Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I
AULA 13

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

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:

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

Exercício:

Determine o comprimento de onda de de Broglie para elétrons de 54eV?

$$E_c = \frac{p^2}{2m_e}$$

$$p^2 = 2m_e E$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{1240 eV.nm}{\sqrt{2mc^2 E}}$$

$$\lambda = \frac{1240 eV.nm}{\sqrt{2x0{,}511x10^6 x54}} = 0{,}167 nm$$

Bola de golfe de massa 0,05kg = 50g e velocidade de 250km/h=~70m/s

⇒ $\lambda = h/mv = 6{,}6 \times 10^{-34}$ J.s/ 0,05 * 70 kg.m/s

⇒ $\lambda = 1{,}9 \times 10^{-34}$ m = $6{,}6 \times 10^{-19}$ fm.

Corpos macroscópicos ⇒ massa ⇒ momento ⇒ λ pequeno

Exercício:

Aprendemos inicialmente que a partícula (gás ideal) em equilíbrio térmico com o ar ao redor tem energia cinética de 3/2kT. Calcule o comprimento de De Broglie para:

a) Nêutron a temperatura ambiente (300K)

b) Nêutron frio a 77K (nitrogênio líquido)

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad p^2 = 2mE$$

$$p^2 = 2mE = 2m\frac{3}{2}kT$$

$$p = \sqrt{3mkT}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{1240 eV.nm}{\sqrt{3mc^2kT}}$$

