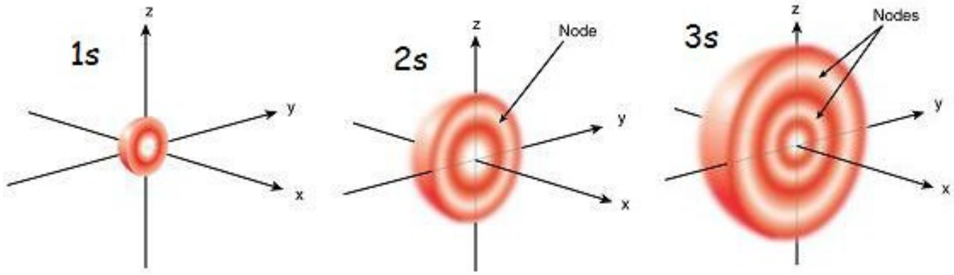
AGA0293 Astrofísica Estelar

Capítulo 5

A interação de luz e matéria



5.1 Linhas espectrais

5.2 Fótons e a Dualidade Partícula-onda

5.3 O modelo do átomo de Bohr

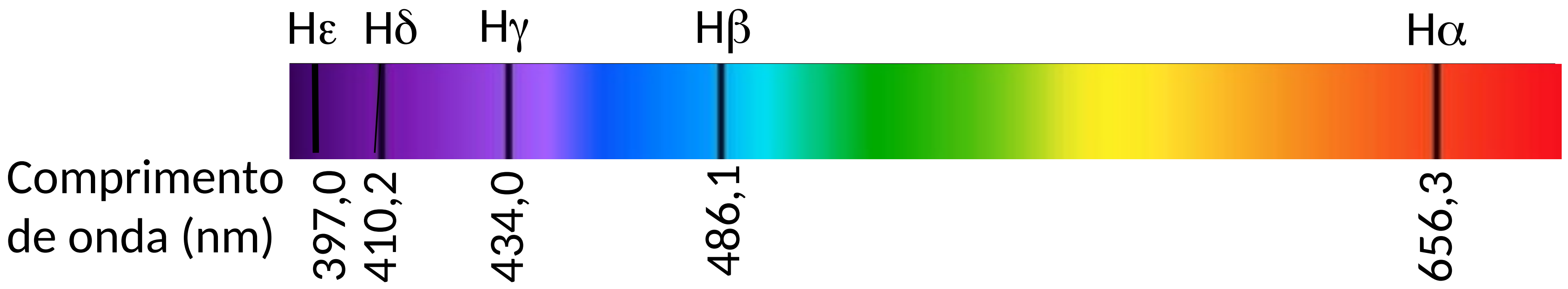
5.4 Mecânica Quântica

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

Slides pela Profa. Jane Gregorio-Hetem e Prof. Jorge Meléndez

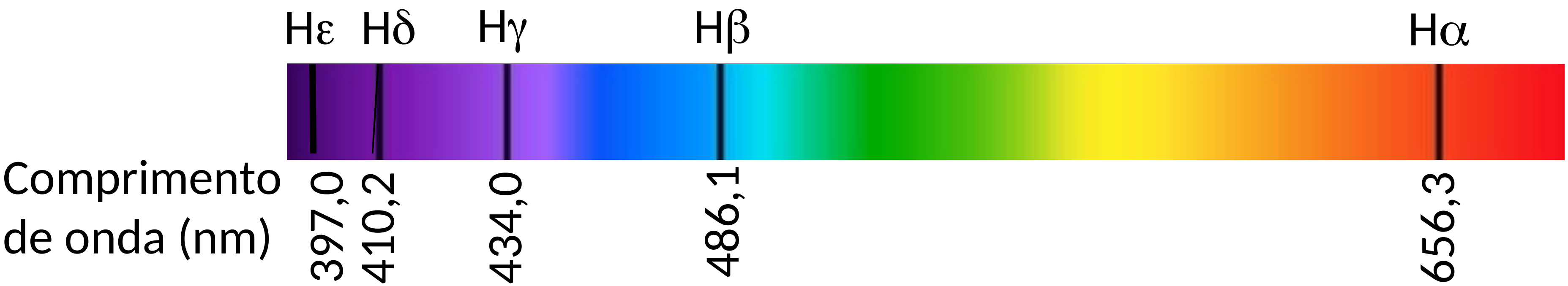
A série de Balmer das linhas de H

A finais dos anos 1800, existiam diversas medidas dos comprimentos de onda (λ) das linhas de hidrogênio



A série de Balmer das linhas de H

A finais dos anos 1800, existiam diversas medidas dos comprimentos de onda (λ) das linhas de hidrogênio

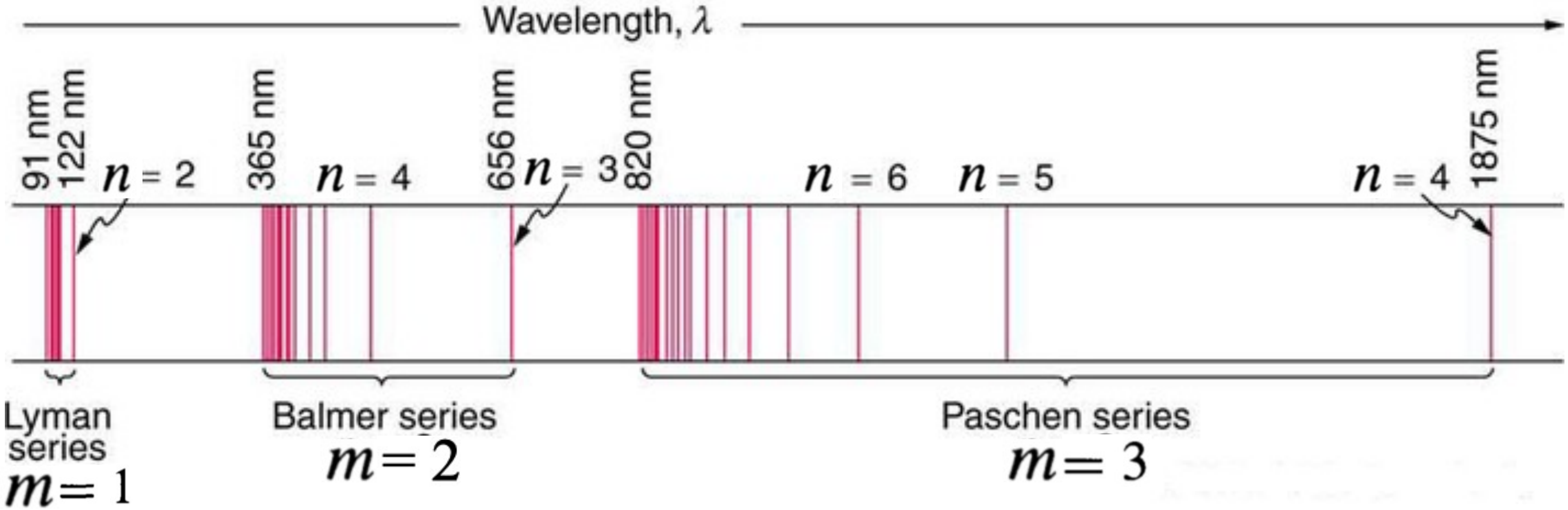


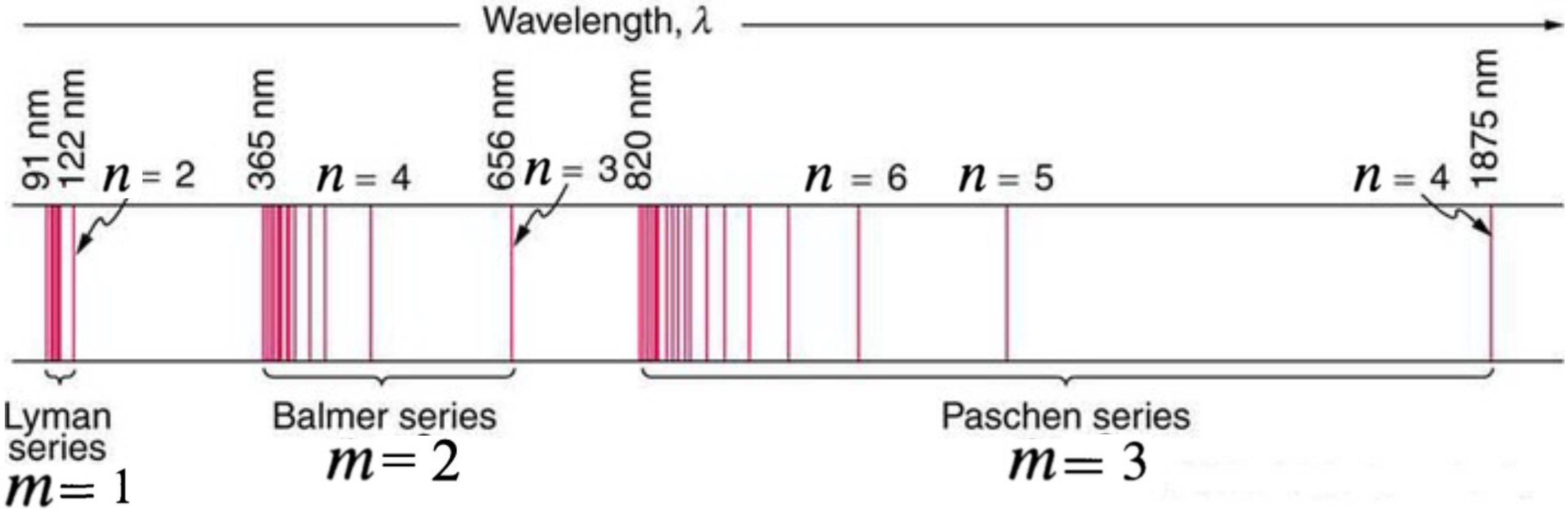
Johann Balmer (1885) descobriu empiricamente como reproduzir o λ das linhas do hidrogênio:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n = 3, 4, 5, \ldots$$

$$R_H = 1{,}09677583 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$


Wavelength, λ
91 nm
122 nm
n = 2
365 nm
n = 4
656 nm
n = 3
820 nm
n = 6
n = 5
n = 4
1875 nm
Lyman series
m = 1
Balmer series
m = 2
Paschen series
m = 3

