Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I
AULA 12

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

2o. Semestre de 2018
Monitor: Felipe Prado

https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495

Conteúdo P1

- **Panorama da Física no final do século XIX**
- **Natureza Ondulatória da Radiação eletromagnética**
  - **Radiação Térmica – Hipótese de Planck**
- **Dualidade onda – partícula: Radiação eletromagnética e as propriedades corpusculares**
  - **Efeito fotoelétrico**
  - **Efeito Compton**
  - **Produção e aniquilação de pares**
  - ~~**Difração de raios-X**~~
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades corpusculares**
  - **Natureza atômica da matéria**
  - **Modelo de Thomson**
  - **Modelo de Rutherford**
  - **Modelo de Bohr**
  - **Modelo de Sommerfeld –FranckHertz**
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades ondulatórias**
  - **Postulado de de Broglie**
  - **Difração de elétrons,**
  - **Difração de Bragg**
  - **Principios de incerteza**
- **Teoria de Schroedinger da Mecânica Quântica**
  - **Equação de Schroedinger – equação de onda para o elétron**
  - **Autofunções e autovalores**
  - **Valores esperados**
  - **Potenciais nulo, degrau e poço quadrado**
- **Átomo de Hidrogênio**

Crítica da Teoria de Bohr e da “velha” Mecânica quântica

Vimos que os fenômenos:

1) Radiação de corpo negro
2) Efeito fotoelétrico
3) Efeito Compton
4) Espectro ótico do hidrogênio
5) Espectros de raios X de muitos elementos

Puderam ser explicados pelas hipóteses de quantização

Soma de ideias clássicas e quânticas – conhecidas como ‘VELHA” MECÂNICA QUÂNTICA

O SUCESSO da teoria de Bohr:

1) várias linhas espectrais desconhecidas foram previstas e mais tarde observadas
2) o raio da primeira órbita de Bohr do hidrogênio (0,053nm) era compatível com o diâmetro conhecido da molécula do hidrogênio
3) os comprimentos de onda dos espectros característicos dos raios X puderam ser calculados

O FRACASSO da teoria de Bohr:

1) Não era possível calcular as probabilidades das transições do espectro de H
2) A teoria não podia ser aplicada a sistema com mais de um elétron
3) Apresentava falhas conceituais das validades das leis de Coulomb, de radiação e de Newton
4) Apenas certos momentos angulares poderiam ser permitidos

Hipóteses de De Broglie

- A hipótese de de Broglie em sua tese de doutorado de 1924, era que o comportamento dual (onda-partícula) da radiação eletromagnética poderia ser aplicado a matéria
- Vimos que podemos associar a um fóton uma frequência de uma onda luminosa que governa seu movimento $E = h\nu$
- E um momento do fóton é relacionado ao comprimento de onda

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

- Então segundo de Broglie se ondas de luz tem propriedades de partículas, partículas devem ter propriedades de onda. E propôs que ambas as relações cima são validas também para partículas.
- Deste modo, o comprimento de onda (não relativístico) associado a partícula de massa m e velocidade v é:

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

Exemplo:

Corpos macroscópicos ⇒ massa ⇒ momento ⇒ λ pequeno

Objeto de massa de 1 kg com v=10 m/s
⇒ λ = *h*/*mv* = 6,6 x 10^{-34} J.s/10 kg.m/s
⇒ λ = 6,6 x 10^{-35} m = 6,6 x 10^{-20} fm.

É impossível de ser observado

Elétron Qual é o comprimento de onda associado, se este possui energia cinética de 100 eV:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2E}} = \frac{1{,}24keVnm}{\sqrt{2.5.10^5.100(eV)^2}} = 0{,}12nm = 1.2\,\overset{0}{A}$$

Comprimento de onda é pequeno, da mesma ordem de grandeza que o tamanho de um átomo e que o espaçamento dos planos atômicos de um cristal

⇒

Propriedades ondulatórias dos e^- podem ser observadas semelhantemente ao efeitos de **difração e interferência parecido como os raios-X**

Difração de RX

Na descoberta do RX Roentgen verificou que os raios X (recém-descobertos):

- Não eram afetados pela presença do campo magnético
- E não conseguiu observar os efeitos de refração e interferência normalmente associados as ondas.
- O pequeno alargamento sofrido por um feixe de raios X ao passar por uma fenda de alguns milésimos de milímetros de largura indicava que

$$\lambda \sim 10^{-10} m = 0{,}1 nm$$

- Laue em 1912 sugeriu que como λ eram da mesma ordem o espaçamento dos átomos em um cristal, estes átomos poderiam então se comportar como uma rede de difração tridimensional para os raios X .

