

Mecânica Quântica

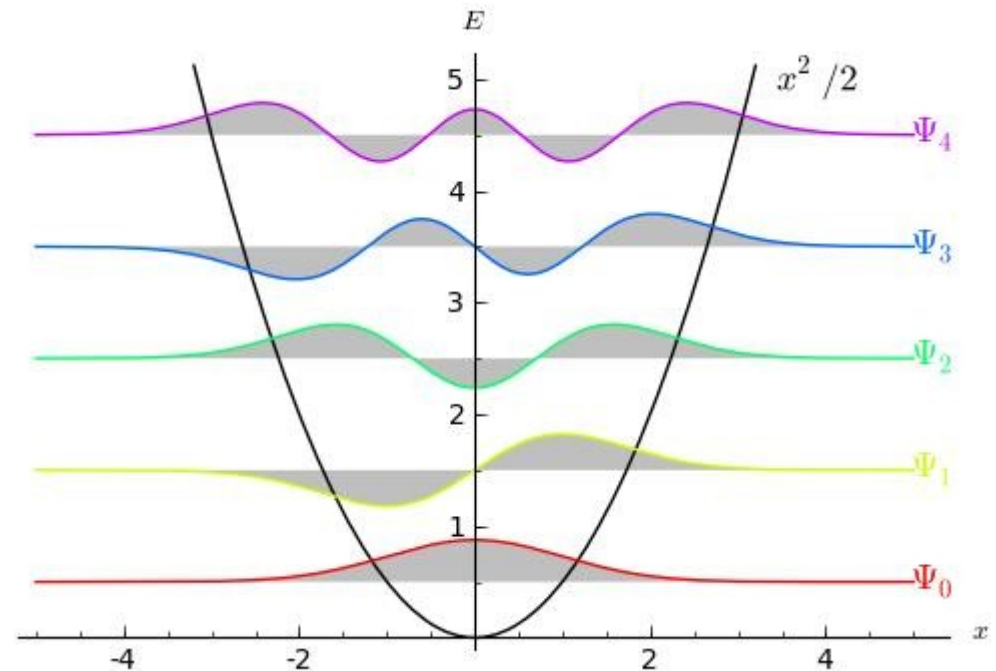
Aula 7: Modelo de Sommerfeld, Princípio de Correspondência

Pieter Westera

pieter.westera@ufabc.edu.br



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html>

O Modelo de Sommerfeld

O físico alemão Arnold Johannes Wilhelm **Sommerfeld** (o mesmo da regra de Wilson-Sommerfeld) em 1915, tentando explicar o fato, de que o **espectro de hidrogênio** (e outros elementos) mostra uma **estrutura fina**, i. e., as **linhas espectrais** previstas pelo modelo de Bohr estão **desdobrados** em linhas com **energias muito próximas** (uns 10^{-4} vezes a separação entre linhas adjacentes), admitiu que em cada **camada eletrônica** (n) havia **1 órbita circular** e $n - 1$ **órbitas elípticas** com **diferentes excentricidades**.



Arnold Johannes
Wilhelm Sommerfeld
(1868–1951)

O Modelo de Sommerfeld

Ele introduziu os **números quânticos** n_θ e n_r , para **caracterizar o movimento** nas **direções angular e radial**.

Aplicando a **regra de Wilson- Sommerfeld** nos dois:

$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h$$

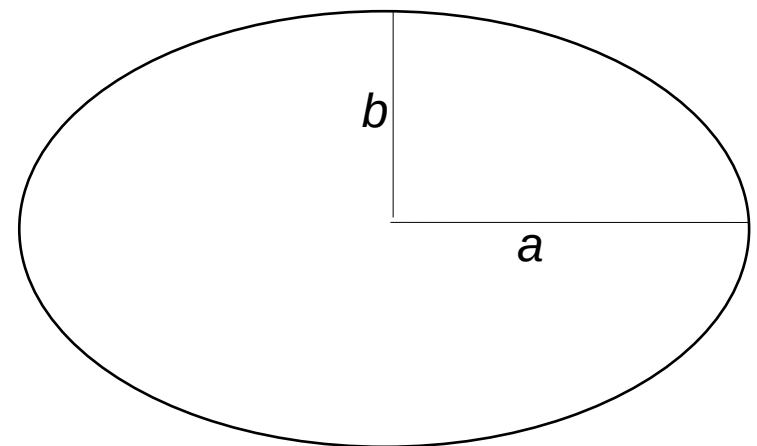
e

$$\oint p_r dr = n_r h$$

A **primeira** leva na bem conhecida **restrição**
(=> aula passada) $L = n_\theta \hbar$

A **segunda** leva (sem dedução) à **condição** pra **razão** entre os **semi-eixos maiores** a e **menores** b das **órbitas elípticas**:

$$L(a/b - 1) = n_r \hbar$$



O Modelo de Sommerfeld

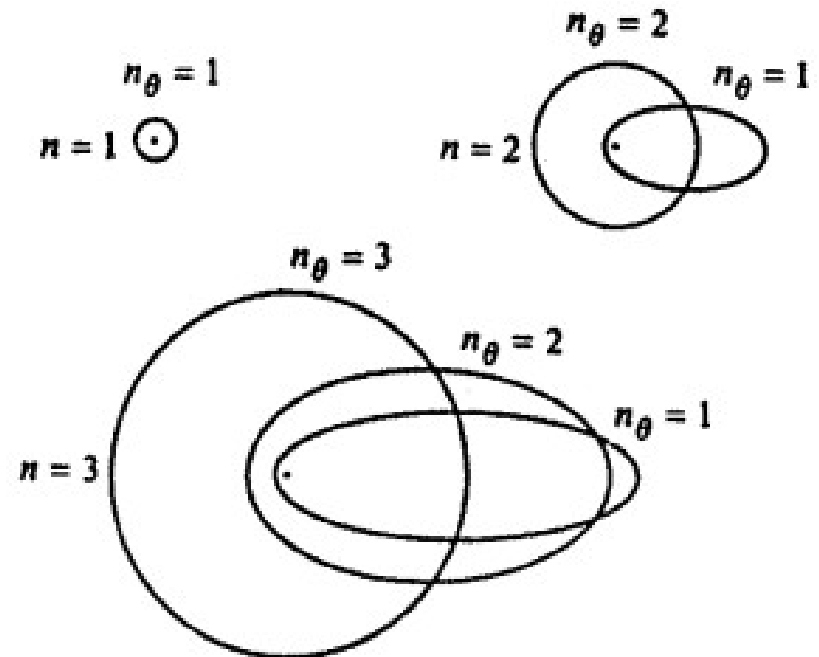
Ainda introduzindo $n \equiv n_\theta + n_r$, e **igualando** a **força de Coulomb** entre núcleo e elétron à força necessária para **manter** o e^- na **órbita** (igual como no modelo de Bohr), obtém-se:

$$a = 4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2 / \mu Z e^2 = n^2 / Z \cdot a_0,$$

