

Falhas da Mecânica Clássica

Química Teórica e Estrutural

P.J.S.B. Caridade & U. Miranda

30/09/2013 – 3/10/2013, Aula 2

E no início havia ... a Mecânica Clássica



Aristoteles (384 AC-320 AC):
"Everything happens for a reason"



Galileo
1564-1642



Kepler
1571-1630



Newton
1642-1727



Lagrange
1736-1813



Hamilton
1805-1865



Maxwell
1831-1879



Kelvin (1824-1907):
"There is nothing new to be discovered in physics now.
All that remains is more and more precise measurement."

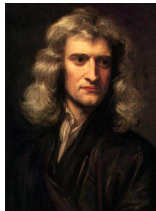
Mecânica clássica: propriedades físicas

- ▶ Distância: $d = x_2 - x_1$
- ▶ Velocidade: $v = dx/dt$
- ▶ Momento linear: $p = mv$
- ▶ Energia cinética: $T = mv^2/2 = p^2/2m$

Leis de Newton

- ▶ Três leis fundamentais não deduzíveis (axiomáticas)
- ▶ 2ª Lei do movimento de Newton:

$$F = ma = m \frac{d^2x}{dt^2}$$



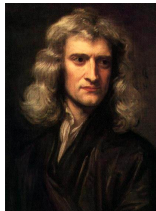
Isaac Newton
(1642-1727)

Leis de Newton

- ▶ Três leis fundamentais não deduzíveis (axiomáticas)
- ▶ 2ª Lei do movimento de Newton:

$$F = ma = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

- ▶ Equação diferencial de segunda-ordem.



Isaac Newton
(1642-1727)

Leis de Newton

- ▶ Três leis fundamentais não deduzíveis (axiomáticas)
- ▶ 2ª Lei do movimento de Newton:

$$F = ma = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

- ▶ Equação diferencial de segunda-ordem.
- ▶ Mecânica determinística.
- ▶ Momento rotacional:

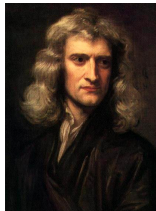
$$\omega = \frac{d\theta}{dt} \quad \Leftarrow \text{velocidade angular}$$

$$v = r\omega$$

- ▶ Momento angular:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m\vec{v} = I\vec{\omega}$$

$$T_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2$$



Isaac Newton
(1642-1727)

Formulação de Hamilton

- ▶ Hamiltoniano do sistema:

$$H = T + V$$

- ▶ No caso de um sistema isolado:

$$H = \text{cte}$$

- ▶ Duas equações diferenciais de 1ª ordem:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$$



Hamilton
(1805-1865)

Ondas no formalismo clássico

- ▶ Comprimento de onda, λ : distância entre dois picos consecutivos.
- ▶ Amplitude: perturbação máxima durante um ciclo da onda.
- ▶ Velocidade, $v = \lambda/\tau$.
- ▶ Frequência: Número de ciclos por unidade de tempo que a onda repete um dado ponto.
- ▶ Interferência: *“se duas ondas chegarem simultaneamente a um ponto do espaço o seu efeito é idêntico a uma onda cuja amplitude é a soma algébrica das componentes individuais”*
- ▶ Equação fundamental do movimento de onda (1D):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{1}{v^2} \frac{d^2\Psi}{dt^2}$$

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \sin(kx - \omega t)$$

$$\omega = kv = \frac{2\pi}{\lambda} v$$



Maxwell
(1831-1879)

Experiência de Young



Thomas Young
(1773-1829)

Radiação: onda ou partícula?

- ▶ Comportamento corpuscular: Newton, **Difracção**.
- ▶ Comportamento ondulatório: Huggens & Hook, **Reflexão e refacção**.
- ▶ Efeitos de **interferência**, não pode ser corpuscular: Young & Fresnel
- ▶ Foucault mede a velocidade da radiação no ar e em água.
- ▶ Maxwell propõe a teoria electromagnética de ondas confirmando as medições de Hertz.
- ▶ Hertz descobre dois fenómenos contraditórios: radiação electromagnética (onda) e efeito fotoeléctrico (corpúsculo).