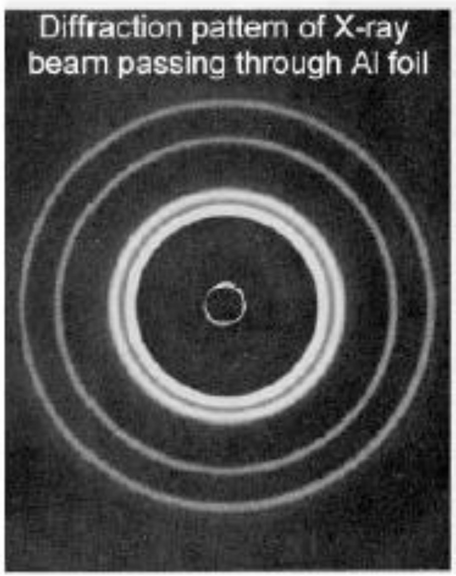
Para ocorrer o fenômeno da difração é preciso que a dimensão do "obstáculo óptico" (abertura da fenda, espaçamento em uma rede de difração, etc.) seja da ordem de grandeza do comprimento de onda que se deseja estudar

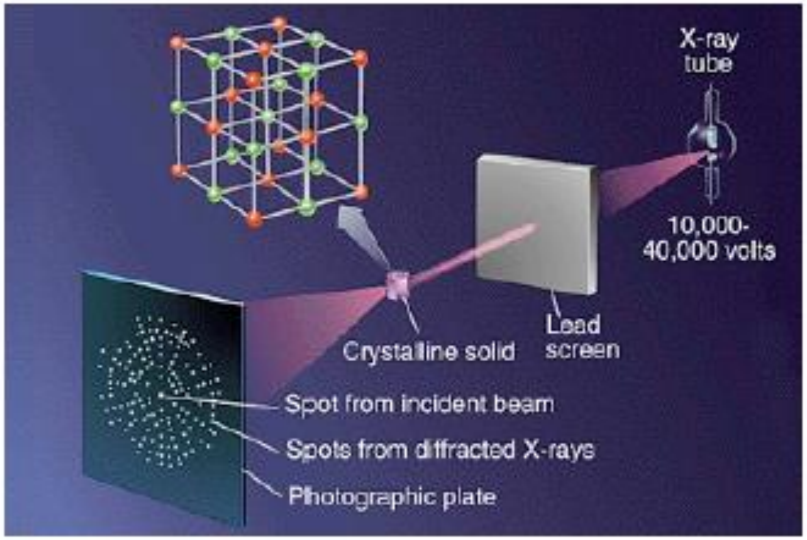
Difração de RX

•Bragg em 1912 estudou a difração de raios X em várias famílias de planos paralelos de átomos

•As ondas difratadas com o mesmo ângulo por átomos situados em planos diferentes estarão em fase (interferência construtiva) se a diferença entre os dois percursos foi igual ao um numero inteiro de comprimento de onda