$$m_nc^2 = 939{,}6 MeV$$

$$\lambda = \frac{1240 eV.nm}{\sqrt{3x939{,}6x10^6x8{,}62x10^{-5}T}}$$

$$\lambda = \frac{2.52}{\sqrt{T}}nm$$

a) T=300K

$$\lambda = 0{,}145 nm$$

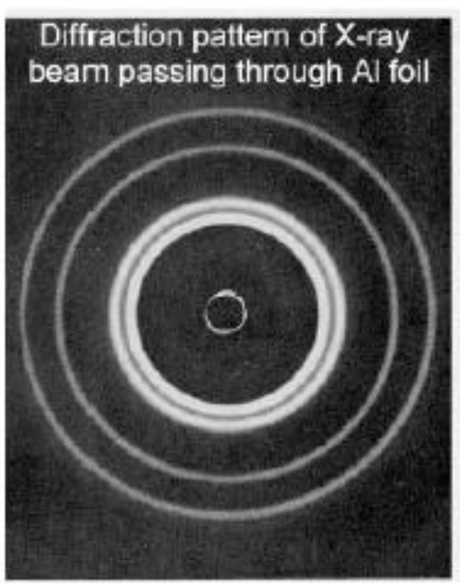
a) T=77K $\lambda = 0{,}287 nm$

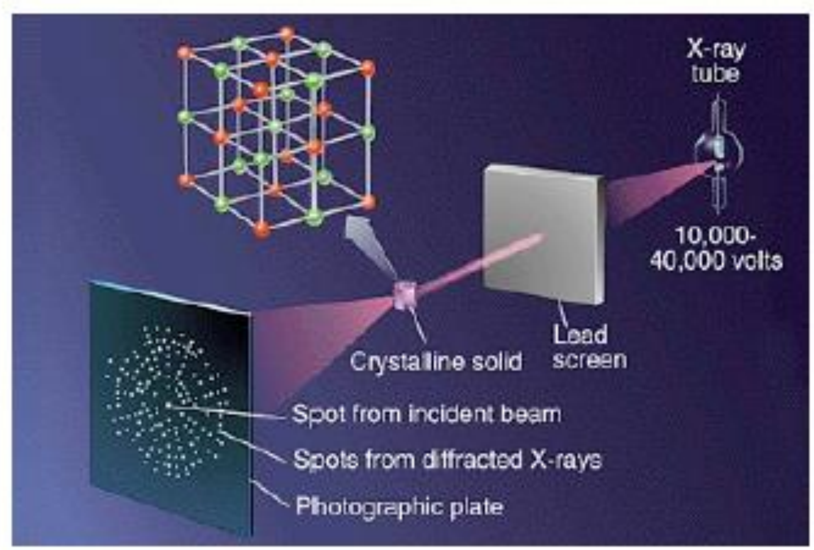
Difração de RX

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

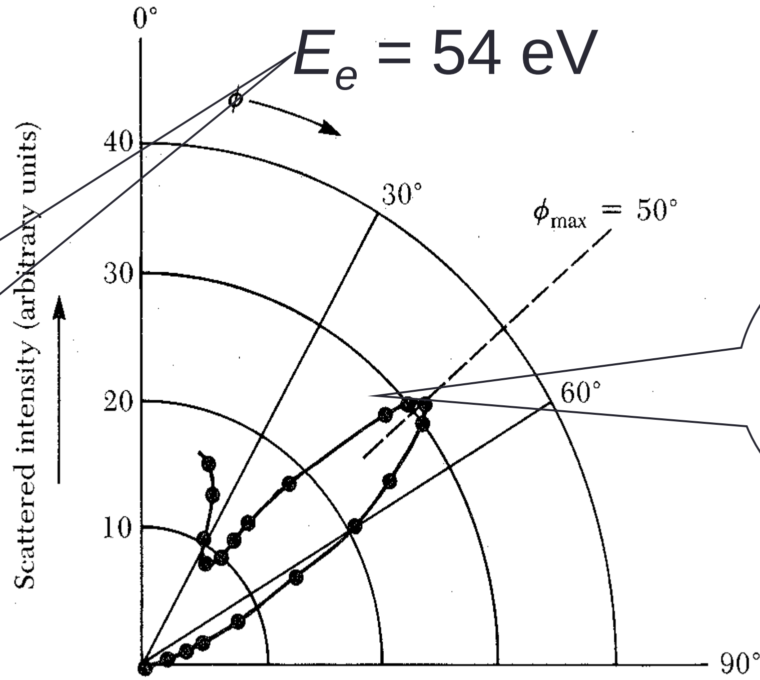
•As ondas difratadas com o mesmo ângulo por átomos situados em planos diferentes estarão em fase (interferência construtiva) se a diferença entre os dois percursos foi igual ao um numero inteiro de comprimento de onda

$$2dsen\theta = n\lambda$$





Difração de elétrons

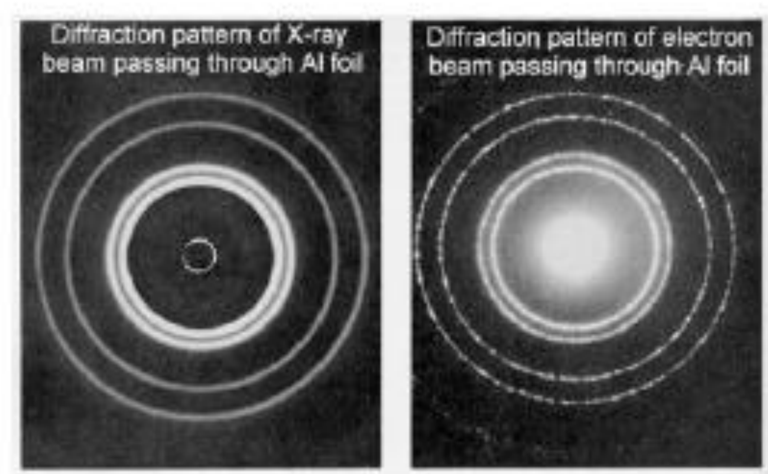


E a energia que tem corrente máxima no detector

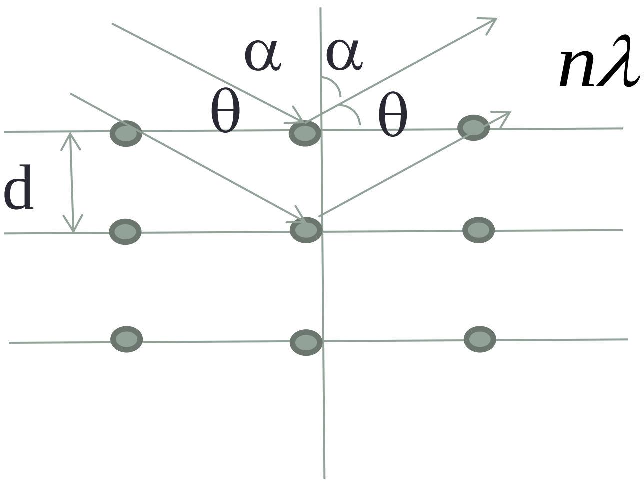
A existência deste pico em 50º mostra qualitativamente o postulado de de Broglie pois só pode ser explicado com uma interferência construtiva de ondas espalhadas

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**



Difração de elétrons

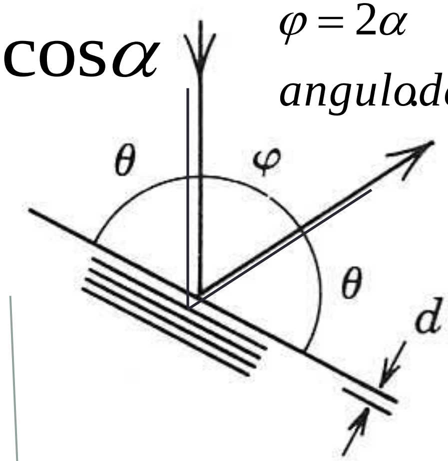


$$n\lambda = 2dsen\theta = 2d\cos\alpha$$

Máximo $\Rightarrow$

$\varphi = 2\alpha$

angulo.de.espalhamento



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

$$\lambda = 0{,}215sen50 = 0{,}165nm$$

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

$$E = E_0 + E_K$$

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

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

Aplicável a qualquer partícula com qualquer energia

Exercício:

Qual a energia cinética que os nêutrons devem ter se forem difratados por cristais?