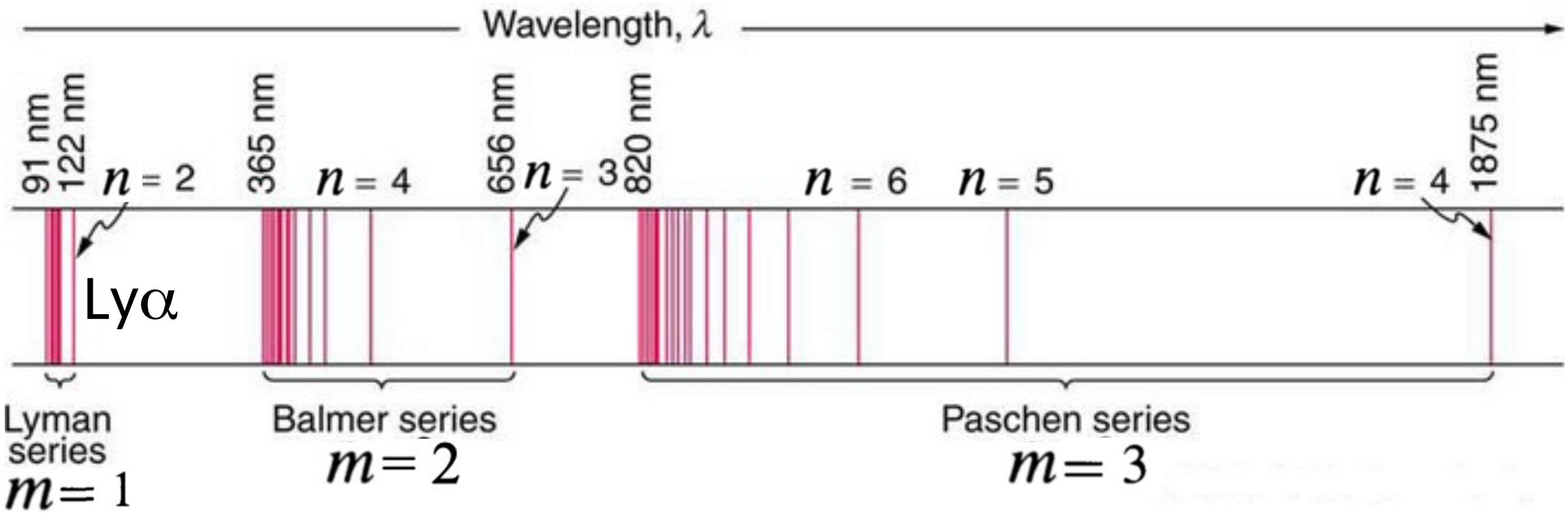


Rydberg (1888), fórmula geral para as linhas do hidrogênio:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \qquad n = 2, 3, 4, \ldots$$

e $n > m$

$R_H = 1{,}09677583 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$

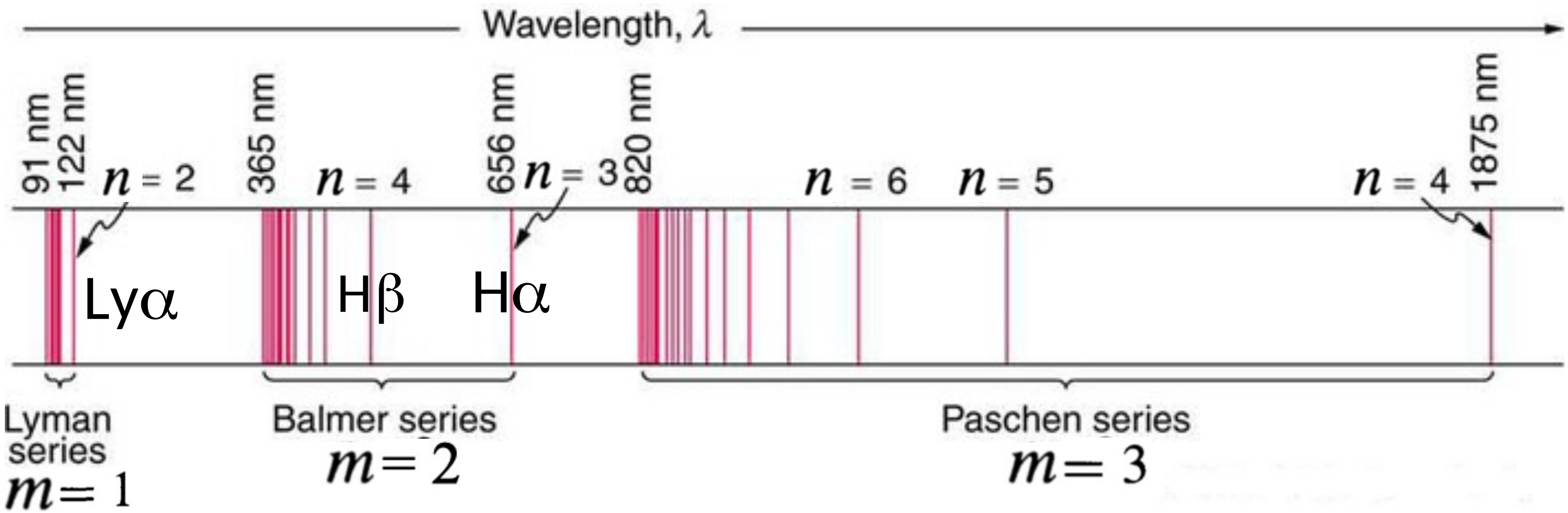


Rydberg (1888), fórmula geral para as linhas do hidrogênio:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 2, 3, 4, \ldots \text{ e } n > m$$

Série **a partir do qual se dá a transição**: $R_H = 1{,}09677583 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$

$m = 1$: série de **Lyman**, denominadas Lyα, Lyβ, Lyγ (linhas do UV);



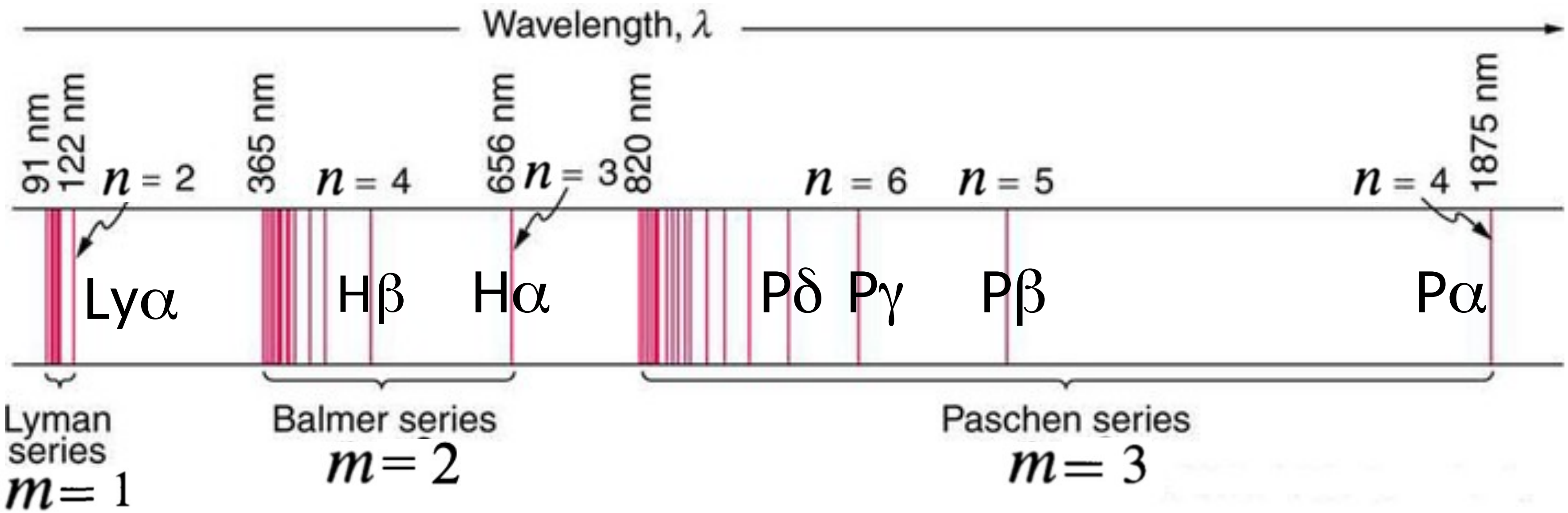
Rydberg (1888), fórmula geral para as linhas do hidrogênio:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \qquad n = 2, 3, 4, \ldots \text{ e } n > m$$

Série **a partir do qual se dá a transição**: $R_H = 1{,}09677583 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

$m = 1$: série de **Lyman**, denominadas $\mathrm{Ly}\alpha$, $\mathrm{Ly}\beta$, $\mathrm{Ly}\gamma$ (linhas do UV);

$m = 2$: série de Balmer: $\mathrm{H}\alpha$, $\mathrm{H}\beta$, $\mathrm{H}\gamma$, … (espectro visível);



Rydberg (1888), fórmula geral para as linhas do hidrogênio:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, \ldots \text{ e } n > m$$

Série **a partir do qual se dá a transição**: $R_H = 1{,}09677583 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

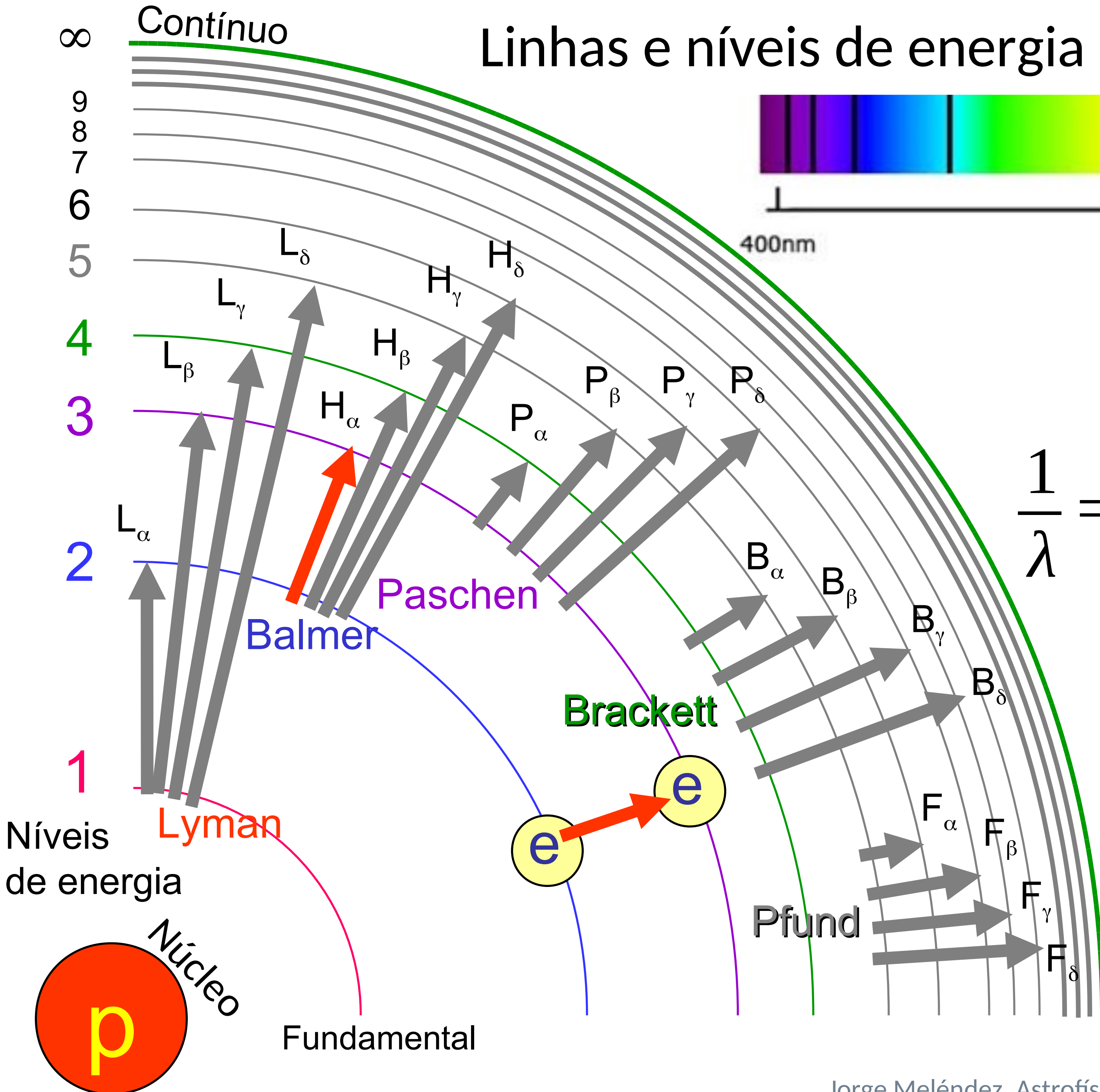
$m = 1$: série de **Lyman**, denominadas Lyα, Lyβ, Lyγ (linhas do UV);

$m = 2$: série de Balmer: Hα, Hβ, Hγ, … (espectro visível);

$m = 3$: série de **Paschen**, denominadas Pα, Pβ,... (infravermelho).