$$2d sen\theta = n\lambda$$



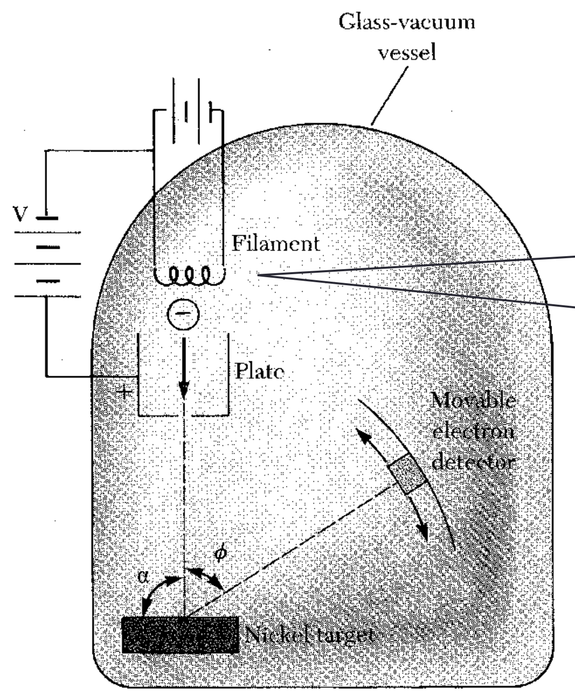


Difração de elétrons

Testes experimentais da hipótese de de Broglie

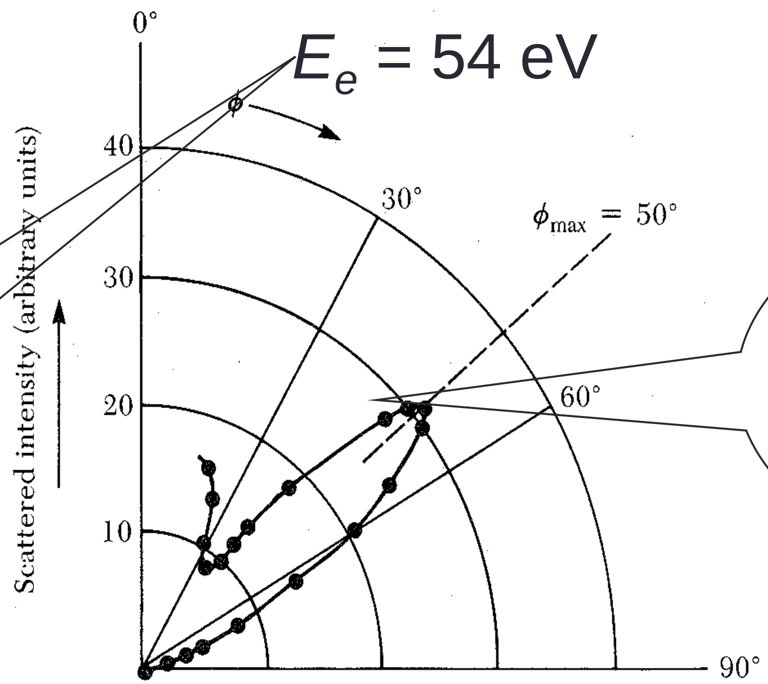
1927 Davisson e Germer (USA) e G. Thomson (Escócia):

- **Estudaram a quantidade de elétrons que eram espalhados em uma superfície de Ni em função do ângulo de espalhamento**



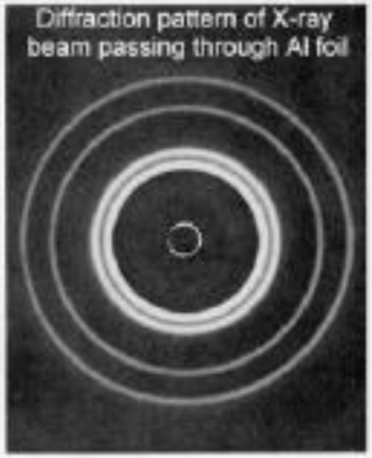
Potencial faz com que os e^- sejam emitidos com E (eV)

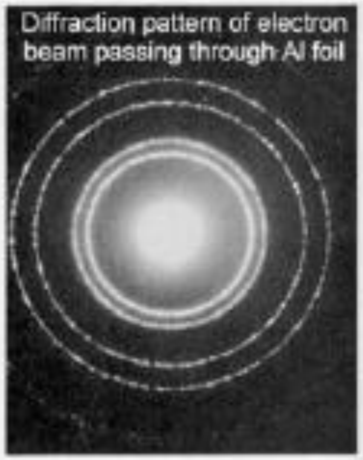
Difração de elétrons



E a energia que tem corrente máxima no detector

A existência deste pico em 50º mostra qualitativamente o postulado de de Broglie pois só pode ser explicado com uma interferência construtiva de ondas espalhadas