As difrações ocorrem se o comprimento de onda de De Broglie do nêutron for da mesma ordem de magnitude da distância interatômica.

$\lambda \sim 1A \sim 10^{-10}$m

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6{,}63x10^{-34}\,J.s}{1x10^{-10}\,m} = 6{,}63x10^{-24}\,kgm/s$$

$$E_c = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{(6{,}63x10^{-24})^2}{2x1{,}66x10^{-27}}\left(\frac{kg^2m^2}{s^2kg}\right)$$

A energia cinética

$$E_c = 1{,}32x10^{-20}\,J = 0{,}0825eV$$

Note que são nêutrons não relativísticos, $E_c << m_n c^2 = 939{,}6MeV$

Energia menor que a massa de repouso do nêutron

Justifico o uso de $E_c=p^2/2m$

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

Função de onda $$\Psi(x,t)$$

que é solução da equação de onda

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

v é a velocidade de fase

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

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

Uma solução simples é a chamada onda harmônica

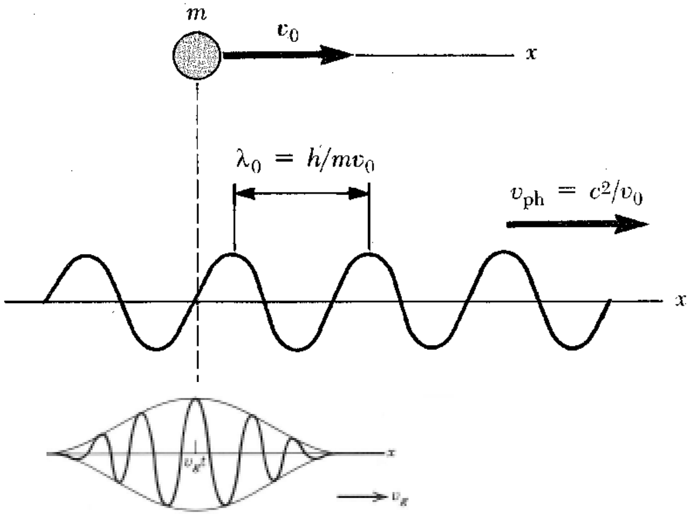
$$\Psi(x,t) = A\cos(kx - wt)$$

Curva que viaja na direção de x positivo

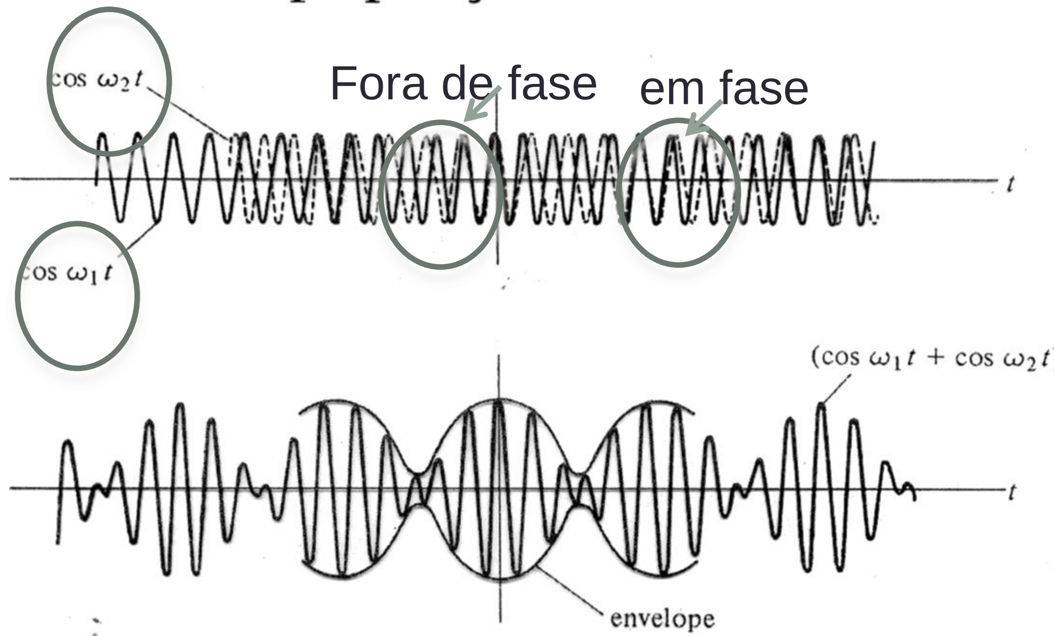
Cujo nº de onda $$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Velocidade de fase $$v = f\lambda$$

Partícula ↔ onda localizada (pacote de onda).
Como produzir um pacote?