Linhas e níveis de energia do átomo de H

Hα 656,3 nm
$m = 2, n = 3$



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

Átomo de Bohr (1913)

O modelo do átomo de Rutherford, do elétron em órbita circular clássica, não é viável, pois uma carga em movimento acelerado emite radiação, perdendo energia e acabando por cair no núcleo.

O modelo do átomo de Rutherford, do elétron em órbita circular clássica, não é viável, pois uma carga em movimento acelerado emite radiação, perdendo energia e acabando por cair no núcleo.

Niels Bohr
(1885 – 1962)

O modelo de Bohr (1913) resolve o problema. Só órbitas discretas são permitidas onde o elétron não emite radiação. São **órbitas definidas** para valores discretos do momento angular:

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\mathrm{m\ v\ r} = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar = 1{,}054571596 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\ s}$$

m é a massa do elétron; **r** o raio do movimento circular com velocidade **v**, em torno do núcleo.

Para avaliar o movimento do sistema elétron-próton, utilizamos a lei de Coulomb → atração elétrica entre duas cargas q_1 e q_2 separadas por distância r:

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\,\varepsilon_o}\frac{q_1\,q_2}{r^2}\,\hat{r}$$

onde $\varepsilon_o = 8{,}854187817 \times 10^{-12}$ F m^{-1} (permissividade elétrica) [farads/m]

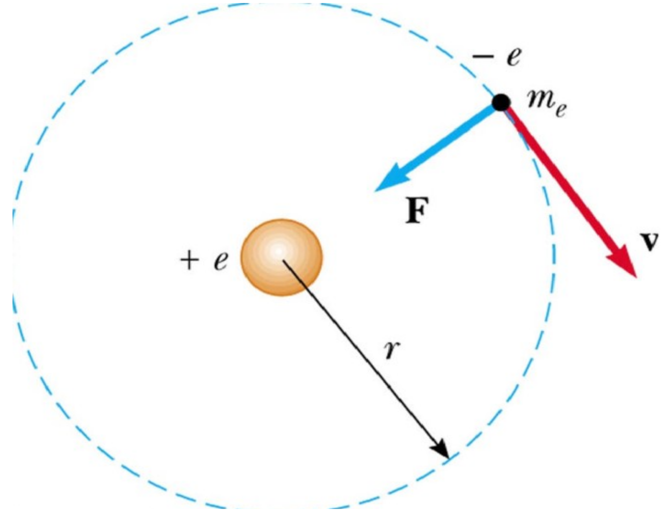
Considere o elétron e o próton, de massas m_e e m_p, e cargas e^- e e^+, girando em torno de um centro de massa comum. A massa reduzida será:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{(m_e)(1836.15266\,m_e)}{m_e + 1836.15266\,m_e} = 0{,}999455679\ m_e$$

e a massa total $M = m_e + m_p = m_e + 1836{,}15266\ m_e = 1{,}0005446\ m_p$

Como $M \approx m_p$ e $\mu \approx m_e$, podemos considerar sistema composto de próton de massa M em repouso e elétron de massa μ

Da segunda lei de Newton, $\vec{F} = \mu \vec{a}$



a aceleração centrípeta: $\vec{a} = \frac{\mathrm{v}^2}{r}\hat{r}$

implica em:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{q_1 q_2}{r^2}\hat{r} = -\mu\frac{\mathrm{v}^2}{r}\hat{r} \quad \Rightarrow \quad -\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r^2}\hat{r} = -\mu\frac{\mathrm{v}^2}{r}\hat{r}$$

Então a energia cinética:

$$K = \frac{1}{2}\mu\mathrm{v}^2 = \frac{1}{8\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r}$$

e a energia potencial será:

$$\boxed{U = -G\frac{Mm}{r}} \quad (2.14)$$

$$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r} = -2K$$

A energia total do átomo será:

$$E = K + U = K - 2K = -K = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r}$$

Usando a quantização do momento angular: $L = \mu v r = n\hbar$

A expressão da energia cinética pode ser reescrita:

$$\frac{1}{8\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r} = \frac{1}{2}\mu v^2 = \frac{1}{2}\frac{(\mu v r)^2}{\mu r^2} = \frac{1}{2}\frac{(n\hbar)^2}{\mu r^2}$$

$$\Rightarrow \quad r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}n^2 = a_o n^2$$

ou seja, **apenas algumas órbitas são possíveis** (em função de n^2)

onde $a_o = 5{,}291772083 \times 10^{-11}$ m = 0,0529 nm é o raio de Bohr

- A **energia do elétron na órbita n** pode ser obtida inserindo o raio r: $r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} n^2$ $\quad E = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r}$

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_o^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -13{,}6\,\frac{1}{n^2}\ \text{eV}$$

- O sistema é considerado ligado enquanto a energia do nível for $E_n < 0$.
- À medida que $n \rightarrow \infty$, $E \rightarrow 0$

Quando $E > 0$, o elétron **não fica ligado** ao núcleo.

estado ionizado

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -13.6\,\text{eV}\frac{1}{n^2}$$

$$\boxed{E_{\text{photon}} = E_{\text{high}} - E_{\text{low}}}$$

$$E_{\text{fóton}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \left(-\frac{\mu\,e^4}{32\pi^2\varepsilon_o^2\hbar^2}\frac{1}{n_2^2}\right) - \left(-\frac{\mu\,e^4}{32\pi^2\varepsilon_o^2\hbar^2}\frac{1}{n_1^2}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\mu\,e^4}{64\pi^3\varepsilon_o^2\hbar^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

Fórmula de Balmer/Rydberg:

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

Comparando com a expressão de Rydberg para linhas de H, temos a constante de Rydberg para o hidrogênio:

$$R_H = \frac{\mu\,e^4}{64\pi^3\varepsilon_o^2\hbar^3} = 10967758{,}3\,\text{m}^{-1}$$

Exemplo: Cálculo do comprimento de onda da linha Hα

Qual é o λ do fóton emitido quando um elétron do átomo de H passa por uma transição da órbita n = 3 para n = 2?

$$E_n = -13{,}6\,\frac{1}{n^2}$$

$$\Delta E = E_3 - E_2:$$

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = -13{,}6\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{2^2}\right)\text{eV}$$

Levando a λ = 656,469 nm no vácuo, que é 0,03% discrepante do valor medido no ar: λ = 656,281 nm.

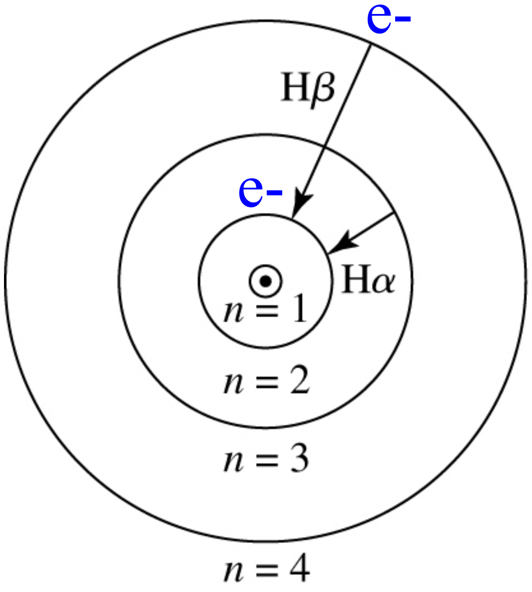
Usando o índice de refração $n_{ar} = \dfrac{c}{v_{ar}} = 1{,}000297$

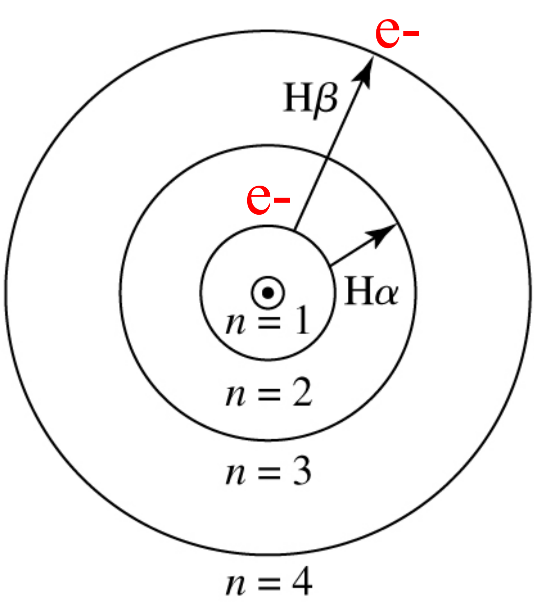
$$\frac{\lambda_{ar}}{\lambda_{vácuo}} = \frac{v_{ar}}{c} = \frac{1}{n_{ar}} \Rightarrow \lambda_{ar} = \frac{\lambda_{vácuo}}{n_{ar}} = \frac{656{,}469}{1{,}000297} = 656{,}28\ \text{nm}$$

As leis de Kirchoff explicadas no contexto da revolução quântica

1ª. Um sólido ou gás denso a alta temperatura produz um espectro contínuo, descrito por $B_\lambda(T)$ com $\lambda_{máx}$ definido pela lei de Wien

2ª. Um gás gente e difuso produz linhas brilhantes de emissão, quando um elétron decai de um nível de energia mais alto para um mais baixo, emitindo um fóton de energia ΔE





3ª. Um gás frio em frente a uma fonte de espectro contínuo produz linhas escuras de absorção quando um elétron sobe para um nível de energia mais alto, após absorver um fóton com energia ΔE.