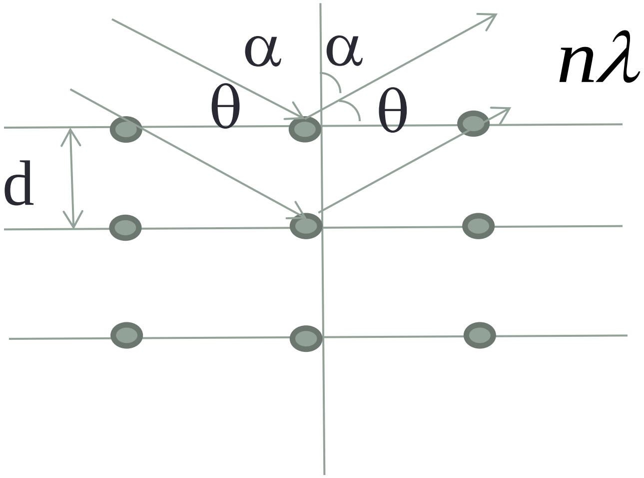


Difração de elétrons

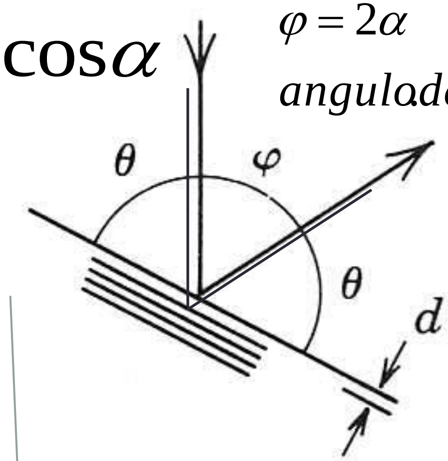
Máximo $\Rightarrow$

$\varphi = 2\alpha$

angulo.de.espalhamento



$$n\lambda = 2d sen\theta = 2d\cos\alpha$$



d é a distância entre os planos de Bragg esta relacionada a distância interatômica D através da relação: $d = Dsen\alpha$

$$n\lambda = 2Dsen\alpha\cos\alpha$$

$$n\lambda = Dsen2\alpha = Dsen\phi$$

Medidas de difração de RX revelaram que D=0,215nm para o Ni.

O comprimento de onda então calculado para n=1

$$\lambda = 0{,}215 sen 50 = 0{,}165 nm$$

Ou usando a distância Interplanar:

Medidas com raios-X ⇒ d = 0,091 nm

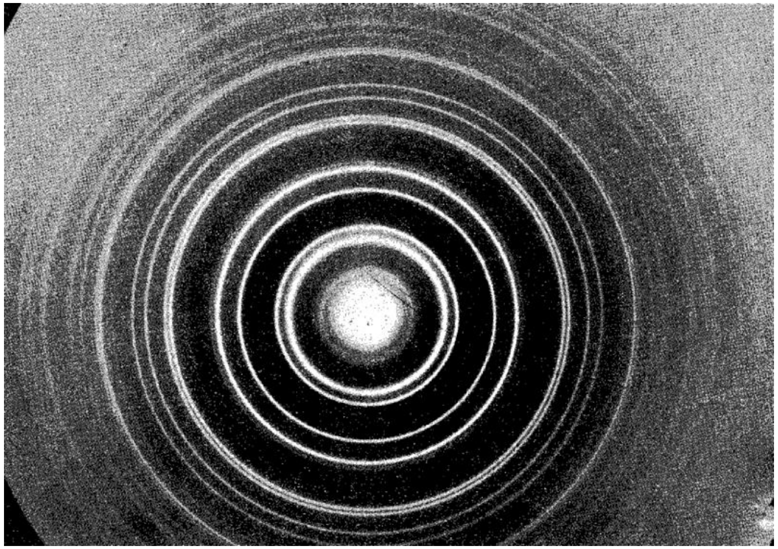
Máximo em φ = 50º⇒λ= 2$d$cosφ/2 = 2x0,091x0,906 = 0,165 nm

Calculado por De Broglie para elétrons de 54eV e´:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2E}} = \frac{1{,}24keVnm}{\sqrt{2.5.10^5.54(eV)^2}} \approx 0{,}168nm$$

G.P. Thomson Nobel em 1937

Difração de feixe de elétrons



Semelhantes experimentos com feixes de prótons, nêutrons e mesmo átomos apresentam o mesmo fenômeno de difração mostrando que as relações de de Broglie são universais.