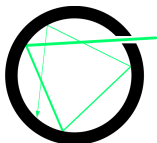
Colapso da mecânica clássica

- ▶ **Radição de corpo-negro:** comunicações por fibra óptica; sinais ópticos e lcd; técnicas de iluminação; janelas inteligentes.
- ▶ **Efeito fotoelétrico:** Células fotovoltaicas; células solares; painéis fotovoltaicos.
- ▶ **Difracção de raios-X:** aplicação médicas; segurança.
- ▶ **Efeito de Compton:** terapia por radiação; espectroscopia de raios- γ ; Física de partículas.

Radiação de corpo negro

- ▶ Corpo negro é um objecto que absorve toda a radiação incidente.
- ▶ Quando aquecido emite radiação.
- ▶ Expressão de Rayleigh-Jeans:

$$\begin{aligned}E(\nu, T)d\nu &= \bar{E} \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu \\ &= k_B T \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu\end{aligned}$$

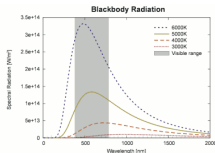


$E(\nu, T)$ corresponde à energia total por unidade de volume.

- ▶ Energia média:

$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E \exp(-E/k_B T) dE}{\int_0^\infty \exp(-E/k_B T) dE} = k_B T$$

- ▶ Catástrofe do ultra-violeta!



Radiação de corpo negro: Plank

- ▶ Hipótese de Planck: *osciladores com níveis discretos de energia*

$$E_n = nh\nu$$

- ▶ Sendo energia discreta: $\int \rightarrow \sum$
- ▶ A energia média:

$$\bar{E} = \frac{\sum nE_n \exp(-nE_n/k_B T)}{\sum \exp(-nE_n/k_B T)}$$

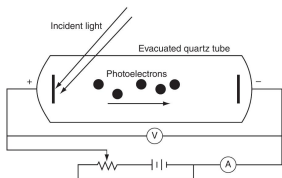
- ▶ Energia:

$$E(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \left[\exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \rightarrow \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \sim 1 + \frac{h\nu}{k_B T}$$



Planck
(1858-1947)

Efeito fotoelétrico



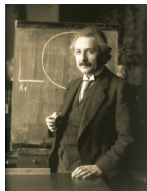
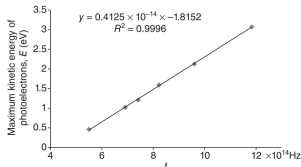
Hertz
(1857-1894)



Millikan
(1858-1953)

- ▶ Metal irradiado, fotoelectrões emitidos instantaneamente.
- ▶ A uma dada frequência de radiação incidente, o número de fotões é directamente proporcional à intensidade da radiação.
- ▶ A energia dos fotoelectrões emitida é proporcional à intensidade e não à frequência.
- ▶ Existe uma frequência mínima para a qual não ocorre emissão.

Efeito fotoelétrico: ajuda quântica



Einstein
(1879-1955)

- ▶ A radiação é constituída por corpúsculos (quanta) de energia $h\nu$.
- ▶ A emissão de um fotoelectrão ocorre quando, por colisão, o electrão receber energia suficiente para se libertar do metal.
- ▶ Pelo princípio de conservação da energia: $E_c = E_{\text{feixe}} - E_{\text{escape}}$ e $E_c = h\nu - W$

Onda de De Broglie

- ▶ Louis De Broglie propôs que toda a partícula em movimento teria associada uma onda, **onda de De Broglie**.
- ▶ Da teoria da relatividade:

$$E = (m_0^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2}$$

E : energia total da partícula.

p : momento.

m_0 : massa em repouso

$m_0 = 0$ para um fóton!

- ▶ Por Planck: $E = h\nu$ e sabendo que $\lambda = c/\nu$:

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

- ▶ Qualquer partícula tem um comprimento de onda associado, dado que:

$$m = m_0 \left[1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right]^{1/2}$$



De Broglie
(1892-1987)