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$$

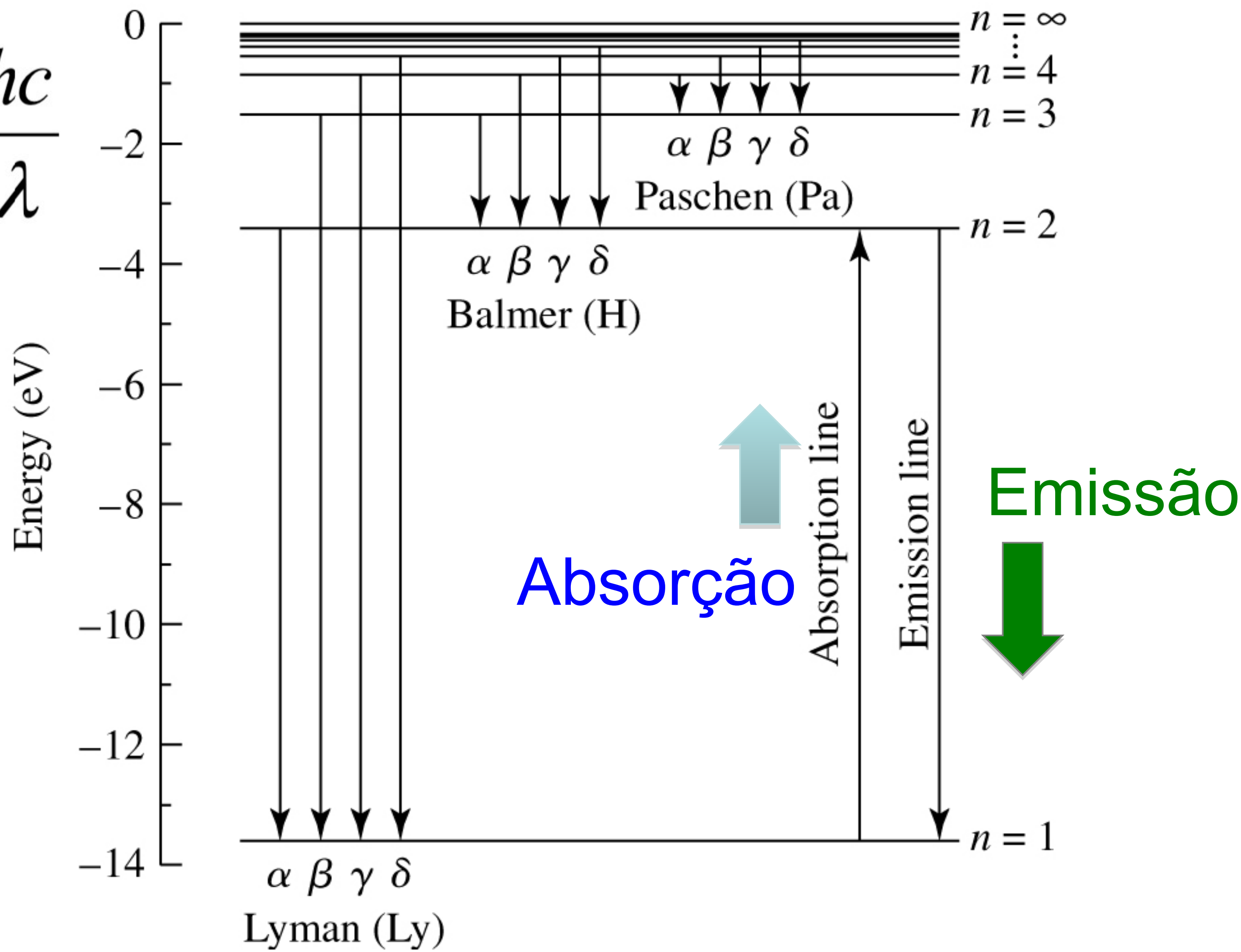
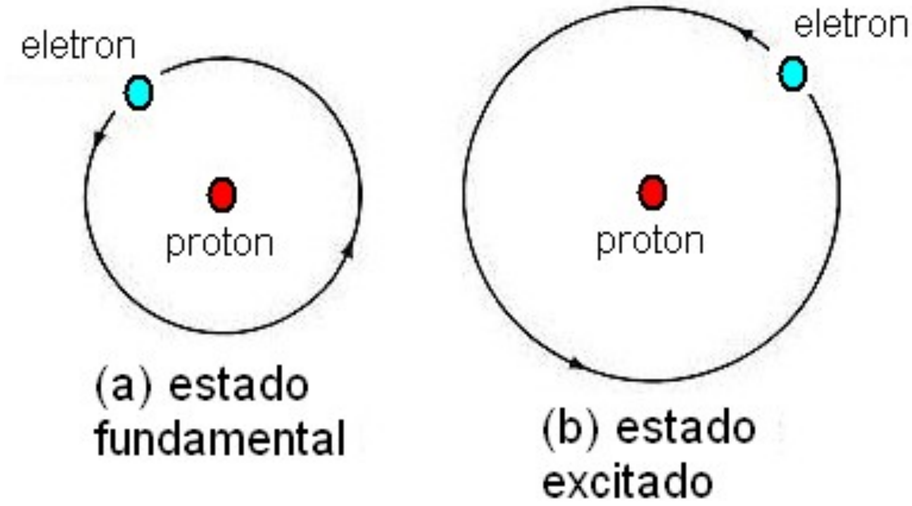
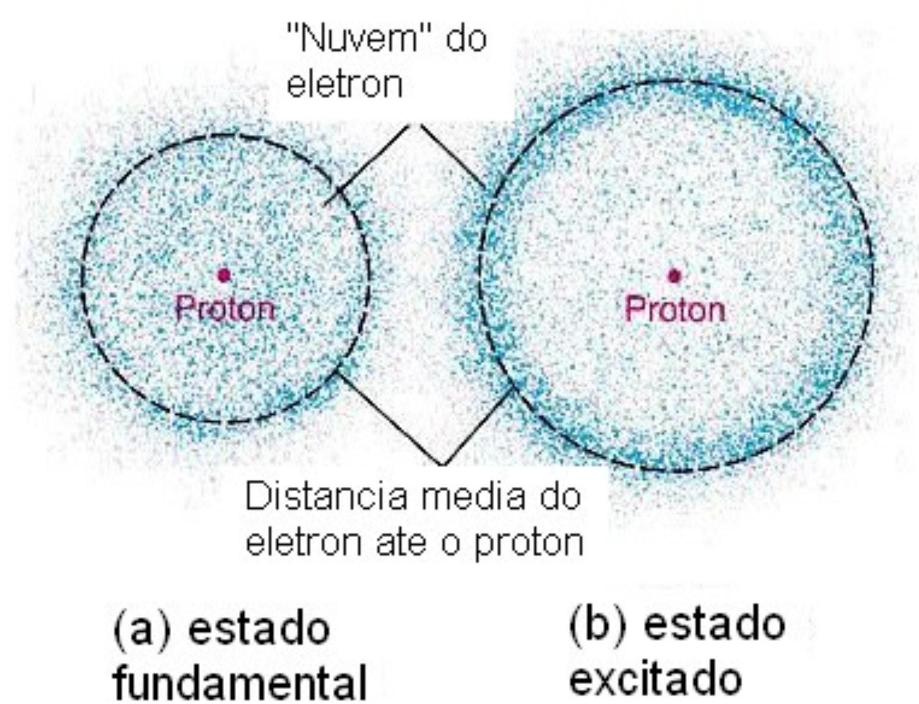


Fig. 5.7. Energy level diagram for the hydrogen atom showing Lyman, Balmer and Paschen lines.



A visão moderna do átomo de hidrogênio



5.4 Mecânica Quântica e a dualidade partícula-onda

Louis de Broglie
(1892 – 1987)

Frequência e comprimento de onda de *de Broglie*: aplicação da dualidade partícula-onda na natureza. Fótons carregam energia e momento:

$$\nu = \frac{E}{h} \qquad \lambda = \frac{h}{p}$$

Toda a matéria exibe propriedades de onda em sua *propagação* e pode ser caraterizada por uma frequência e comprimento de onda

Exemplo: *uma pessoa de 70 kg correndo a 3 m/s tem* $\lambda = 3{,}2 \times 10^{-36}$ *m, que é desprezível nas escalas atômicas e do dia-a-dia → não sofre difração.*

Para um elétron: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} = 0.242 \text{ nm}$

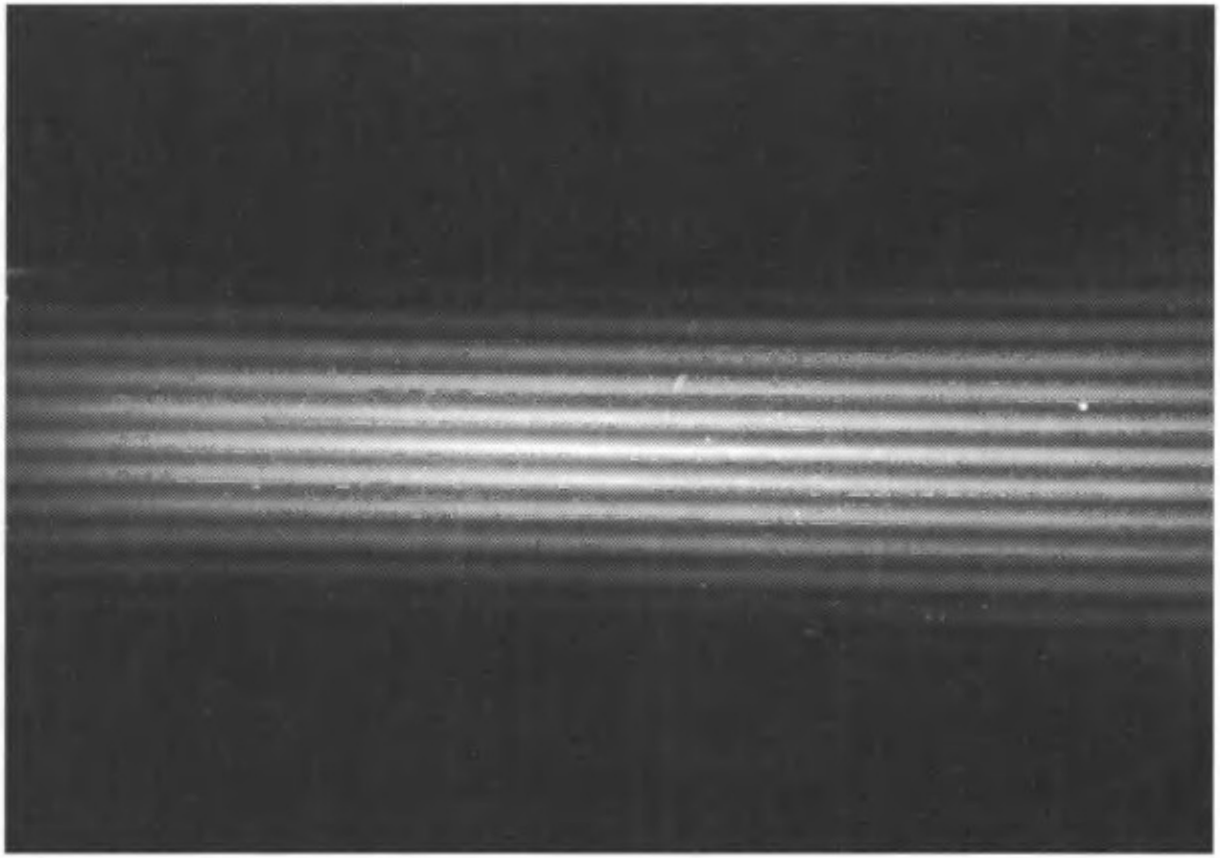
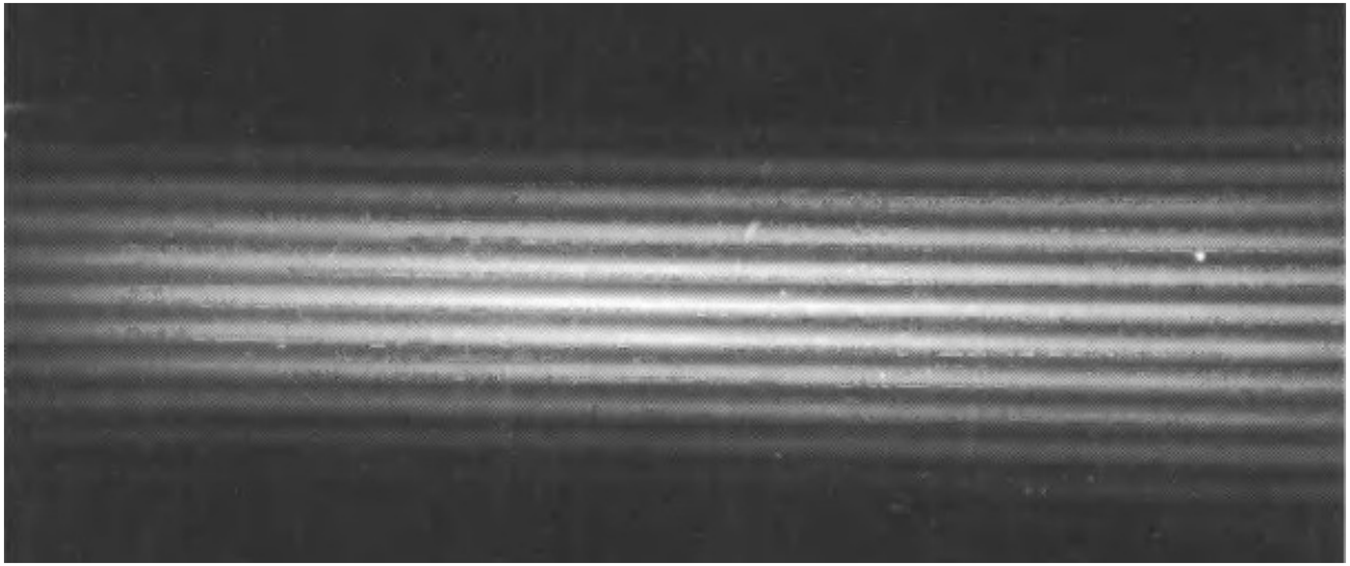