O pai G. Thomson ganhou o Nobel por ter descoberto e^- e ter caracterizando-o como partícula. E o filho ganhou o Nobel por mostrar que o e^- é uma onda

Caso relativístico

- Para se determinar uma expressão equivalente que se aplique tanto as partículas relativísticas como não-relativísticas:

Energia total

$$E = E_0 + E_K$$

$$E = \gamma mc^2 = E_K + mc^2$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-u^2/c^2}}$$

$$mc^2 = E_0$$

Energia de repouso da partícula

Energia cinética relativística

$$E_K = \frac{mc^2}{\sqrt{1-u^2/c^2}} - mc^2$$

u/c<<1 – temos a energia cinética clássica

$$\frac{1}{\sqrt{1-u^2/c^2}} = \left(1-\frac{u^2}{c^2}\right)^{-1/2} \approx 1+\frac{1}{2}\frac{u^2}{c^2}+....$$

$$E_K = mc^2\left(1+\frac{1}{2}\frac{u^2}{c^2}+...\right) - mc^2 = \frac{mu^2}{2}$$

Caso relativístico

- Para se determinar uma expressão equivalente que se aplique tanto as partículas relativísticas como não-relativísticas:

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$$

$$mc^2 = E_0$$

Energia de repouso da partícula

$$(E_0 + E_K)^2 = (pc)^2 + (E_0)^2$$

Energia total

$$E = E_0 + E_K$$

$$p = \frac{\left(2E_0E_K + E_K^2\right)^{1/2}}{c}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\left(2E_0E_K + E_K^2\right)^{1/2}}$$

Aplicável a qualquer partícula com qualquer energia

Durante a década de 1920 – proposta da mecânica ondulatória (de Broglie, Schrödinger, Heisenberg, Pauli, Dirac e outros)

Propriedades ondulatórias da matéria – Cap. 3 Eisberg

- Vimos que as partículas que constituem a matéria (elétron) possuem propriedades ondulatórias

QUESTÕES:

1) Como podemos descrever este elétron então?
2) O que seria esta "onda" que constitui o elétron
3) O elétron é uma "onda" se propagando em que meio?
4) Como descrever esta "onda" matematicamente?

Dualidade Onda-partícula

- Bohr elaborou o Princípio da complementaridade:
  - "o caráter ondulatório e o corpuscular da natureza são complementares, isto é, ou se observa a manifestação do comportamento ondulatório de um sistema físico ou do comportamento corpuscular, nunca os dois simultaneamente"

Associaremos uma função de onda ψ (probabilidade da partícula ser observada em uma certa posição em um certo instante de tempo)

v é a velocidade de fase

Função de onda $\Psi(x,t)$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

que é solução da equação de onda

$$\Psi(x,t) = A\cos k(x - vt)$$

$$\Psi(x,t) = A\,\mathrm{sen}\,k(x - vt)$$

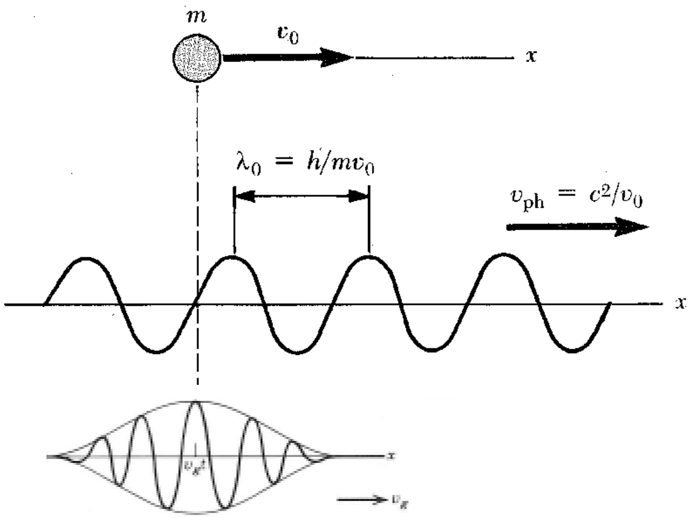
Uma solução simples é a chamada onda harmônica

$$\Psi(x,t) = A\cos(kx - wt)$$

Curva que viaja na direção de x positivo

Cujo nº de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Velocidade de fase $v = f\lambda$

