

Um passeio pelos conceitos de Mecânica Quântica

Alexandre Reily Rocha

alexandre.reily@unesp.br

@iftunesp

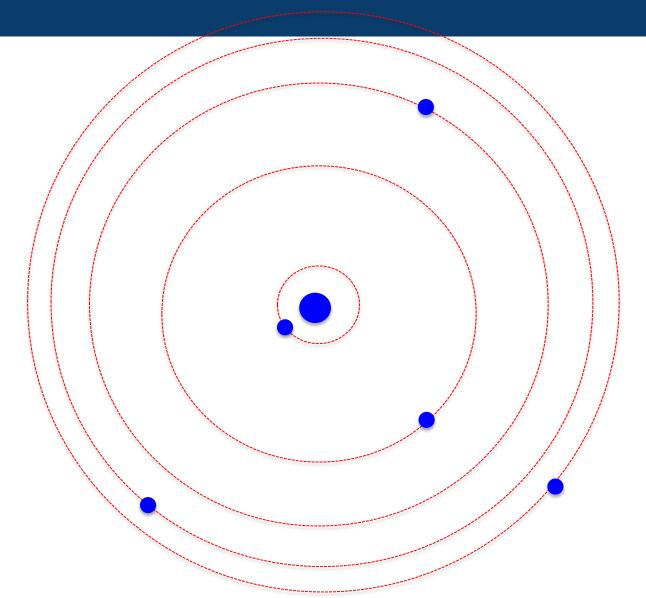
@alexandrereily

Retomando a aula passada



O átomo de Rutherford

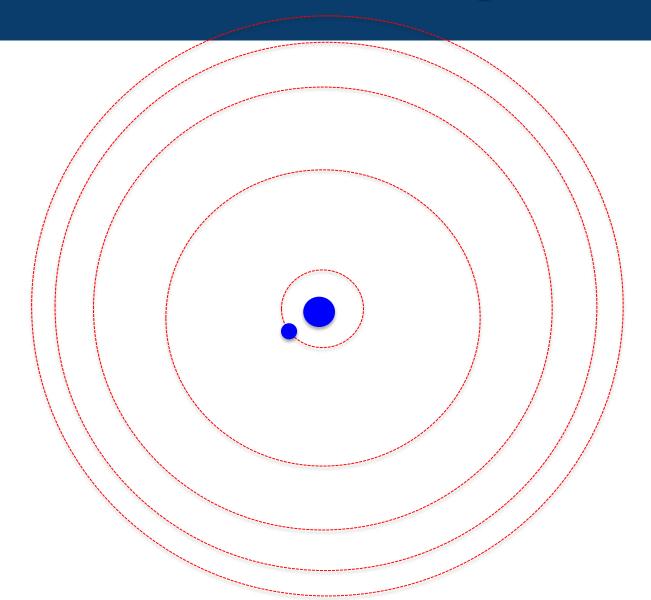




Elétron girando em torno do núcleo

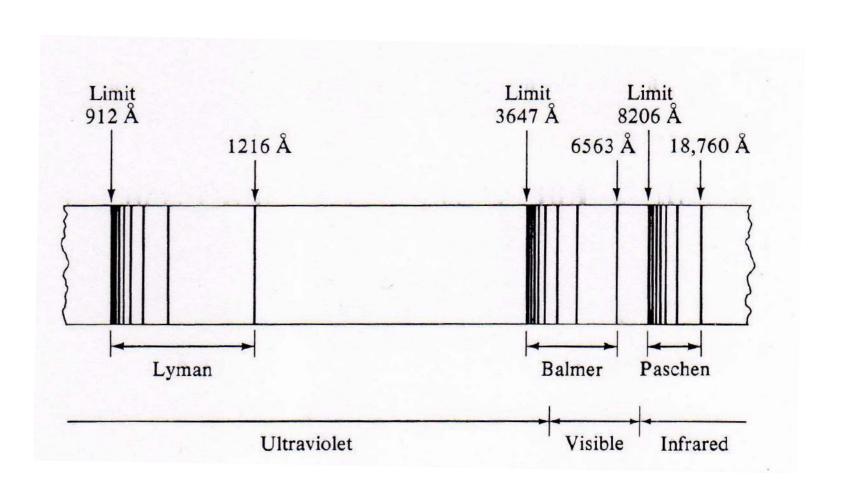
Simplificando: O átomo de hidrogênio





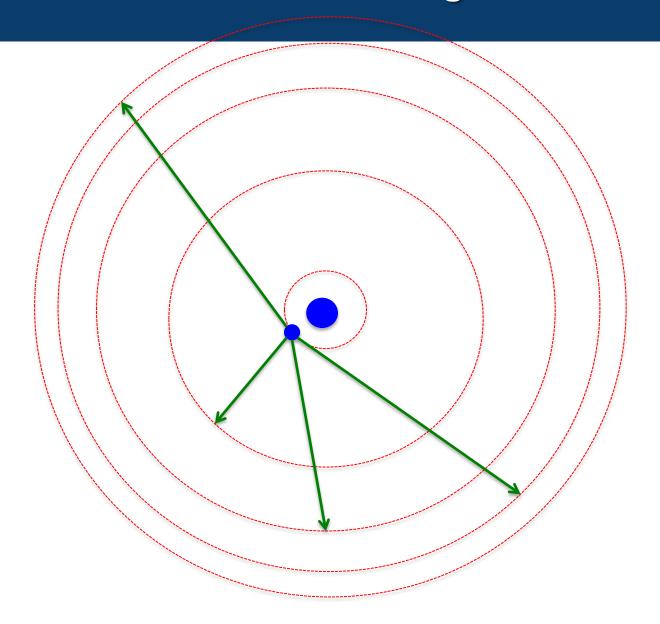
Transições dos Elétrons





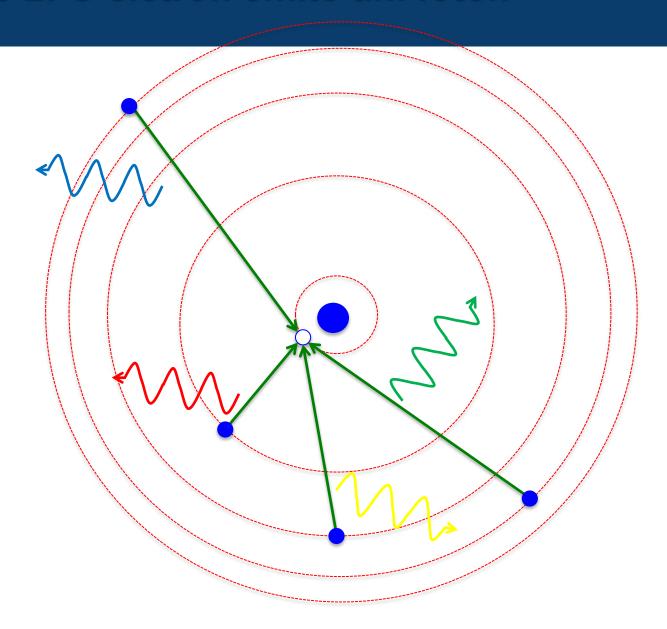
Passo 1: O elétron recebe energia





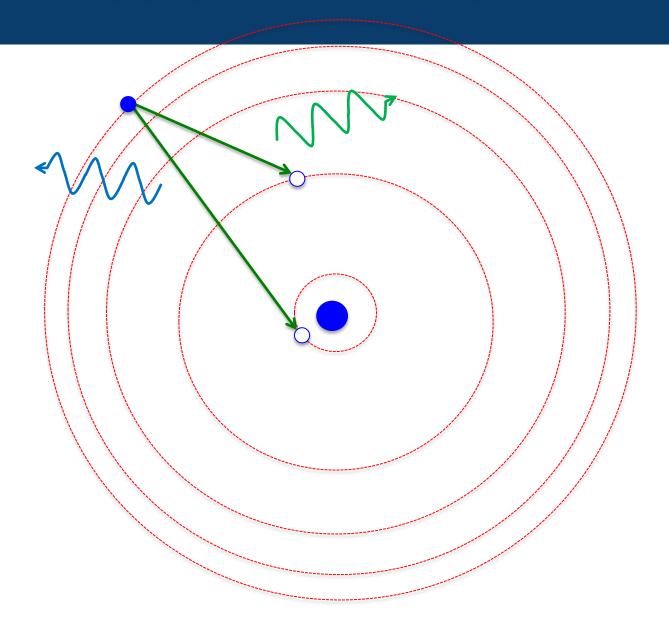
Passo 2: O elétron emite um fóton





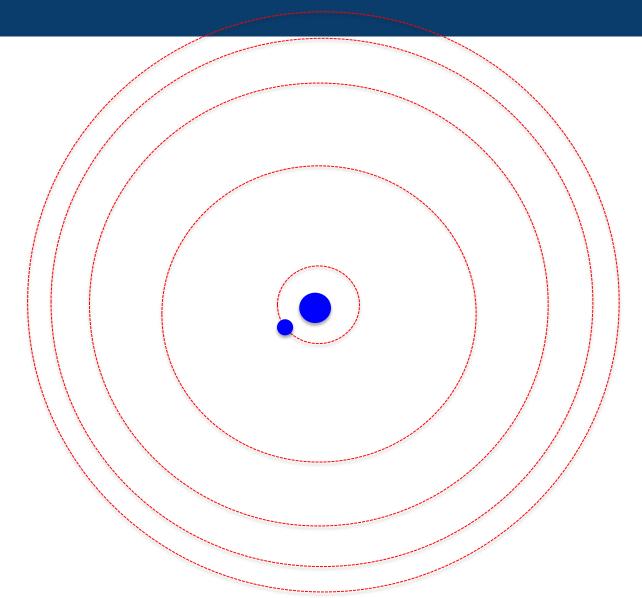
Passo 2: O elétron emite um fóton





O átomo de Bohr





Elétron girando em torno do núcleo

Qual é a grandeza constante



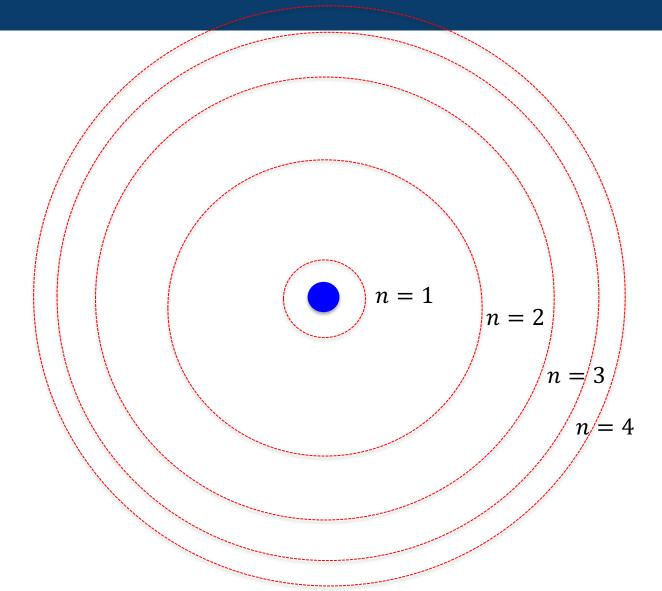
O momento angular