FIGURE 5.9 Interference pattern from an electron double-slit experiment. (Figure from Jönsson, *Zeitschrift für Physik*, *161*, 454, 1961.)

A onda (de amplitude Ψ) não fornece informação sobre a posição de determinado elétron ou fóton, mas sim a “probabilidade” $|\Psi|^2$ de encontrar o elétron ou o fóton naquela posição.

No experimento de dupla fenda, fótons ou elétrons nunca são encontrados nas posições em que as ondas das duas fendas têm interferência destrutiva: $|\Psi_1+ \Psi_2|^2 = 0$



Princípio de Incerteza de Heisenberg

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

Incerteza na posição

Incerteza no momento

Número muito pequeno

Werner Heisenberg (1901– 1976)

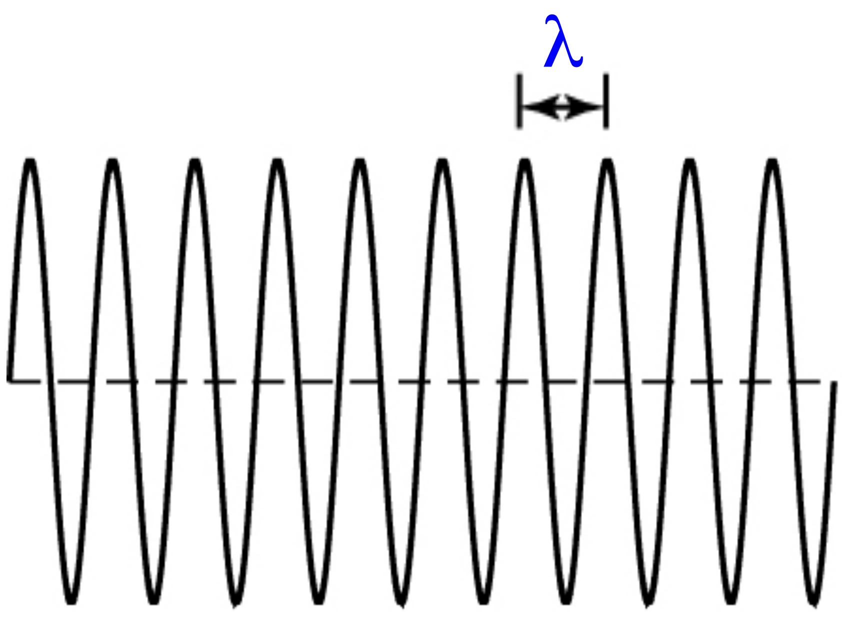
$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$h = 6{,}626\ 10^{-34}\ \mathrm{J}\ .\ \mathrm{s}$$

(c) Jorge Meléndez

Princípio de Incerteza de Heisenberg

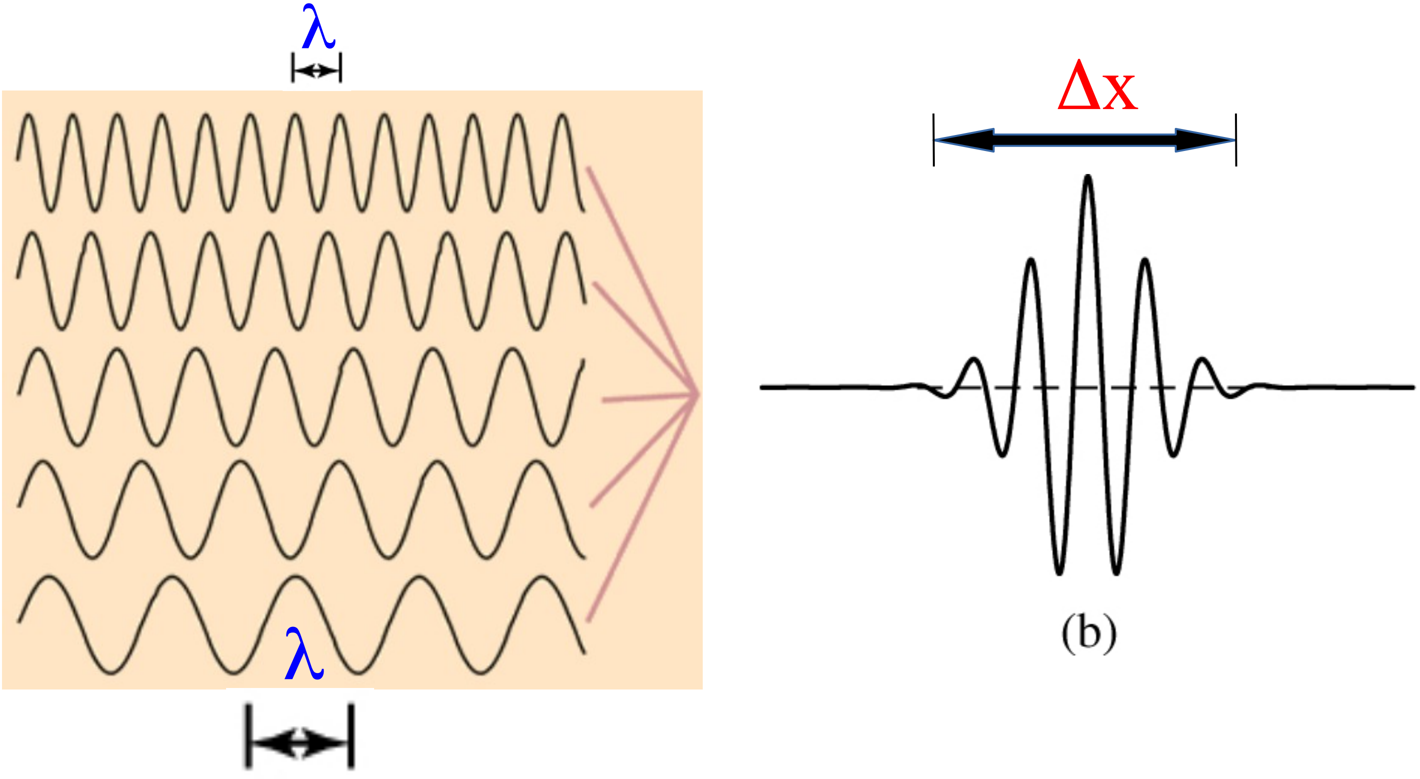
A onda Ψ na fig.(a) tem um λ definido, então o momento $p = h/\lambda$ da partícula é exatamente conhecido. Porém, no intervalo $\Delta x = \pm\infty$ há um grande número de picos igualmente altos → a localização da partícula é incerta.



(a)

Princípio de Incerteza de Heisenberg

A fig. (b) mostra a combinação de várias ondas Ψ, resultando em zero exceto para um certo Δx → posição é melhor definida, mas devido à combinação de λ → p incerto



(b)

O Princípio de Incerteza de Heisenberg

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

pode ser aproximado por:

$$\Delta x \, \Delta p \approx \hbar$$

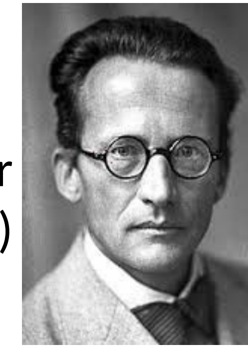
Uma relação similar existe entre a incerteza na medida da energia e o intervalo de tempo:

$$\Delta E \, \Delta t \approx \hbar$$

O conceito do princípio de incerteza será utilizado no Cap. 9 para definir a largura das linhas espectrais.

