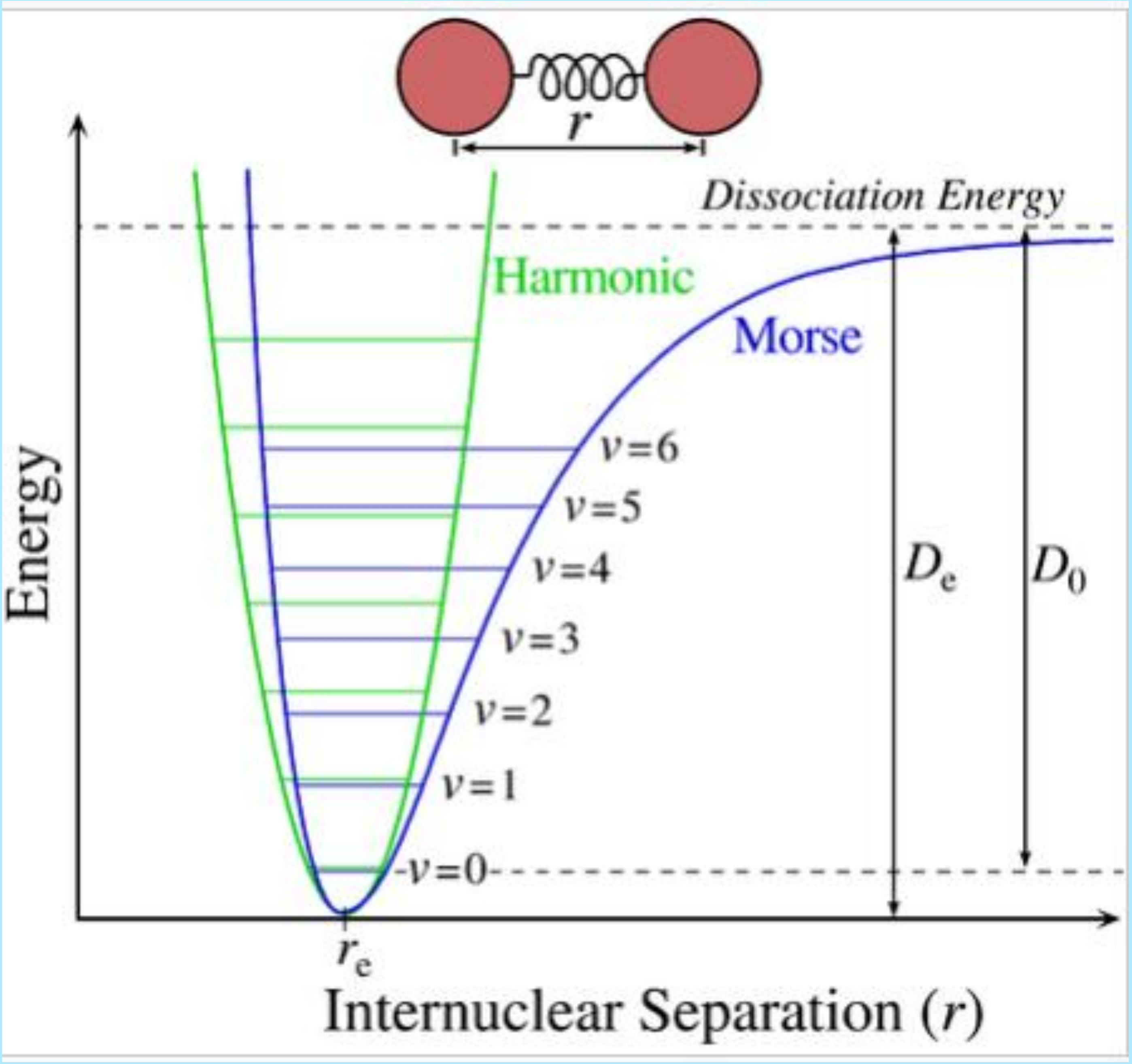



PARTÍCULA NUMA CAIXA DUPLA:
Estados "quânticos"
A medida modifica o estado inicial
Estado Inicial
Combinação
A + B
Caixa-A
Caixa-B
Aparelho de Medida:
Detecta em A
Detecta em B
Caixa-A
Caixa-B
Caixa-A
Caixa-B
Estados Finais


Partícula numa caixa dupla:
Estados “quânticos”
Combinação
A + B
Caixa-A
Caixa-B
Mistura
de estados
perturbação

Oscilador harmônico





r
Dissociation Energy
Harmonic
Morse
v=6
v=5
v=4
v=3
v=2
v=1
v=0
D_e
D_0
Energy
r_e
Internuclear Separation (r)