$$L = mr^2 \omega$$

Quantizando

$$L=n\frac{h}{2\pi}$$

Simplificando: O átomo de hidrogênio



O átomo de Bohr: Transições

IFT - UNESP

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^22\hbar^2}\frac{1}{n^2}, n = 1, 2, 3, ...$$

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{mZ^2 e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$
 do fóton quando o elétron transita de um estado do recipro pero

Frequência de emissão estado de maior para outro de menor energia

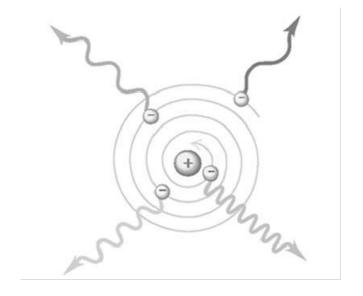
Mas Nem tudo são flores



Inconsistência com a teoria eletromagnética



- Elétrons em órbita circular deveriam irradiar, continuamente, ondas eletromagnéticas até cair no núcleo.
- Colapso atômico.



Voltando a Einstein



Radiação eletromagnética Dualidade onda-partícula

Onda ———— Partícula

fóton

Nem todo herói usa capa





Luis V. de Broglie (1924)

Dualidade pra todo mundo



Elétron (partícula)

Partícula — Onda

elétron

Dualidade pra todo mundo



fótons

$$E = hf$$

$$c = \lambda f$$

elétrons

$$E = hf$$

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

também vale pra fótons



Relatividade

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$$

Dualidade no mundo macroscópico



Comprimento de onda de de Broglie de uma bolinha de ping-pong de 2,0 g ao ser rebatida com uma velocidade de 5 m/s.

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

Como ver a dualidade no elétron?

IFT - UNESF

Suponha que um elétron é acelerado por um potencial de 10 Volts. Vamos calcular deveria ser o comprimento de onda de de Broglie deste elétron.

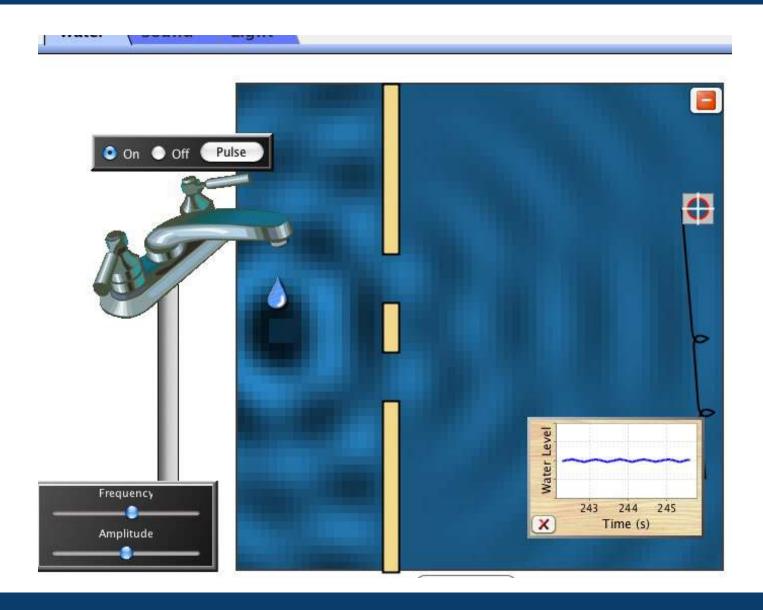
$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