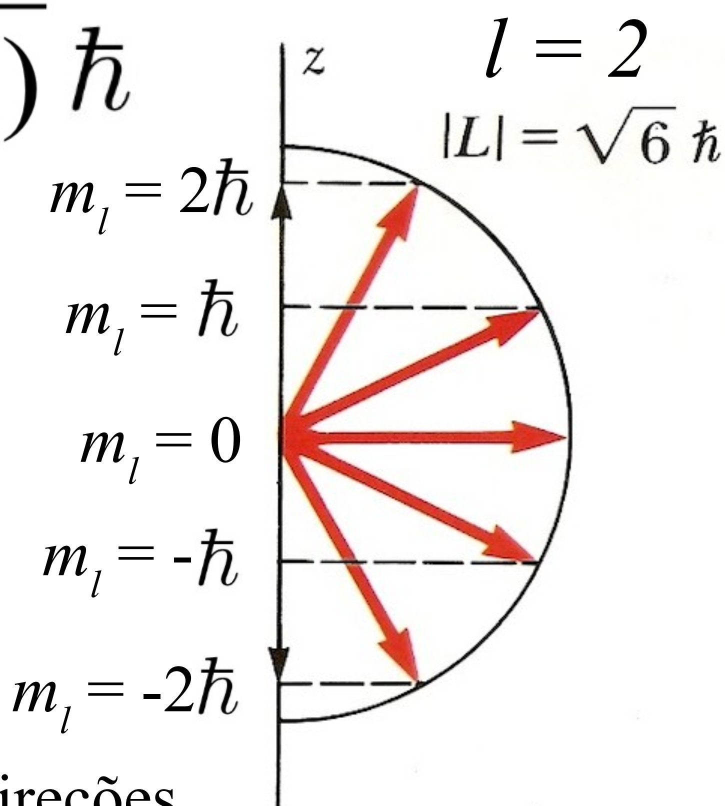
Equação de Schrödinger e o átomo da Mecânica Quântica

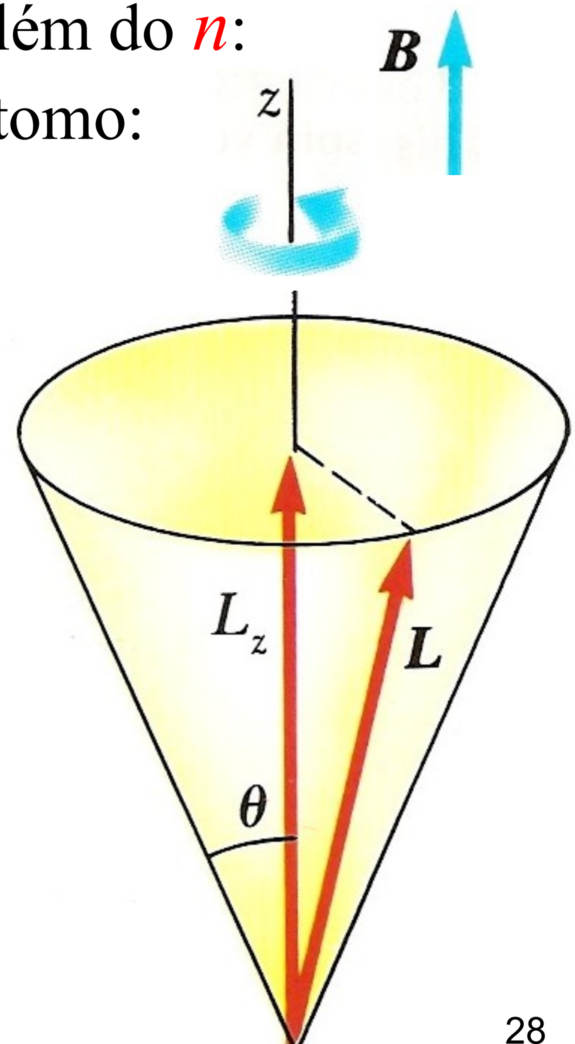
Erwin Schrödinger (1877– 1961)



Para descrever os orbitais do elétron, Schrödinger (1926) propôs dois números quânticos a mais além do n: l e m_l, que descrevem o momento angular do átomo:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$





A componente L_Z só pode assumir os valores $L_Z = m_l\hbar$

$m_l = -l, \ldots, 0, \ldots +l$

$\rightarrow$ L pode ter $2l+1$ direções

Números quânticos n, l, m_l

n: número quântico principal, que determina a energia

$n = 1, 2, 3 \ldots$

l : número quântico de momento angular

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots, (n\text{-}1)$ = s, p, d, f, g, …

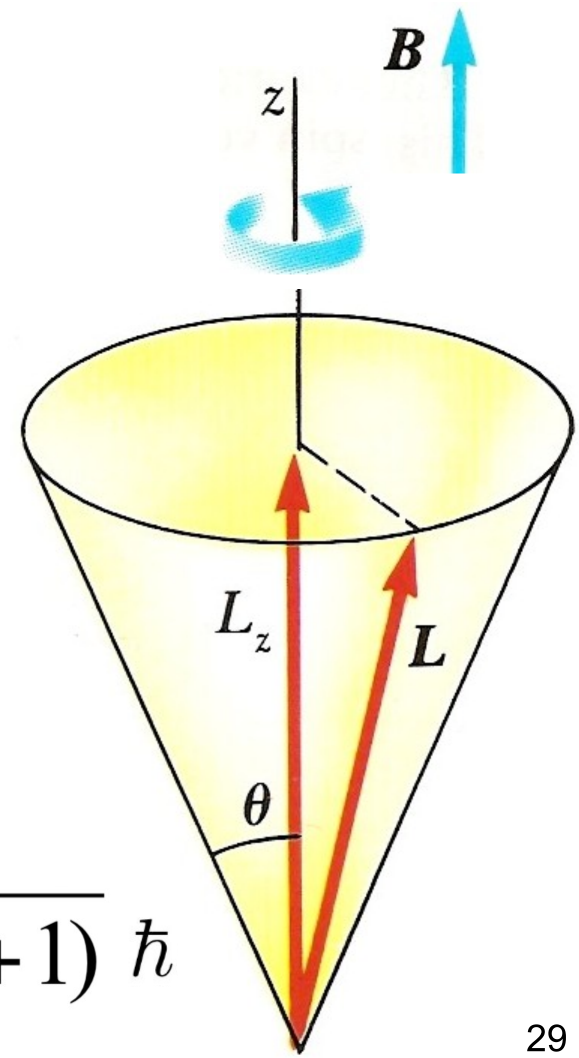
(ou seja, s é $l = 0$, p é $l = 1$, d é $l = 2$, etc.)

Componente L_z quantizada: $L_z = m_l \hbar$

m_l : número quântico magnético

$m_l = -l, \ldots, -1, 0, +1, \ldots, +l$

$\rightarrow$ L pode ter $2l+1$ direções



$$L = \sqrt{l(l+1)}\ \hbar$$

Visualização espacial de orbitais para n = 1, 2, 3 e l = 0

n: número quântico principal

l = 0, 1, 2, 3, …, (n-1) = s, p, d, f, ...