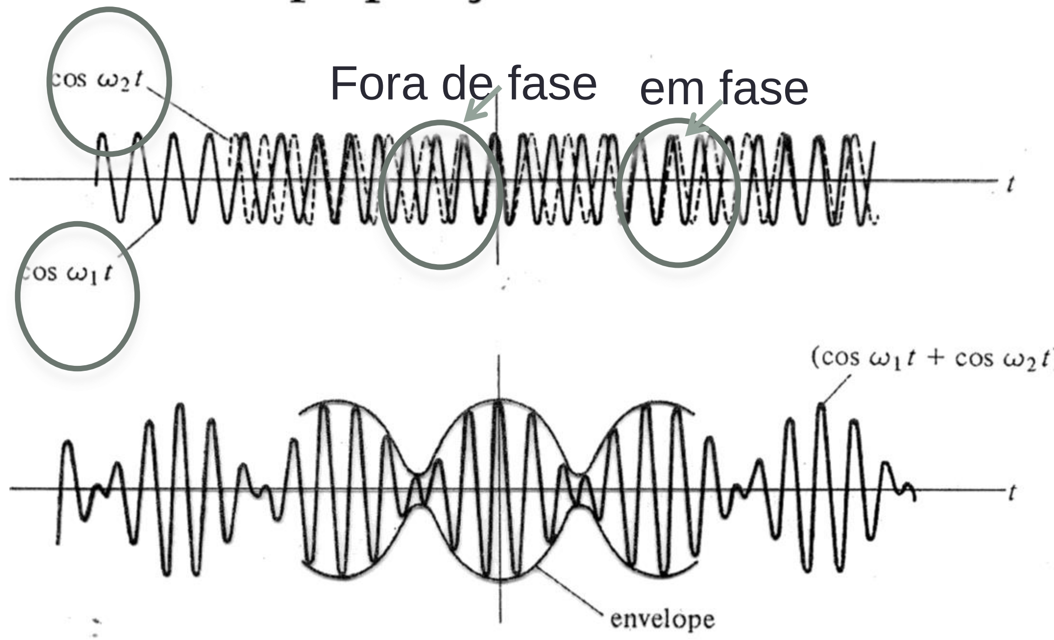


- Para representar uma partícula, devemos utilizar uma onda "localizada" no espaço, ou seja, um "pacote de ondas", cuja velocidade de grupo coincide com a velocidade da partícula

Partícula ↔ onda localizada (pacote de onda).

Como produzir um pacote?

Superposição de 2 ondas



1) pacote de onda é obtido a partir de uma combinação de várias ondas de frequências diferentes

2) Neste caso, duas onda de frequências próximas se combinam resultado em vários pacotes ou grupos de onda

Soma de 2 ondas

$$y_1 = A\cos(k_1 x - \omega_1 t) \qquad \text{e} \qquad y_2 = A\cos(k_2 x - \omega_2 t)$$

$\omega = 2\pi f$ e $k = 2\pi/\lambda$. Adicionamos as ondas usando o princípio de superposição:

$$y = y_1 + y_2 = A\cos(k_1 x - \omega_1 t) + A\cos(k_2 x - \omega_2 t)$$

É conveniente escrever isso em uma forma que use a identidade trigonométrica

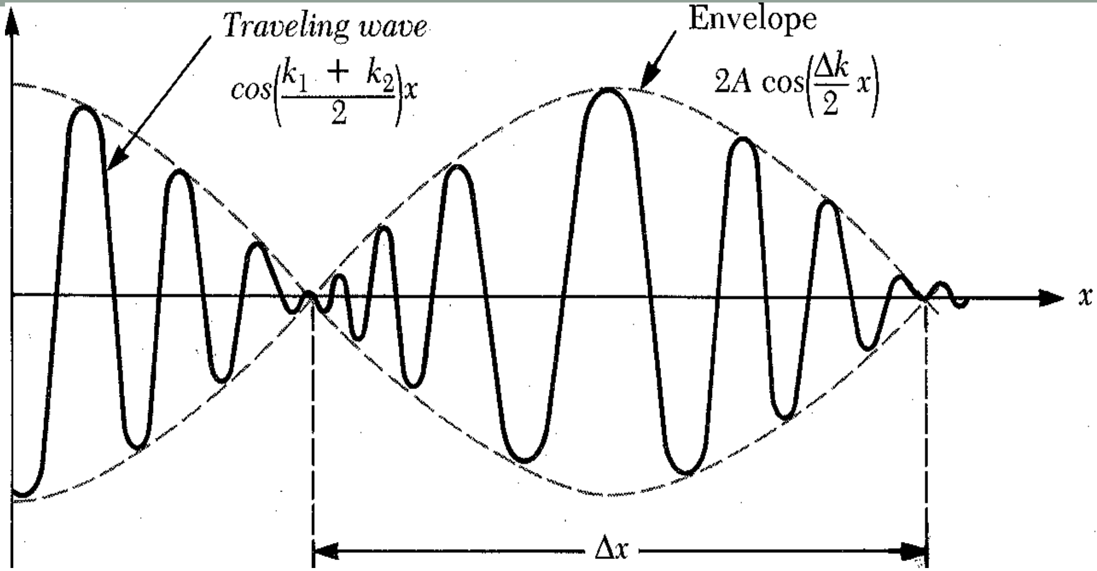
$$\cos a + \cos b = 2\cos\left(\frac{a-b}{2}\right)\cos\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