$$b = a \cdot n_\theta / n,$$

$$E = -(1/4\pi\epsilon_0)^2 \mu Z^2 e^4 / 2n^2 \hbar^2 = -Z^2 / n^2 \cdot E_0,$$

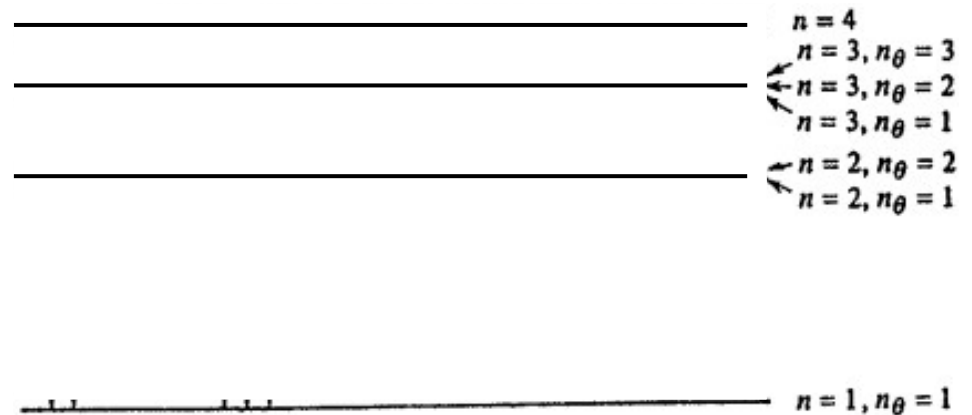
onde $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ é chamado o **no. quântico principal**, $n_\theta = 1, 2, 3, \dots, n$, o **número quântico azimutal** ($\Rightarrow n_r = 0, \dots, n-1$)



O Modelo de Sommerfeld

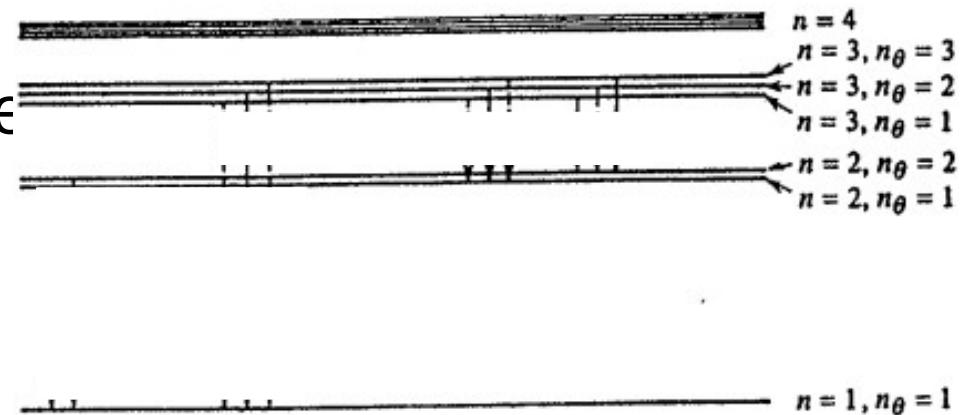
Infelizmente, usando **física clássica** (newtoniana), isto **não explica a estrutura fina** no **espectro de hidrogênio**, i. e., as **energias** dos (sub-)níveis com o **mesmo número quântico principal n** continuam **degeneradas** (iguais para diferentes n_θ).

São as **mesmas energias** que no **modelo de Bohr**, e os **semi-eixos maiores** assumem os **mesmos valores** que os **raios** no átomo de Bohr.



O Modelo de Sommerfeld

Porém, calculando as **velocidades** dos **elétrons**, percebe-se que estas alcançam valores **muito altos**, da ordem $0.01 c$, o que requer **correções rerlativísticas** nas **energias**.



Aplicando estas, **Sommerfeld** conseguiu “**desdobrar**” as **energias** de **órbitas** com a **mesmo** n , mas n_θ diferentes.

Ele chegou em na **energia** em **função** de n e n_θ :

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2n^2 \hbar^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