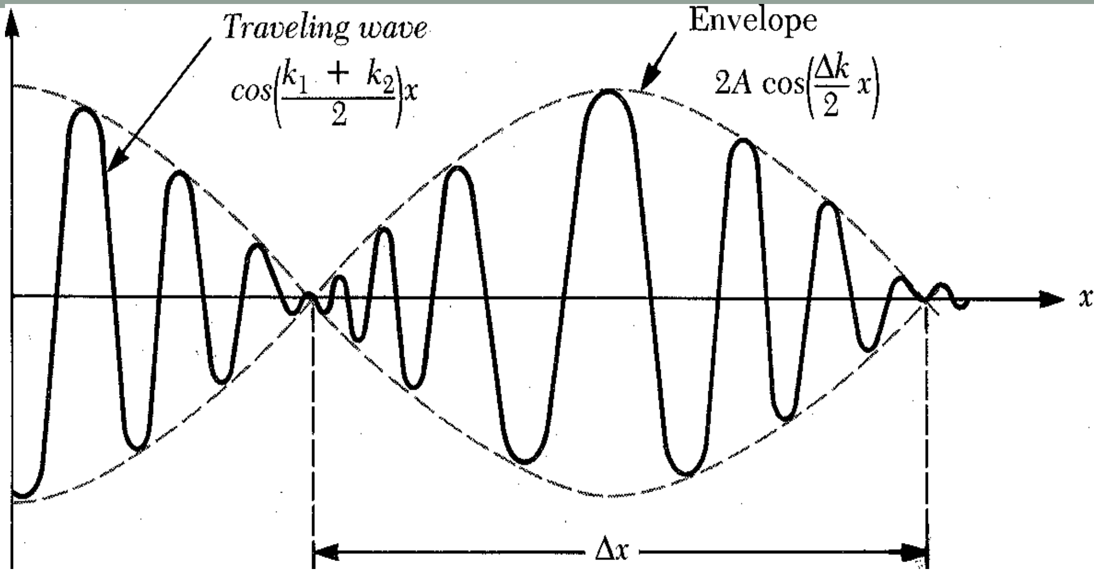
Superposição de 2 ondas



- 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

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



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

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

amplitude (envelope)

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

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

velocidade de grupo

A velocidade de propagação do grupo

Em contraste com o pulso a combinação de ondas não é localizada no espaço

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

- 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

Ondas harmônicas que compõem um pacote de ondas. A velocidade é dada por:

$$v_f = \lambda f \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k} \qquad \omega = 2\pi f$$

Velocidade de fase

$$v_f = \left(\frac{2\pi}{k}\right)\left(\frac{\omega}{2\pi}\right)$$

$$v_f = \left(\frac{\omega}{k}\right)$$

$$v_f .k = \omega$$

A velocidade de grupo esta relacionada a velocidade de fase por:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(kv_f) = v_f + k\frac{dv_f}{dk}$$

- A velocidade v_g pode ser > ou < que v_f

Meios não dispersivos

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(kv_f) = v_f + k\frac{dv_f}{dk}$$

Se a velocidade de fase é a mesma para todas as frequências e para todas os comprimentos de onda $\frac{dv_f}{dk} = 0$ $\therefore v_g = v_f$

O meio pelo qual a v_f é a mesma para todas as frequências é dito ⟹ NÃO DISPERSIVO

Exemplos de meios não dispersivos:

- Corda perfeitamente flexível para ondas mecânicas
- Ar para as ondas sonoras
- Vácuo para ondas eletromagnéticas

Característica importante:

como todas as ondas harmônicas que formam um pacote de ondas que se movem com a mesma velocidade, o pacote se propaga sem mudar de forma

Meios dispersivos

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(kv_f) = v_f + k\frac{dv_f}{dk}$$

Por outro lado quando a velocidade de fase é diferente para as diferentes frequências, temos que $\frac{dv_f}{dk} \neq 0 \qquad \therefore v_f \neq v_g$

Neste caso o meio é dito $\Longrightarrow$ DISPERSIVO

Exemplos de meios dispersivos:

- Água para as ondas do mar
    - Corda que não é perfeitamente flexível para ondas mecânicas
- Meio transparente como o vidro (índice de refração varia com λ)
- ou água para as ondas luminosas
- Qualquer meio para as ondas da matéria

Exercício:

Certas ondas de oceano viajam com velocidade de fase

$$v_f = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}}$$

onde g é a aceleração da gravidade. Determine a velocidade do grupo do "pacote de onda" destas ondas (expresse em termos da velocidade de fase).

Lembrando que a velocidade de grupo: $v_g = \dfrac{d\omega}{dk}$

Sabemos que: $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ e $\omega = 2\pi f$ e $v_f = \lambda f = \left(\dfrac{2\pi}{k}\right).\left(\dfrac{\omega}{2\pi}\right) = \left(\dfrac{\omega}{k}\right)$