 $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$
 $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ C}$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

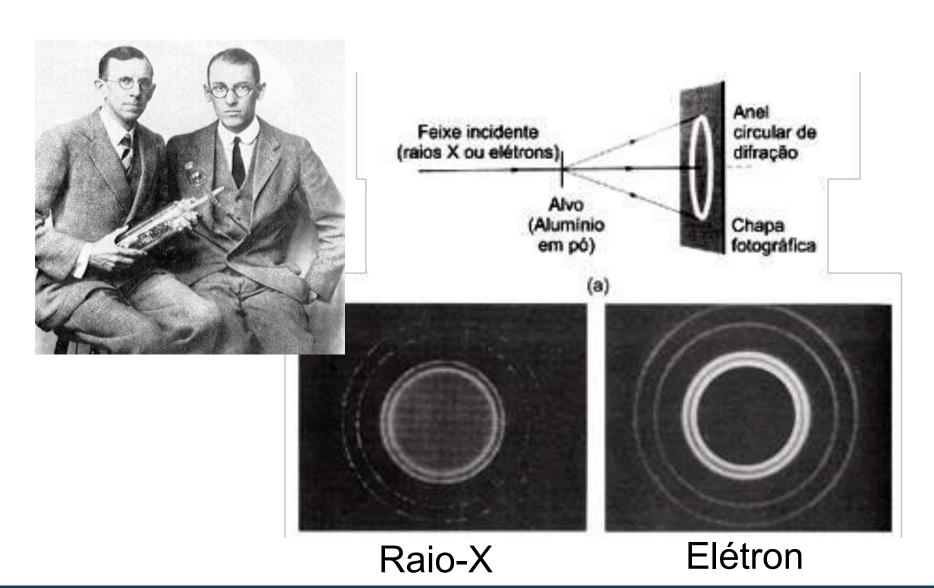
Como ver a dualidade no elétron?





Davisson e Germer (1927)

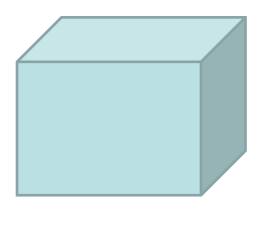




Porque isto é importante l



 Introduzimos uma forma de saber se algo precisa ou não ser tratado como sendo quântico