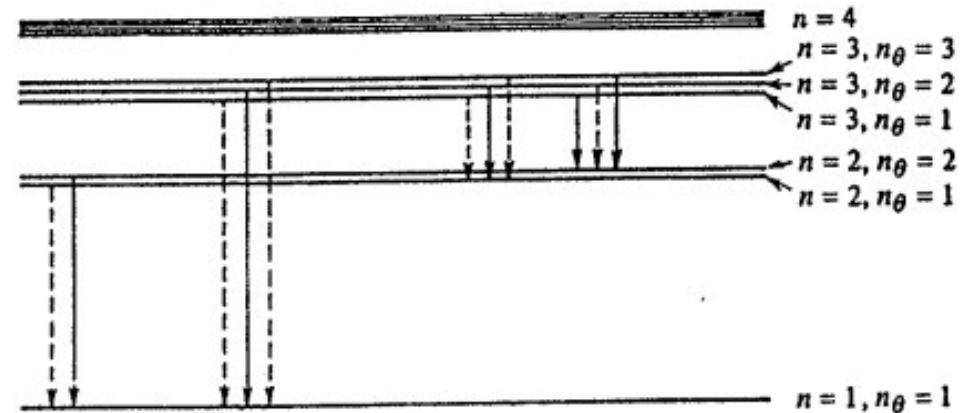
onde $\alpha \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = 7,297 \times 10^{-3} \simeq \frac{1}{137}$ é chamado de **constante de estrutura fina**.

O Modelo de Sommerfeld

Com estes valores de energia, a **estrutura fina** no espectro de hidrogênio **pode** ser **explicada**, desde que ocorram **apenas transições**, naquelas n_θ muda por **uma unidade**, isto é (sendo $n_{\theta i}$ e $n_{\theta f}$ os **estados inicial e final da transição**):

$$n_{\theta i} - n_{\theta f} = \pm 1$$

Uma **restrição** destas para **transições quânticas** se chama **regra de seleção**.



Modelo Atômico de Bohr

E o Princípio de Correspondência?

Para **energias altas** (n grandes) queremos obter os **resultados clássicos**

$\nu_{n+1 \rightarrow n}$ deve ser igual a ν_{orbital}

$$\begin{aligned}\nu_{n+1 \rightarrow n} &= E_{n+1 \rightarrow n}/h = 1/2\pi\hbar \cdot (E_{n+1} - E_n) \\ &= 1/2\pi\hbar \cdot (-Z^2/(n+1)^2 \cdot E_0 - -Z^2/n^2 \cdot E_0) \\ &= Z^2E_0/2\pi\hbar \cdot (1/n^2 - 1/(n+1)^2) \\ &= Z^2m_e e^4/64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 \cdot ((n+1)^2/n^2(n+1)^2 - n^2/n^2(n+1)^2) \\ &= Z^2m_e e^4/64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 \cdot (((n+1)^2 - n^2)/n^2(n+1)^2) \\ &= Z^2m_e e^4/64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 \cdot ((n^2+2n+1 - n^2)/n^2(n^2+2n+1)) \\ &= Z^2m_e e^4/64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 \cdot (2n+1)/(n^4+2n^3+n^2) \\ &\stackrel{n \text{ grande}}{\approx} Z^2m_e e^4/64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 \cdot 2n/n^4 \\ &= Z^2m_e e^4/n^3 32\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 = \nu_{\text{orbital}} \quad \text{OK}\end{aligned}$$

Modelo Atômico de Bohr

E o Princípio de Correspondência?

Para **energias altas** (n grandes) queremos obter os **resultados clássicos**

! Falha para transições com $\Delta n > 1$

Átomos gigantes são chamados **átomos de Rydberg**, só existem no **espaço** (vácuo), por que a **energia de ionização** é muito **pequena** ($\leq 10^{-5}$ eV); Qualquer perturbação destrói um átomo destes.

Acharam emissões de átomos de $\sim 20 \mu\text{m}$ (equivalente a um grão de areia), com raios de $\sim 10\,000 a_0$, $n \sim 600$.

Aspectos Principais do Modelo de Bohr

- 1) As **previsões essenciais** do modelo de Bohr estão contidas nas **equações de energia** e do **número de onda**.
- 2) O **estado normal** de um átomo é quando o elétron tem **menor energia** ou $n = 1$ (estado **fundamental**).
- 3) Em uma descarga elétrica, ou algum outro processo, o átomo **recebe energia** devido a colisões, etc. O elétron deve sofrer uma **transição** para um estado de **maior energia**, ou **estado excitado** $n > 1$.
- 4) Obedecendo a **lei natural** dos **sistemas físicos**, o átomo tenderá a **voltar** ao seu **estado de menor energia** (estado fundamental).
- 5) Em um **grande número** de **processos** de **excitação** e **desexcitação**, todas as possíveis **transições** ocorrem sendo emitido o **espectro completo**.