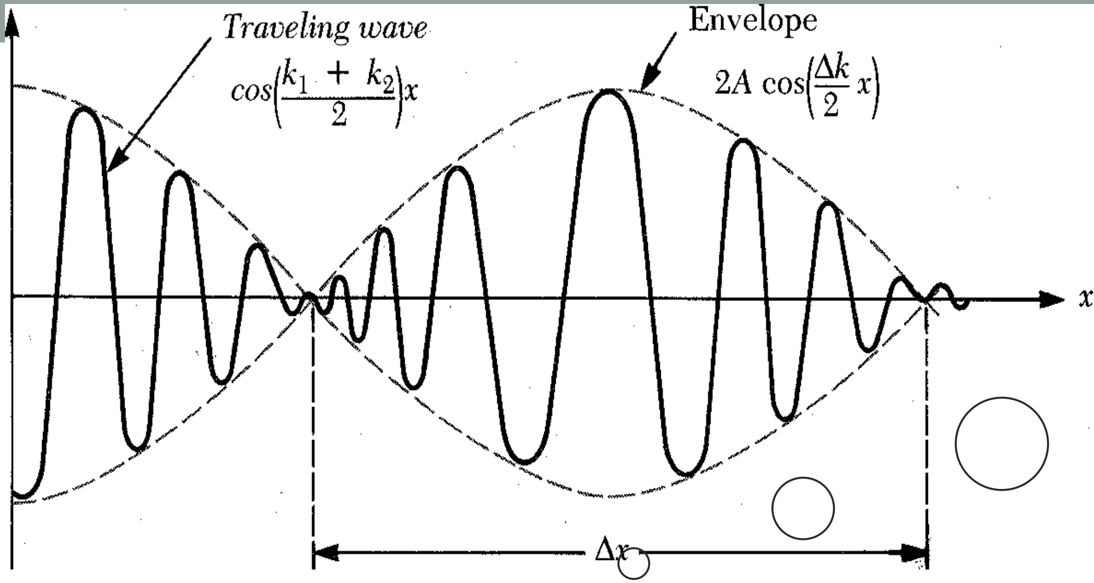
então:

$$v_f = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}} = \left(\frac{g}{2\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{2\pi}{k}\right)^{1/2}$$

$$v_f = \sqrt{\frac{g}{k}} = \frac{\omega}{k} \qquad \omega = \sqrt{gk}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(\sqrt{gk})$$

$$v_g = \frac{1}{2}k^{-1/2}\sqrt{g} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g}{k}} \qquad v_g = \frac{1}{2}v_f$$



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

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

Werner Heisenberg, 1927:

Propõe o princípio de incerteza que diz que é impossível determinar (fazer medidas) simultaneamente da posição e momento de uma partícula) (x e p_x, por exemplo) apresentam uma relação entre suas incertezas dada por

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

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

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

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

Quanto mais bem definida a posição de uma partícula (pacote de onda mais estreito), menos definido será o momento dessa partícula (uma combinação maior de comprimentos de onda, e portanto de momentos será necessário)

O princípio de incerteza também pode ser enunciado em termos da energia e do tempo:

Das propriedades do pacote de onda, tem-se que:

$$\Delta \omega . \Delta t \geq \frac{1}{2}$$

$$E = hf = h\frac{\omega}{2\pi} = \hbar \omega$$

$$\Delta E . \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Exercício:

Um elétron se move na direção x com velocidade de $3{,}6x10^6$m/s. Podemos medir sua velocidade com precisão de 1%

a) Com que precisão podemos medir simultaneamente sua posição

b)o que podemos dizer sobre o movimento na direção y

$$p_x = mv_x = 9{,}1x10^{-31} x3{,}6x10^6$$

$$\Delta p_x = m\Delta v_x = 1\% p_x$$

$$p_x = 3{,}3x10^{-24}(kg.\frac{m}{s})$$

$$\Delta p_x = 3{,}3x10^{-26}(kg.\frac{m}{s})$$

Do princípio de incerteza

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

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \geq \frac{1{,}05x10^{-34} J.s}{2x3{,}3x10^{-26} kg / ms}$$

$$\Delta x \geq 0{,}16x10^{-8} m = 1{,}6nm = 16x10^{-10} m$$

O que é aproximadamente 16 distâncias atômicas (distância atômica λ ~1A ~10^{-10}m)