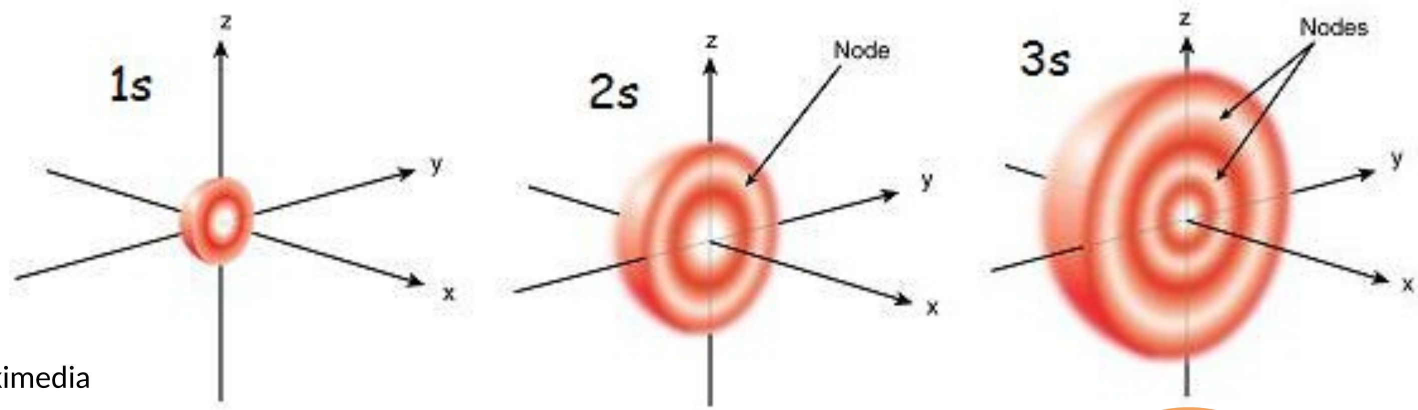
m_l = -l, … , -1, 0, +1, … , +l

Como l = 0, o número quântico magnético é sempre zero, $m_l = 0$

n = 1, l = 0
→ orbital 1s

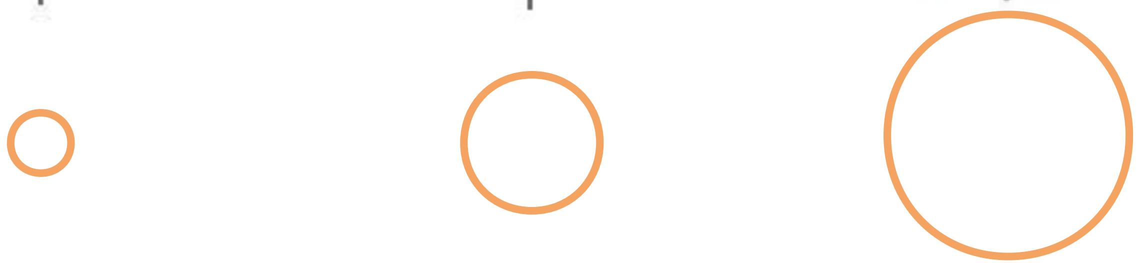
n = 2, l = 0
→ orbital 2s

n = 3, l = 0
→ orbital 3s



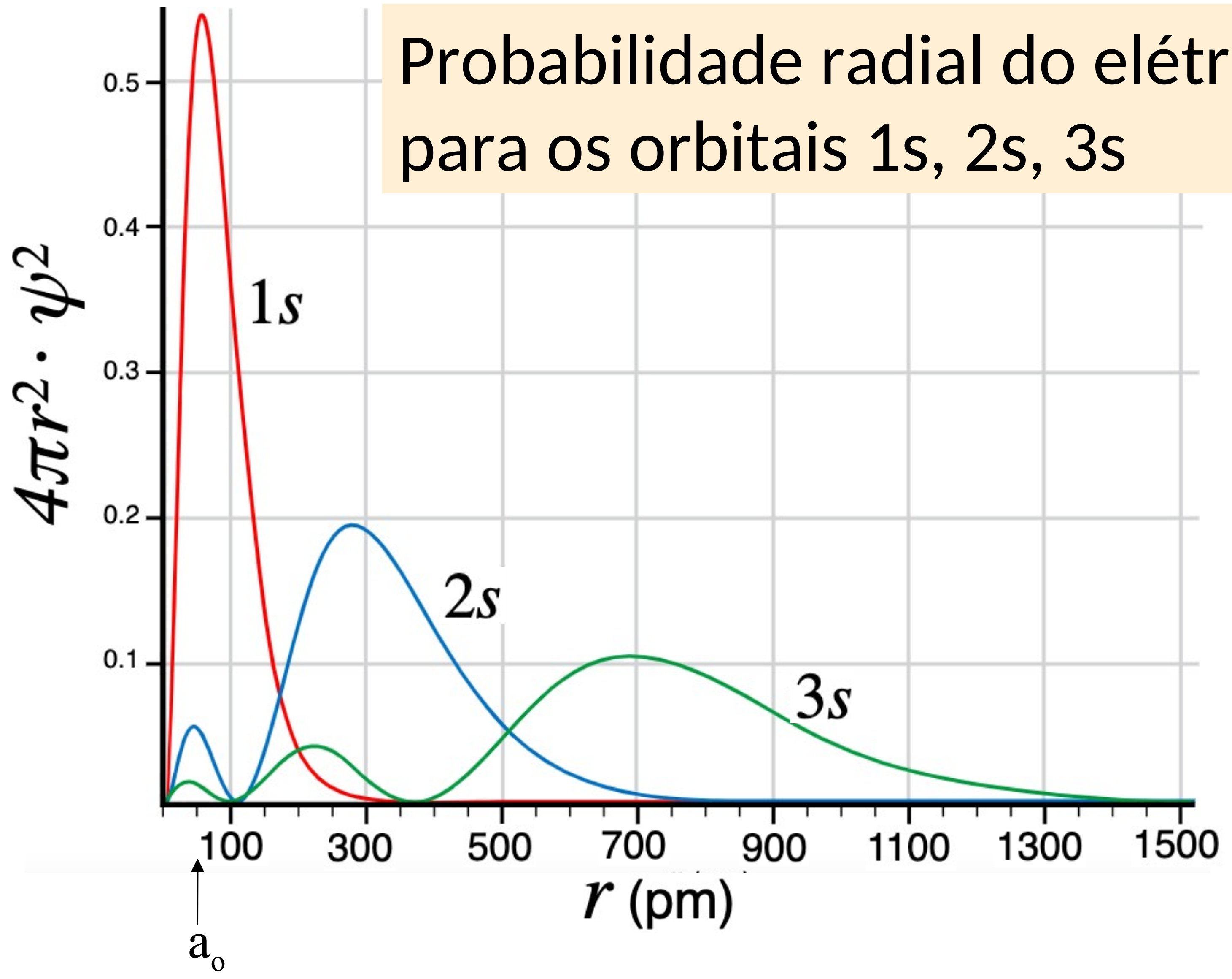
(c) Wikimedia

Mecânica quântica
Ψ^2



Átomo de Bohr

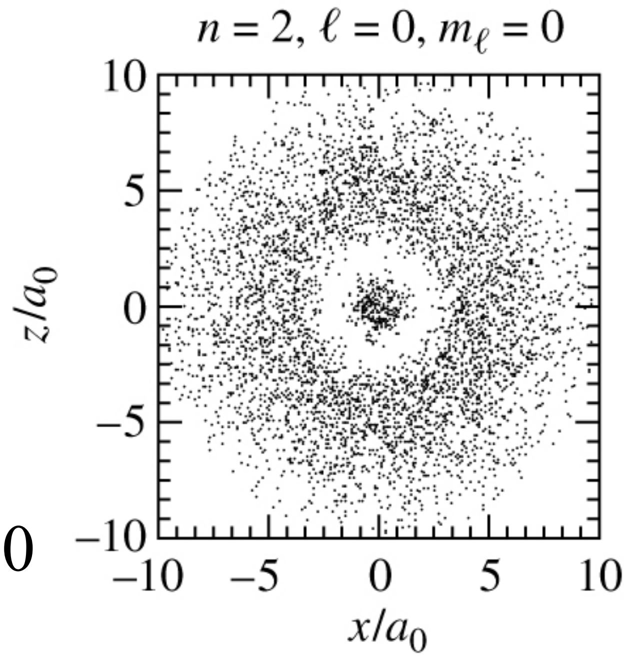
Probabilidade radial do elétron para os orbitais 1s, 2s, 3s



1 pm = 10^{-12}m

(c) https://ch301.cm.utexas.edu/svg/radial-distrib.svg

Visualização espacial de orbitais



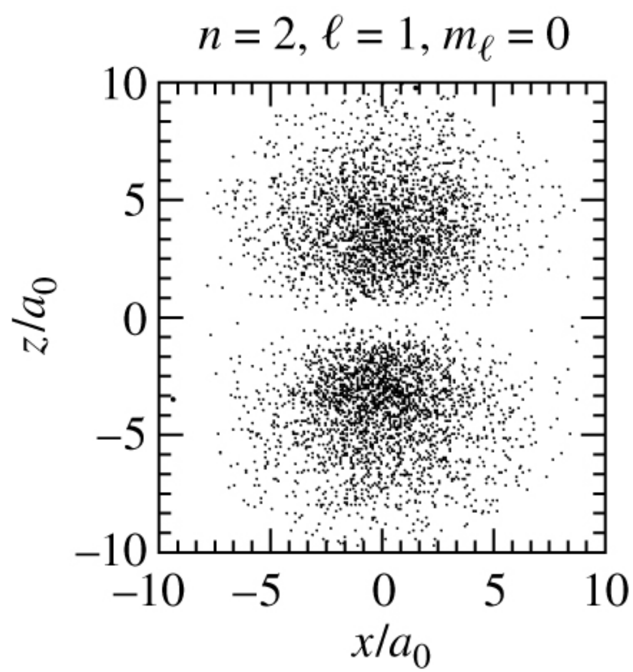
n: número quântico principal

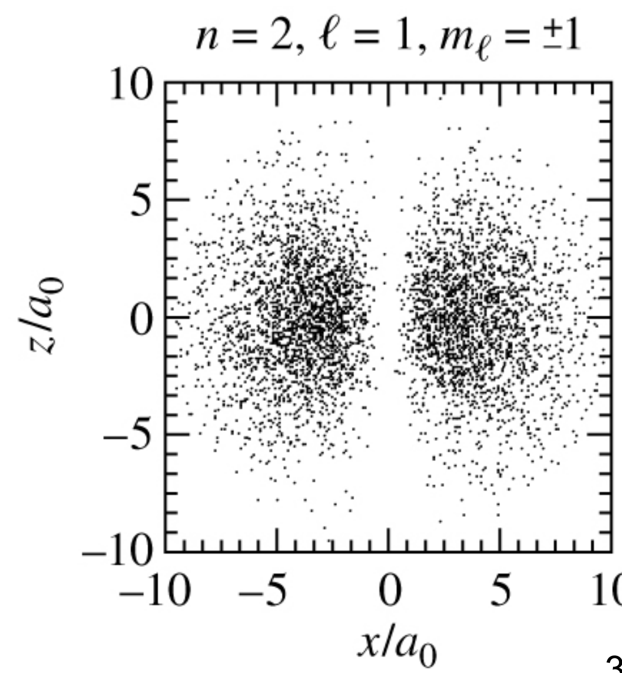
$l = 0, 1, 2, 3, \ldots, (n\text{-}1) = $ s, p, d, f, ...

$m_l = -l, \ldots, -1, 0, +1, \ldots, +l$

Exemplo: $(n = 2, l = 0) \rightarrow$ orbital 2s: $m_l = 0$

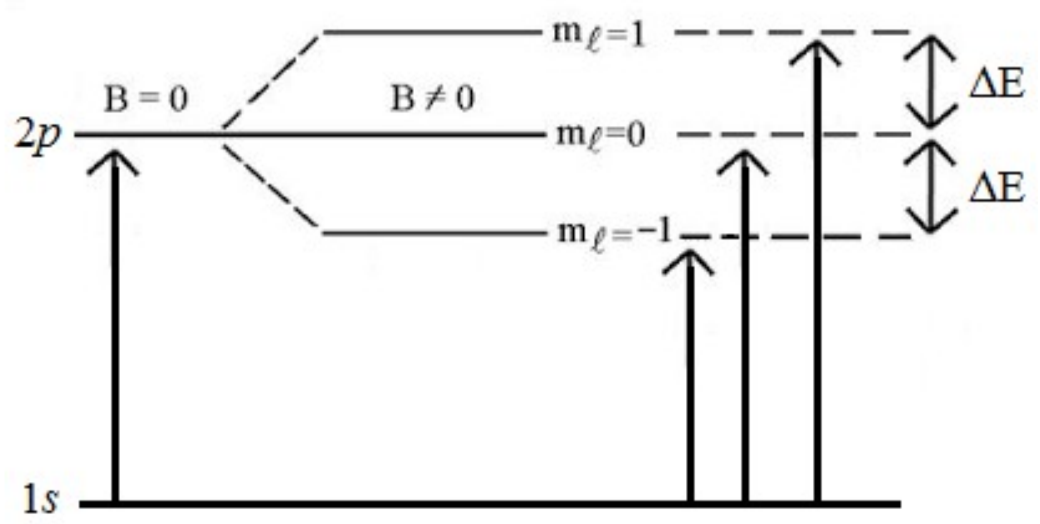
Exemplo:
$(n = 2, l = 1)$
$\rightarrow$ orbital 2p
$m_l = -1, 0, +1$





Probabilidade espacial de encontrar um elétron no átomo de hidrogênio. Os números quânticos n (energia total), l (momento angular), m_l (componente z do momento angular) definem os orbitais do elétron.

Diferentes orbitais, denominados pelos diferentes valores de l e m_l são chamados degenerados se eles têm o mesmo valor do número quântico principal n → mesma energia. Transições de elétrons para orbitais degenerados → uma mesma linha espectral.



Mas são sensíveis ao campo magnético (B) → orbitais degenerados com pequenas diferenças em ΔE → divisão das linhas espectrais → Efeito Zeeman normal, assumindo 3 possíveis valores de frequência:

$$\nu = \nu_o \quad \text{e} \quad \nu_o \pm \frac{eB}{4\pi\mu}$$

onde ν_o é a frequência na ausência de B e μ é a massa reduzida

Exemplo: Campo magnético das nuvens interestelares

muito fraco $B \approx 2 \times 10^{-10}$ T*

Radiotelescópios permitem medir a variação na polarização por meio das componentes Zeeman das linhas de absorção produzidas pelas nuvens de hidrogênio. Essas linhas apresentam-se misturadas (*blended*).

A variação na frequência é: $$\Delta\nu = \frac{eB}{4\ \pi\ m_e} = 2{,}8\ \text{Hz}$$

e a variação total (de um lado ao outro da linha com *blend*) é $2 \times \Delta\nu = 5{,}6$ Hz

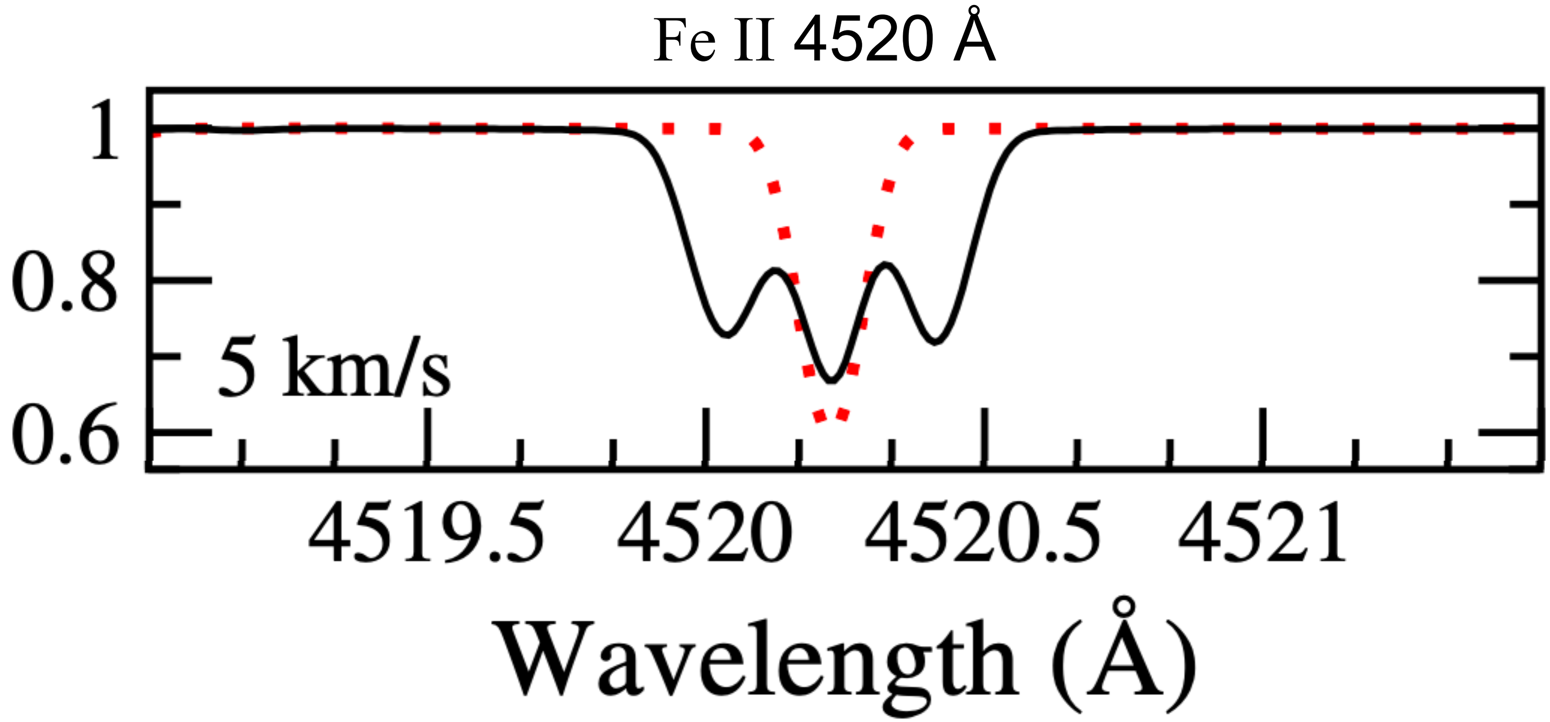
Como comparação, para a linha do hidrogênio medida em rádio $\lambda = 21$cm é $\nu = 1{,}4\ \times 10^9$ Hz