Sendo $a = k_1 x - \omega_1 t$ e $b = k_2 x - \omega_2 t$, encontramos

$$y = 2A\cos\left[\frac{(k_1 x - \omega_1 t) - (k_2 x - \omega_2 t)}{2}\right]\cos\left[\frac{(k_1 x - \omega_1 t) + (k_2 x - \omega_2 t)}{2}\right]$$

$$= \left[2A\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\right]\cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2}x - \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \qquad [28.12]$$

k_m $\qquad$ w_m



Podemos interpretar a onda soma como sendo um envelope que modula lentamente uma onda com k e w médios

A velocidade de propagação das ondas individuais

$$\Psi(x,t) = \Psi_1 + \Psi_2 = 2A\cos\frac{1}{2}(\Delta kx - \Delta\omega t)\cos(\bar{k}x - \bar{\omega}t)$$

amplitude (envelope)

$$v_f = \frac{(w_1 + w_2)/2}{(k_1 + k_2)/2} = \frac{\overline{w}}{\overline{k}} = v_e$$

$$\frac{1}{2}(\Delta kx - \Delta\omega t) = \frac{1}{2}\Delta k\left(x - \frac{\Delta\omega}{\Delta k}t\right) = \frac{1}{2}\Delta k(x - v_g t)$$

velocidade de grupo

A velocidade de propagação do grupo

$$v_g = \frac{(w_2 - w_1)/2}{(k_2 - k_1)/2} = \frac{\Delta w}{\Delta k} = \frac{d\omega}{dk}$$

- Para o postulado de de Broglie

$$E = hf = \hbar\omega \qquad \mathrm{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \qquad \mathrm{E} = \frac{\mathrm{p}^2}{2\mathrm{m}}$$

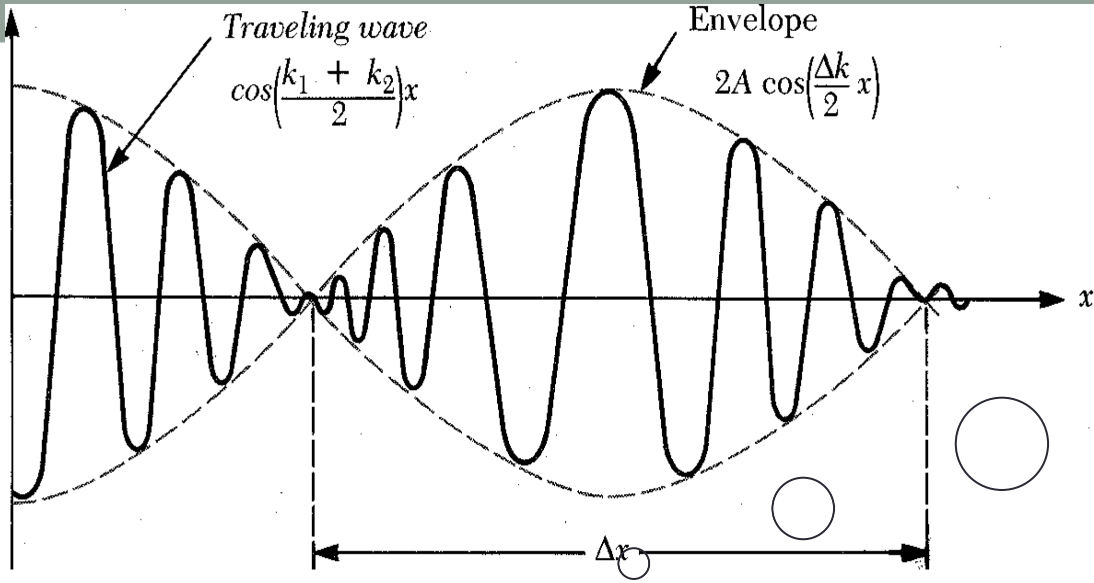
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar}\frac{\hbar}{p} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