sobre o movimento na direção y:
Se o elétron se move na direção x temos que

$$\Delta p_y = 0$$

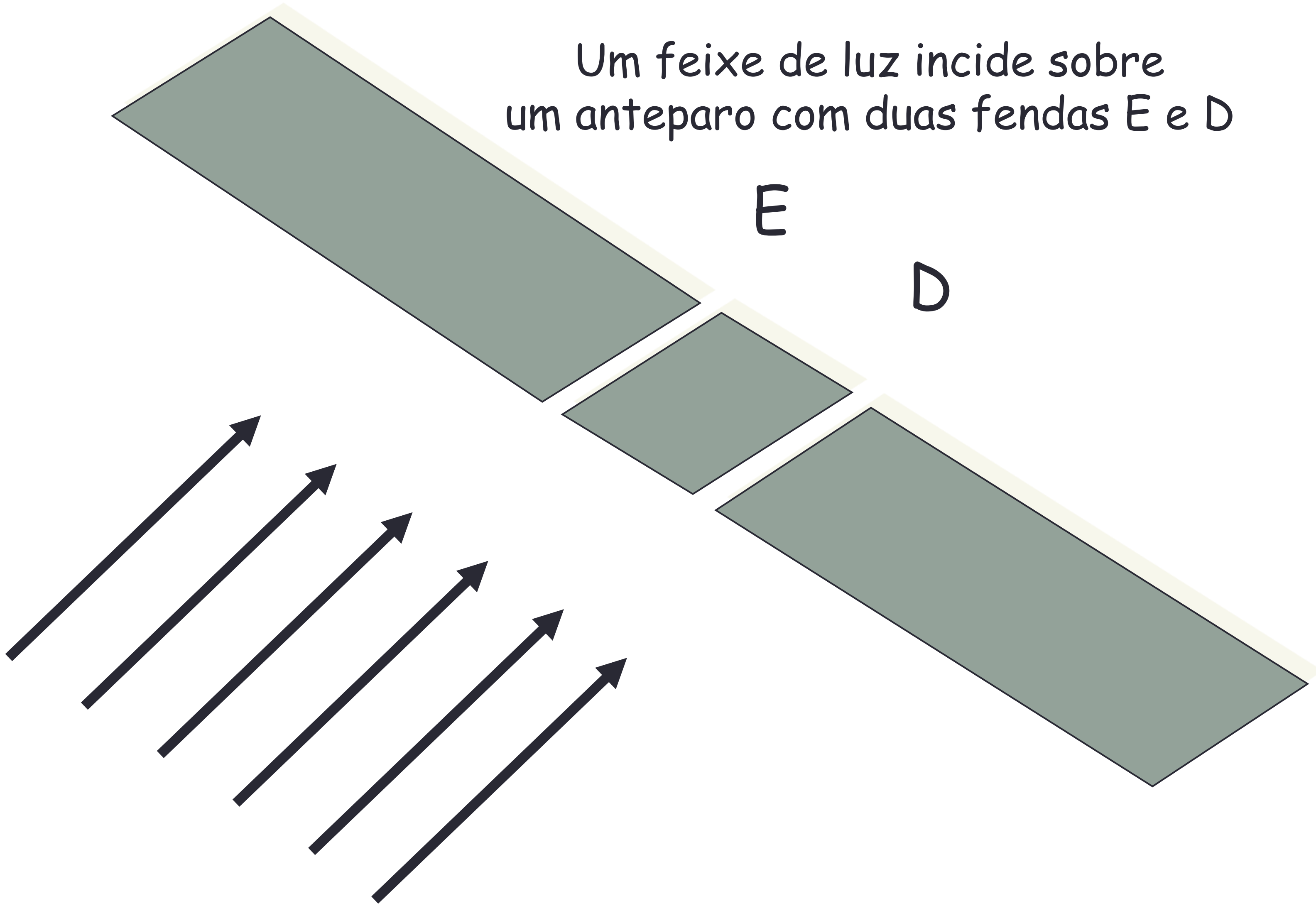
$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar / 2$$