(*) relação entre Tesla e Gauss: $1\ G = 10^{-4}\ T$

Exemplo: espectro sintético de estrela de tipo A

------ sem a presença de campo magnético

—— com forte campo magnético (15 kG)



Bailey 2014, A&A, 568, A38

Modelo da linha de FeII 4520 Å em estrela de tipo A com baixa velocidade de rotação (5 km/s). Notar que estrelas desse tipo têm velocidades de rotação muito maiores, o que pode dificultar a medição da intensidade do campo magnético.

O Spin e o Princípio de Exclusão de Pauli

Wolfgang Pauli
(1900– 1958)

Efeito Zeeman Anômalo causa uma divisão adicional das linhas devido ao spin do elétron, cujo momento angular é:

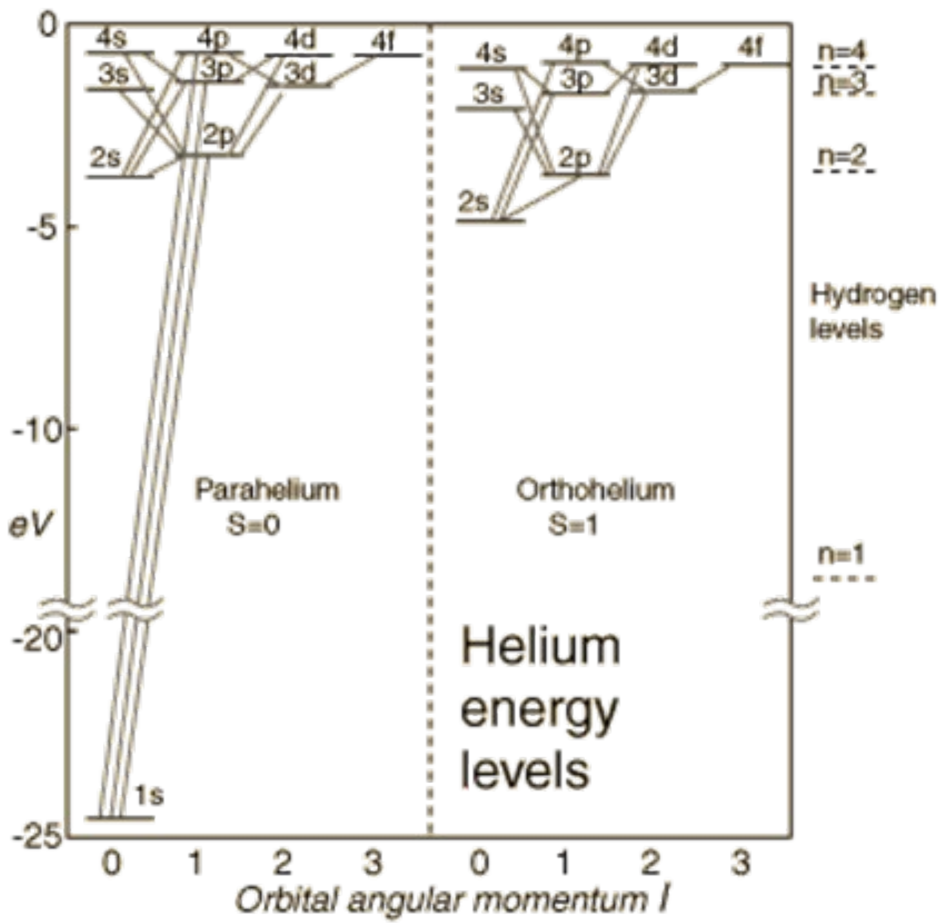
$$S = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

A componente z é $S_z = m_s \hbar$

e os únicos valores possíveis do 4º número quântico são $m_s = \pm 1/2$

Princípio de exclusão de Pauli: *dois elétrons não ocupam um mesmo estado quântico* (não compartilham um mesmo conjunto de números quânticos).

Os espectros complexos dos átomos



Níveis eletrônicos do átomo de He.
http://slideplayer.com/slide/5879841/

O estado detalhado de cada elétron é descrito por todos os números quânticos:
n, l, m_l e m_s

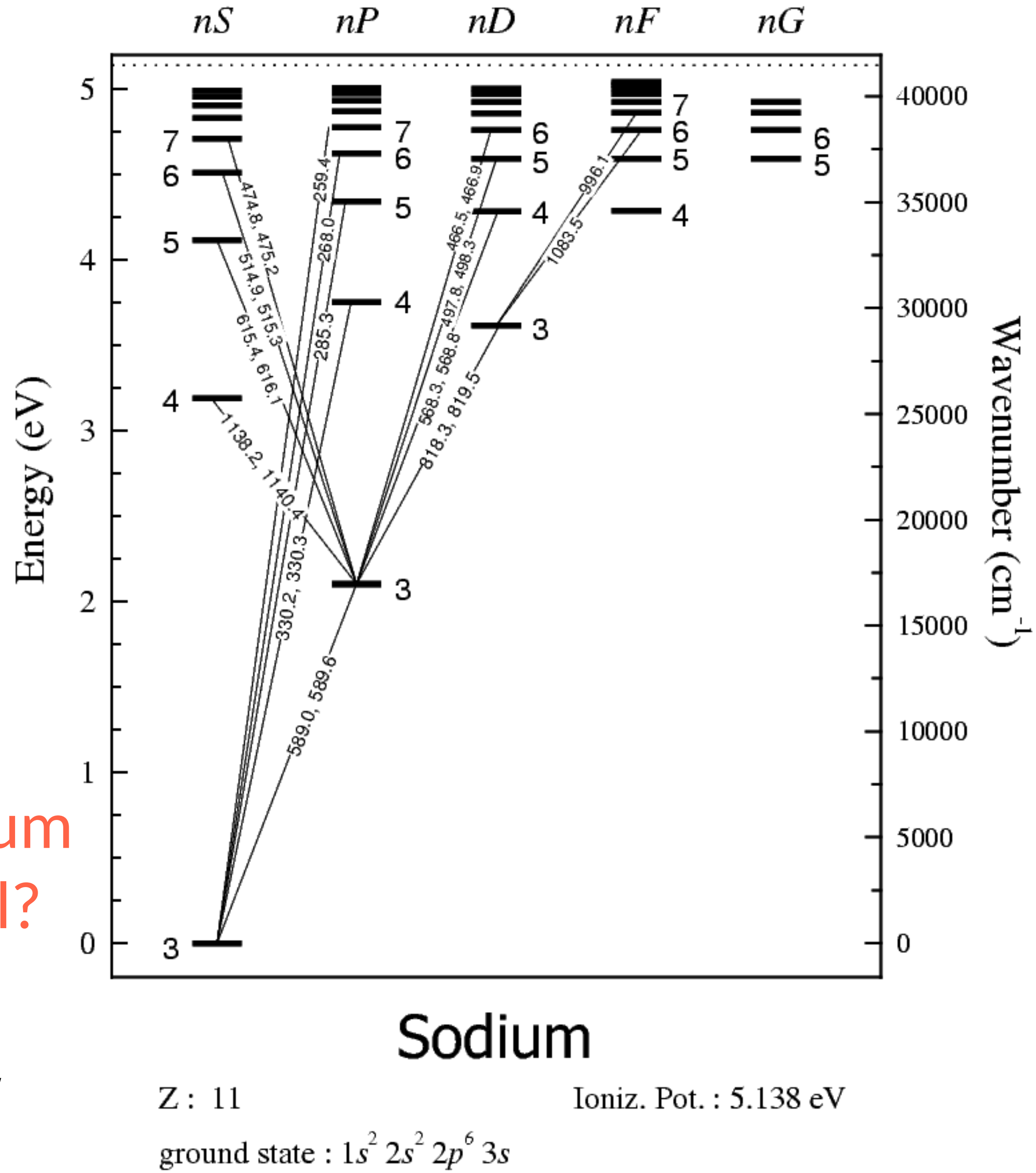
Sómente são permitidas as transições que seguem algumas regras, como $\Delta l = \pm 1$. Transições fora dessas regras são chamadas proibidas, que podem ocorrer numa escala de tempo muito maior, em ambientes astrofísicos de muita baixa densidade.

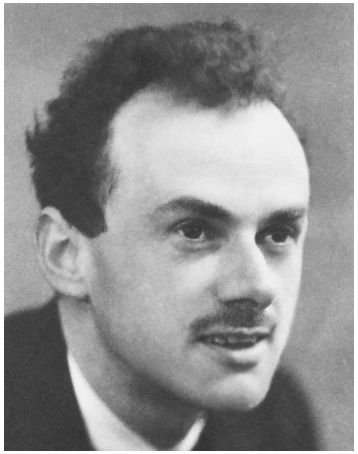
Diagrama de níveis de energia

(*term* ou *Grotrian diagram*)
para o Na I

Qual a chance de ocupar (popular) um determinado nível?
Capítulo 8

http://128.104.164.100/data/e_sodium.gif





Paul Dirac (1928) combinou a equação de onda de Schrödinger com a relatividade de Einstein, desenvolvendo uma equação para o comportamento relativístico do elétron.
A solução da equação de Dirac:

- Naturalmente previa o spin do elétron.
- Previsão da existência do pósitron (antipartícula do elétron)

Dirac estendeu o princípio de exclusão de Pauli para uma família de partículas chamadas por ele de 'Férmions'. São partículas como o elétron, próton e nêutron, que tem spin de ½, e no geral partículas com spin semi-inteiro.

Bósons são partículas com spin inteiro, e não cumprem o princípio de exclusão de Pauli.