- A velocidade de fase não corresponde a velocidade da partícula

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

- O pacote de onda se propaga com velocidade do elétron



A incerteza Δx nesta localização corresponde a distância entre dois nulos consecutivos do envoltório

Para um dado instante a distância entre dois nulos consecutivos será:

$$\frac{1}{2}\left(\Delta k x_2 - \Delta\omega t\right) - \frac{1}{2}\left(\Delta k x_1 - \Delta\omega t\right) = \pi$$

$$\Delta k\left(x_2 - x_1\right) = \Delta k \Delta x = 2\pi$$

Isto mostra que quanto mais tentamos localizar a partícula no espaço Δx, maior será o numero de ondas utilizado para a construção do pacote

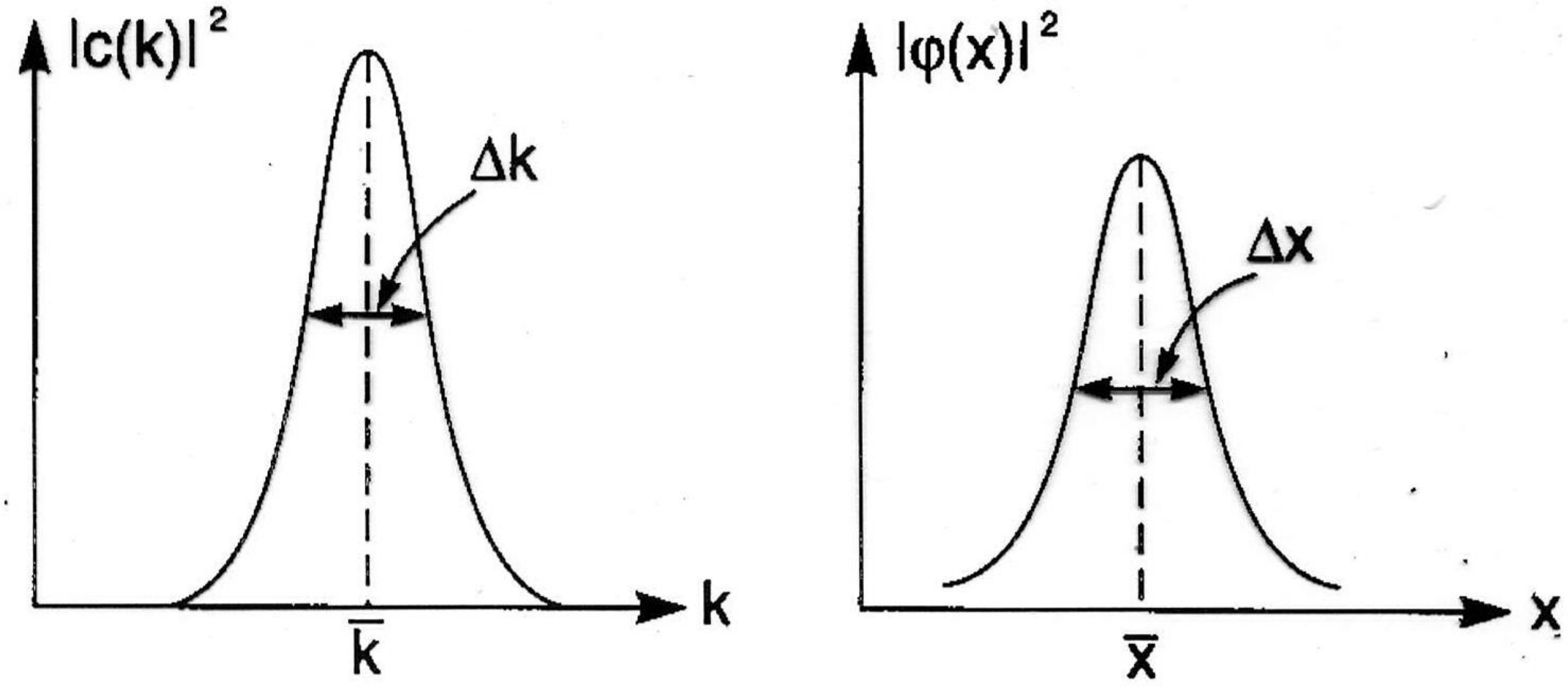
e

$$\Delta w \Delta t = 2\pi$$

A integral de Fourier

Para construir um pacote de ondas realmente localizado como um pulso gaussiano devemos somar um no infinito de ondas

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} dk$$



$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$