Não sabemos nada sobre y

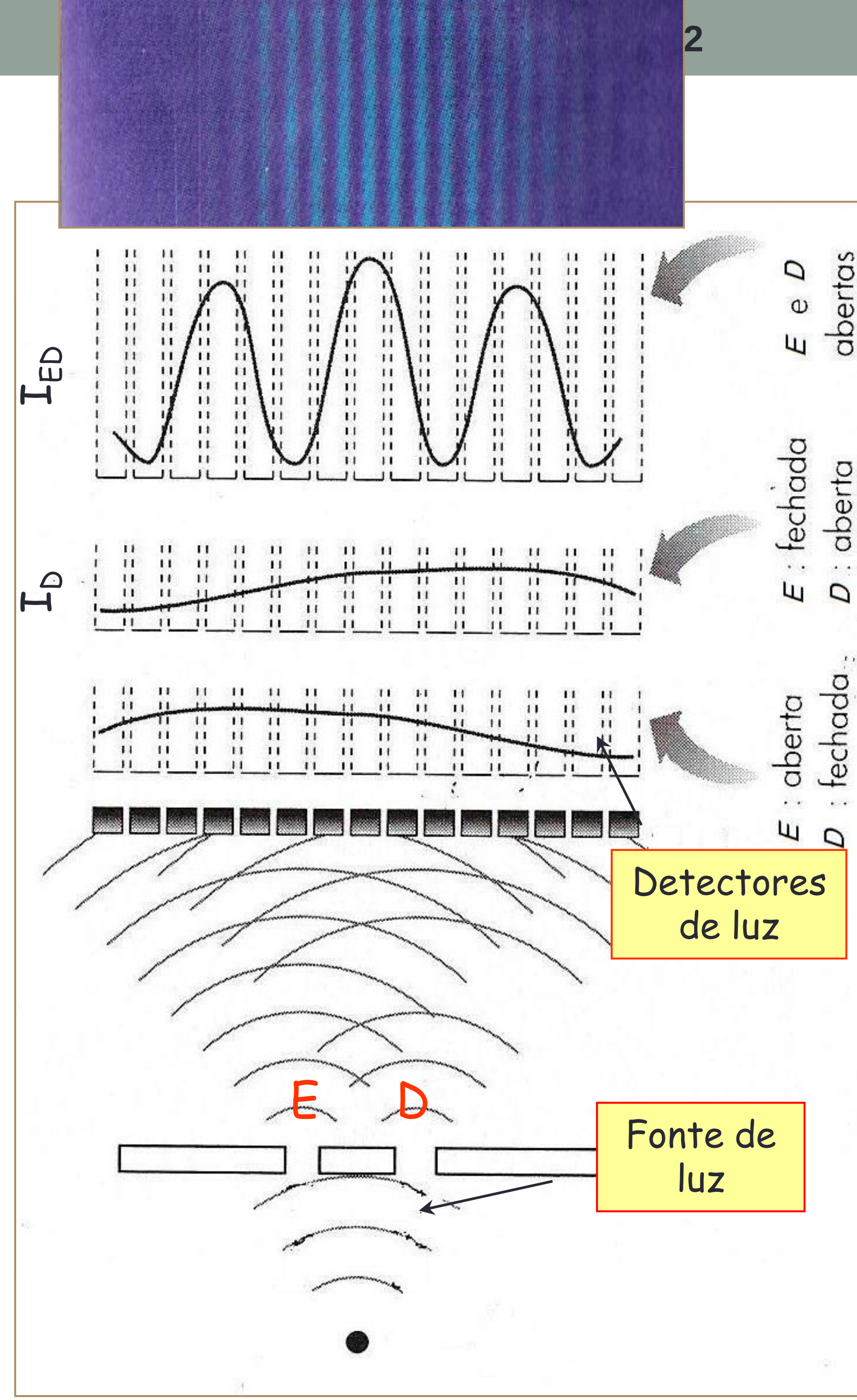
$$\Delta y = \infty$$

Feixe de luz incidindo sobre fendas

Um feixe de luz incide sobre
um anteparo com duas fendas E e D



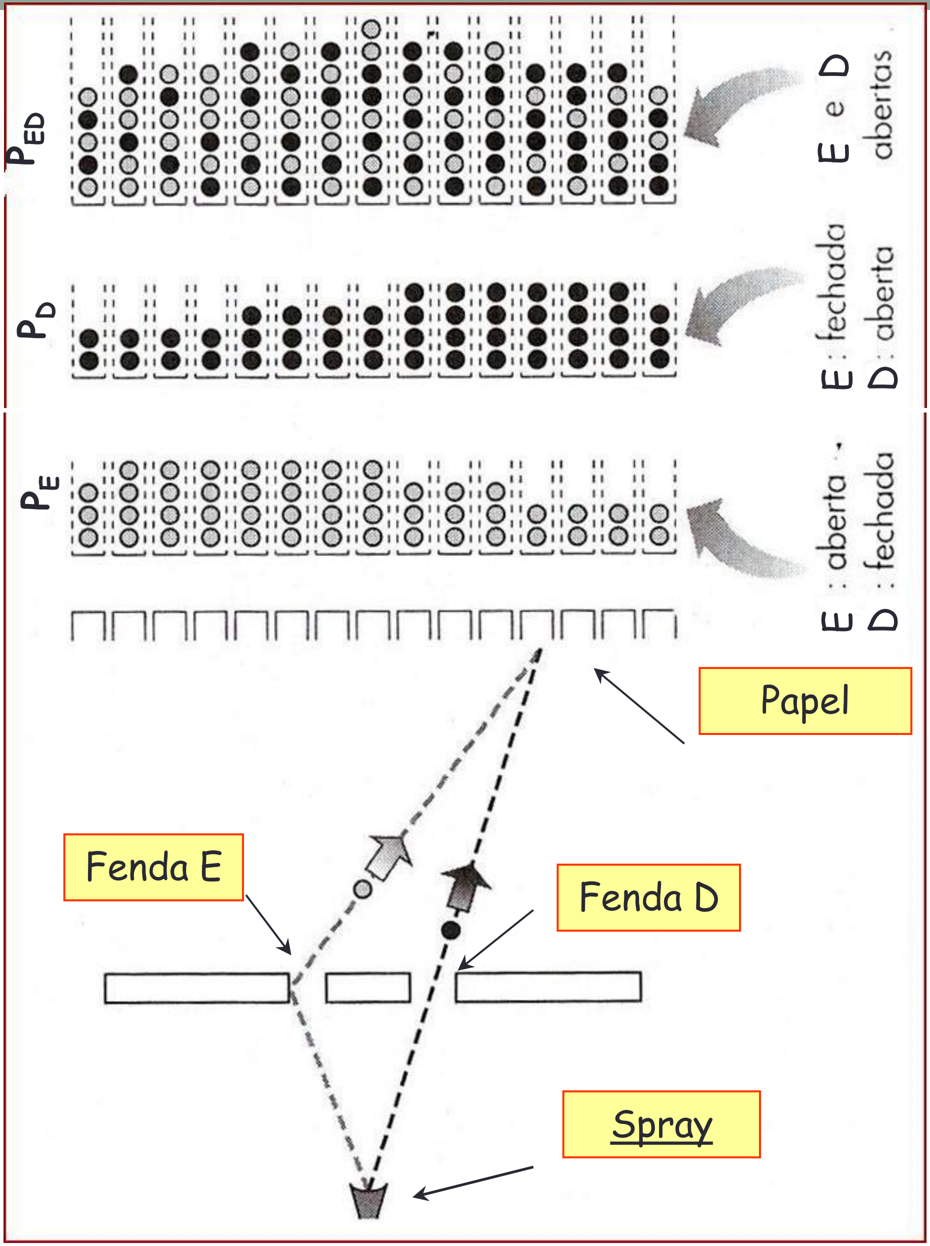
Interferência



- A luz ao atravessar duas fendas em um anteparo apresenta um padrão de interferência como o das ondas na superfície da água.