Crítica do Modelo de Bohr

Aspectos positivos

- Fácil de visualizar
- Sucesso na descrição das linhas espectroscópicas do átomo de hidrogênio.
- O raio da órbita do hidrogênio $0,53 \text{ \AA}$, concorda com o valor previsto para o diâmetro da molécula de hidrogênio $2,2 \text{ \AA}$.
- Várias grandezas medidas podem ser expressas em termos de constantes fundamentais (Energia e raio de Bohr, constante de Rydberg, ...).

Crítica do Modelo de Bohr

Falhas

- Não conseguia explicar as intensidades relativas das linhas espectrais.
- Não conseguia explicar as linhas espectrais de átomos mais complexos.
- Faz hipóteses aleatórias, por exemplo órbitas estáveis, momento angular quantizado.
- Utilizou-se de uma mistura de conceitos clássicos (leis de Newton, Coulomb) e conceitos “não-clássicos” (quântização do momento angular) => velha mecânica quântica

Estas dificuldades começaram a ser superadas na década de 20 do século passado com de Broglie, Schrödinger, Heisenberg, Pauli, Dirac e vários outros cientistas.

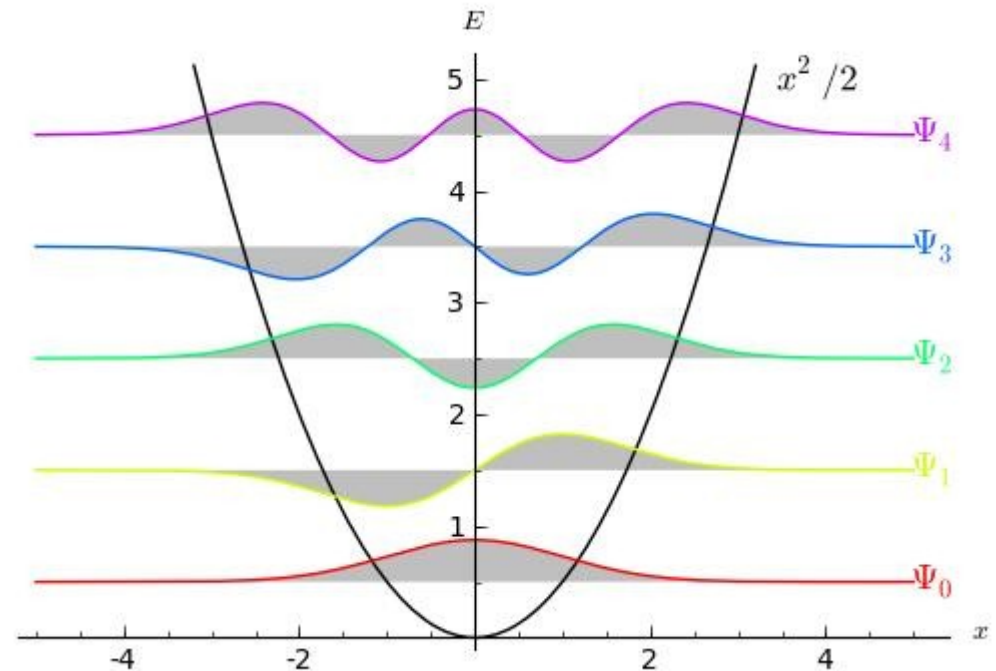
=> Nova teoria: A mecânica quântica/ondulatório
(Aulas mais pra frente)

Física Quântica

FIM PARA HOJE



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html>