$$d \sim \lambda$$

Porque isto é importante II



A dualidade e o átomo de Bohr

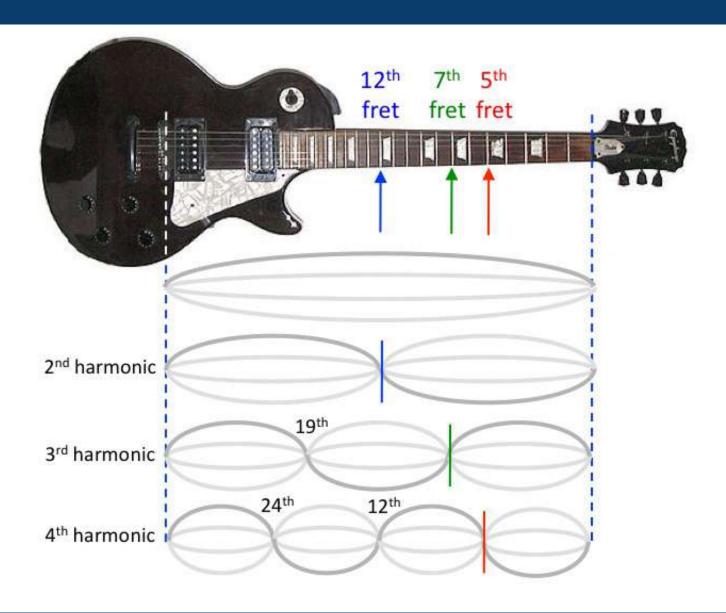
$$L = mvr = pr$$

$$L = n \frac{h}{2\pi}$$

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

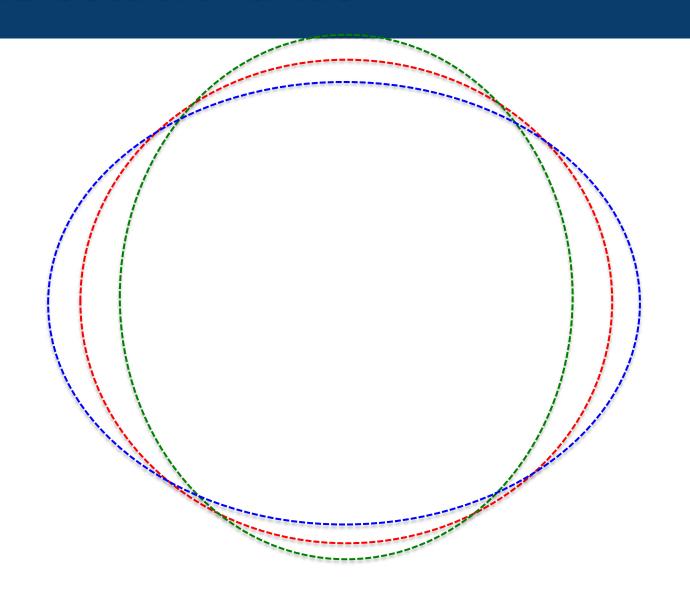
Ondas estacionárias





Ondas estacionárias





O copo de vinho

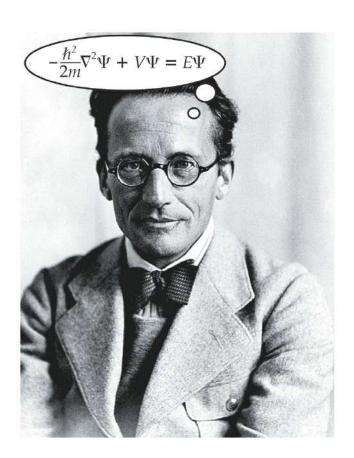




https://youtu.be/BE827gwnnk4?t=106

Como descrever a onda para o e⁻?





Erwin Schrödinger

A equação de Schrödinger



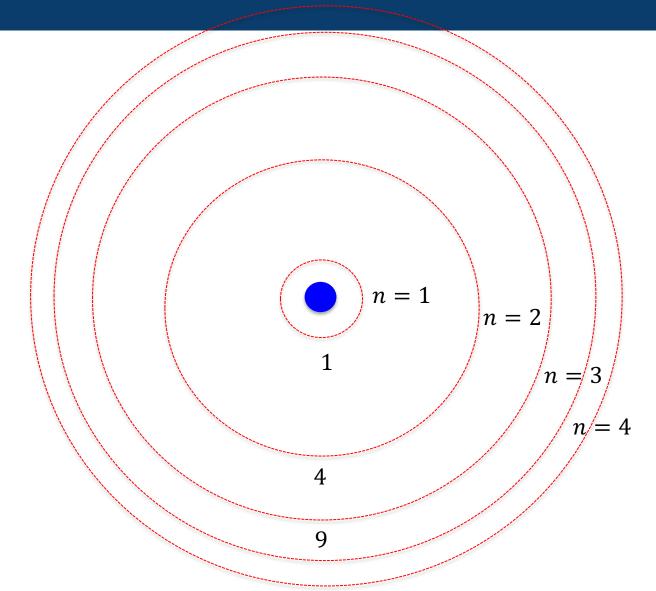
$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

Clássico vs. Quântico



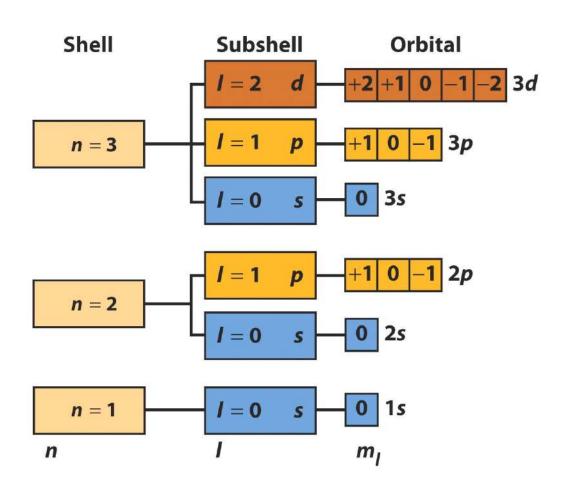
$$x(t) \leftarrow \psi(x,t)$$

O átomo de hidrogênio



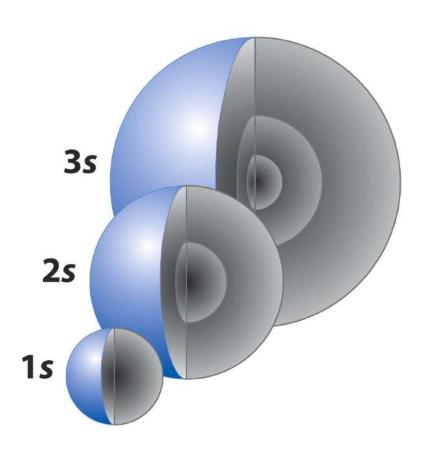


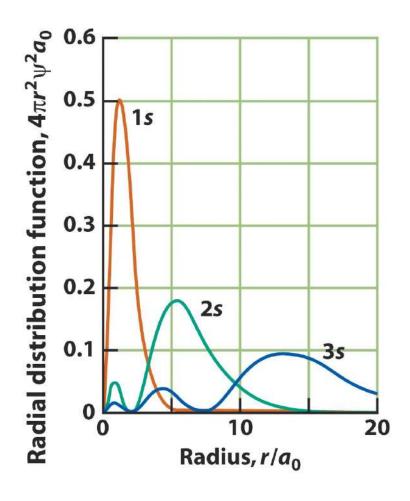
Arranjos





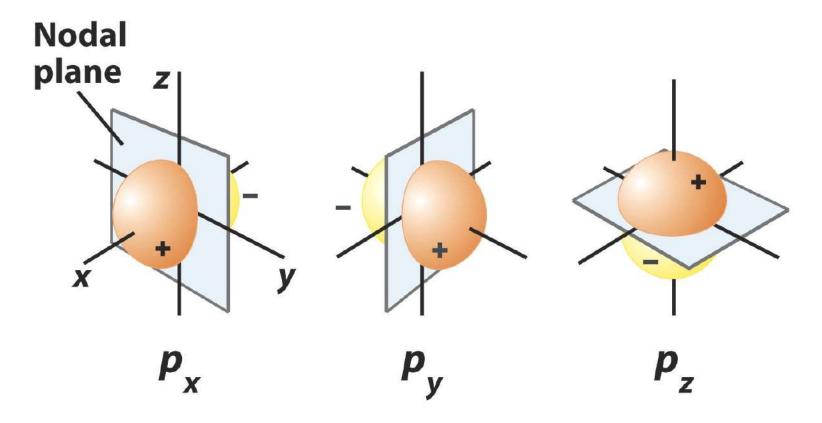
Orbitais s





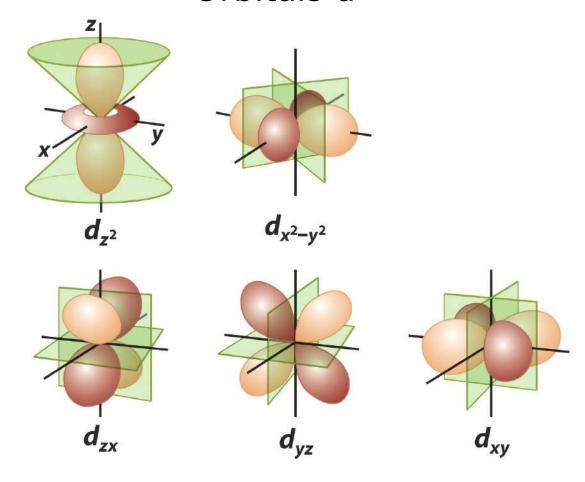


Orbitais p

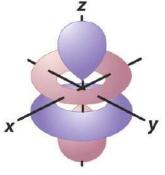


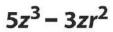


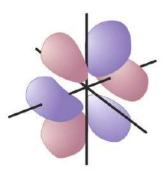
Orbitais d



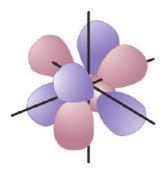
Orbitais f



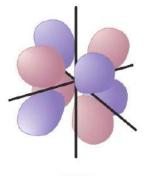




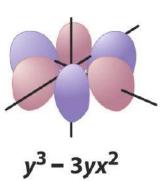
 $5xz^2 - xr^2$



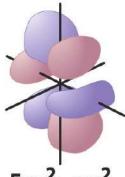
$$zx^2 - zy^2$$



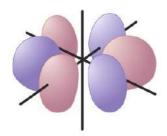
xyz







$$5yz^2 - yr^2$$

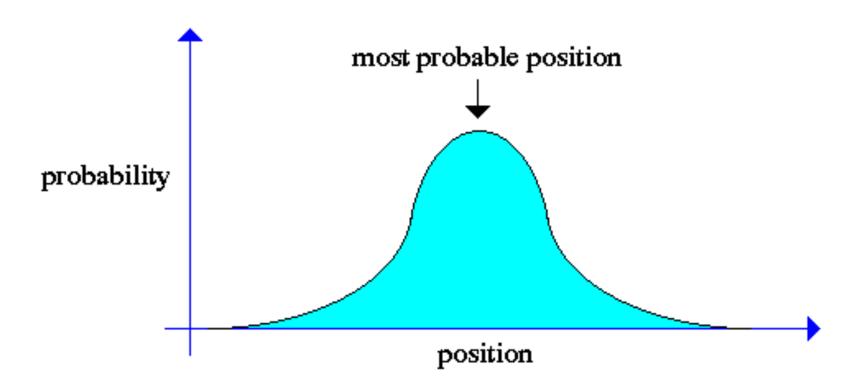


$$x^3 - 3xy^2$$

Como interpretar a função de onda



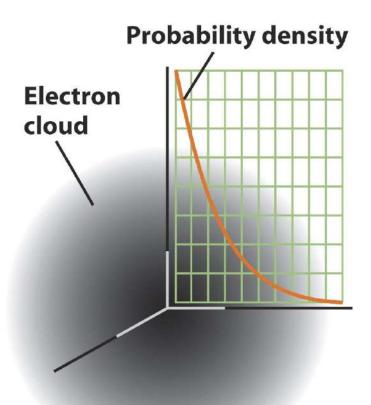
Quantum Wave Function



Como interpretar a função de onda

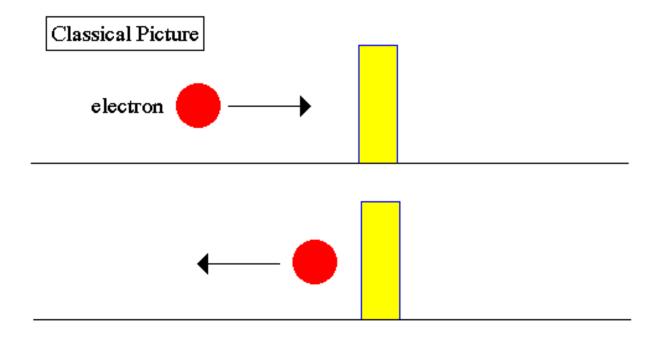


Densidade de Probabilidade de se Encontrar o Elétron



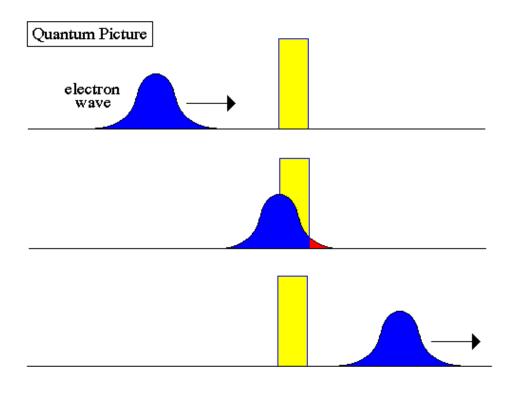
Coisas não intuitivas I





Coisas não intuitivas I

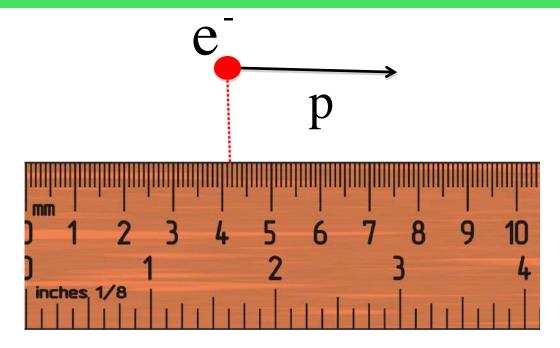




Coisas não intuitivas II: Uma pergunta filosófica



É possível conhecer as características de um objeto (partícula) com precisão absoluta?



Clássico?

Quântico?

A resposta é NÃO!



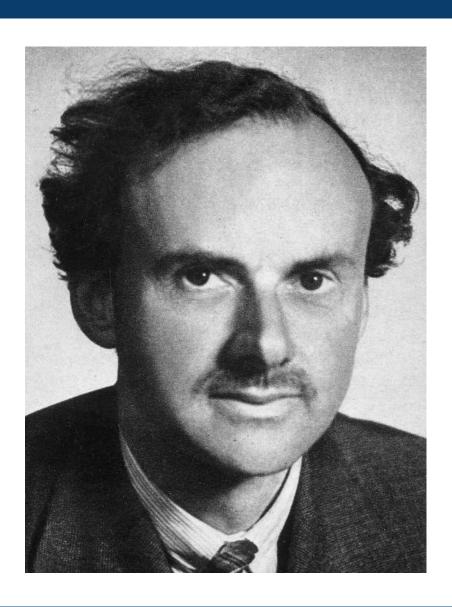
O Princípio da Incerteza

$$\Delta x \Delta p \ge \frac{h}{4.\pi}$$

Estabelece um limite na precisão com que a posição e o momento de uma partícula podem ser determinados simultaneamente.

Mas é sobre ondas?





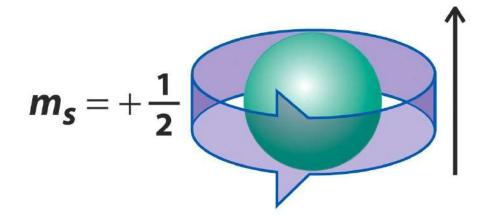
Dirac equation

$$i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi(x)-mc\psi(x)=0$$

Coisas não intuitivas IV



Spin do Elétron



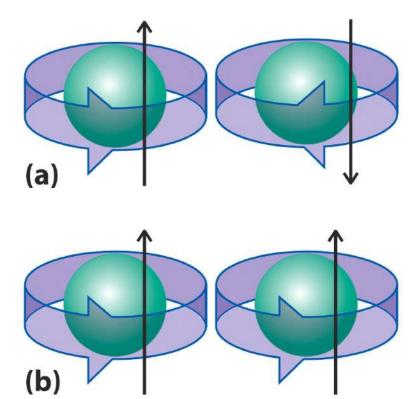
$$m_s = -\frac{1}{2}$$

Coisas não intuitivas V



Princípio da Exclusão de Pauli

- Dois elétrons, no máximo, podem ocupar um dado orbital.
- Dois elétrons, em um átomo, não podem ter o mesmo conjunto de quatro números quânticos.



Coisas não intuitivas VI

Antipartículas

$$\Psi_A = e^{-imt} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 and $\Psi_A = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (positive energy)

$$\Psi_B = e^{imt} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 and $\Psi_B = e^{imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (negative energy)

Os postulados (regras) da MQ

- 1. Um sistema quântico é descrito por um estado $|\psi\rangle$
- 2. Para toda grandeza física (observável) está associada um operador.
- 3. Em qualquer medida de um observável, apenas serão obtidos resultados que são auto-valores do operador.
- 4. O valor médio de um observável é da dado por

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi d\tau}.$$

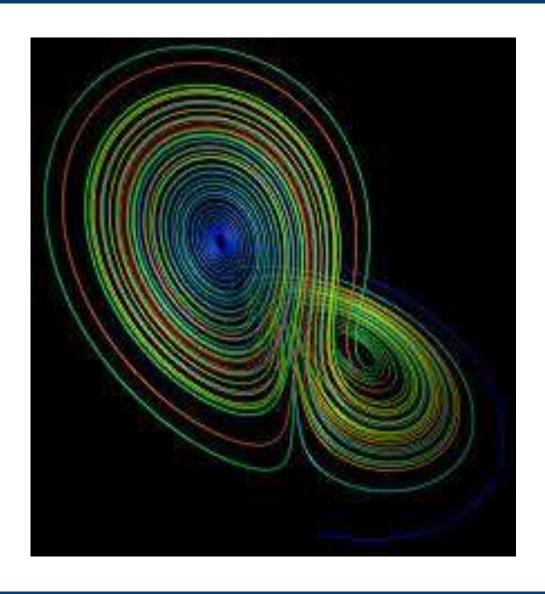
5.O estado evolui de acordo com a equação de Schroedinger

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

6. A função de onda de Férmions deve ser anti-simétrica pela troca de duas partículas. O princípio da exclusão de Pauli é uma consequência deste princípio.

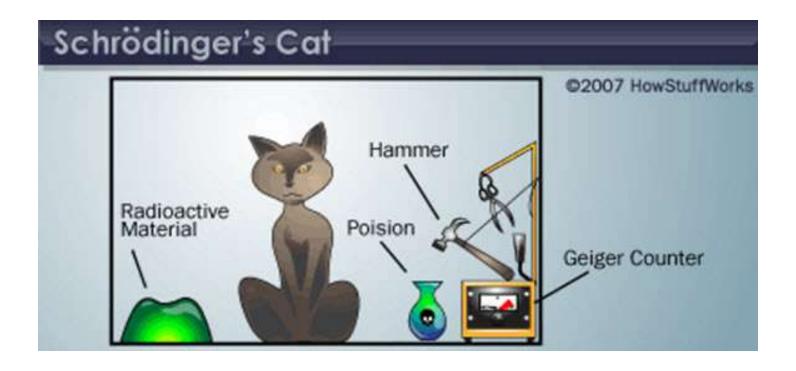
Coisas não intuitivas VII: Determinismo?





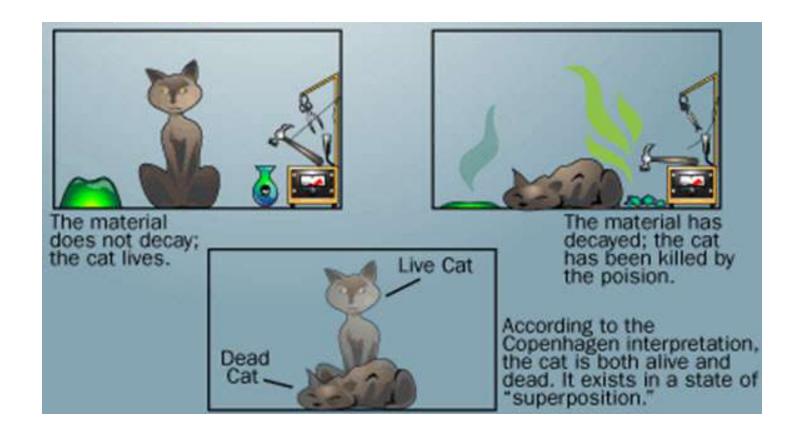
Coisas não intuitivas VIII: Sobre gatos





Coisas não intuitivas VIII: Sobre gatos





Coisas não intuitivas IX: Ação à distância