- A luz apresenta também aquelas outras propriedades (superposição, reflexão, refração, ...) ⇒ fenômeno ondulatório.
- Mas...

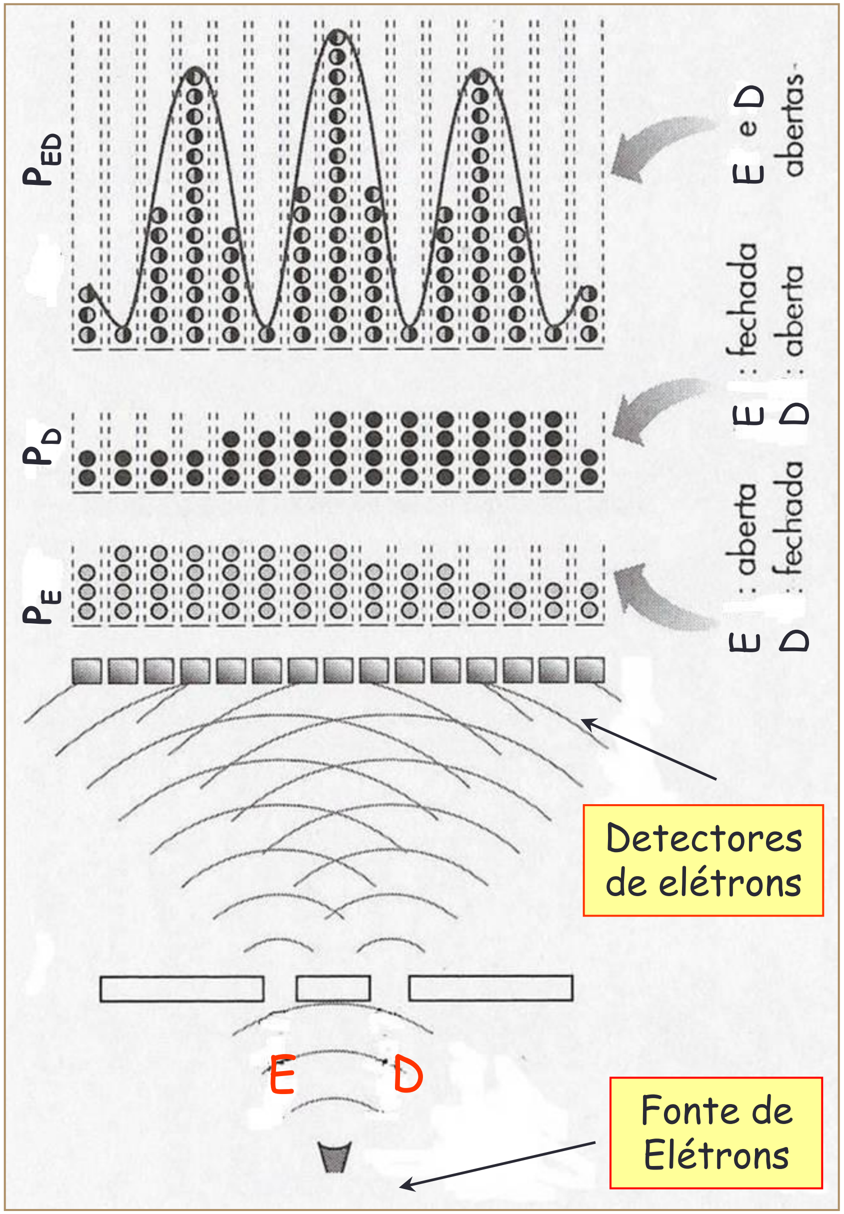
Partículas (grandes ESFERAS)

- Um spray é usado para jogar tinta sobre um anteparo coberto por papel.



Elétrons

- Feixe de elétrons incidindo sobre um anteparo com duas fendas: **Interferência!**
  - Mas não deveria haver um comportamento como o das esferas?
- Elétrons: partículas ou ondas?

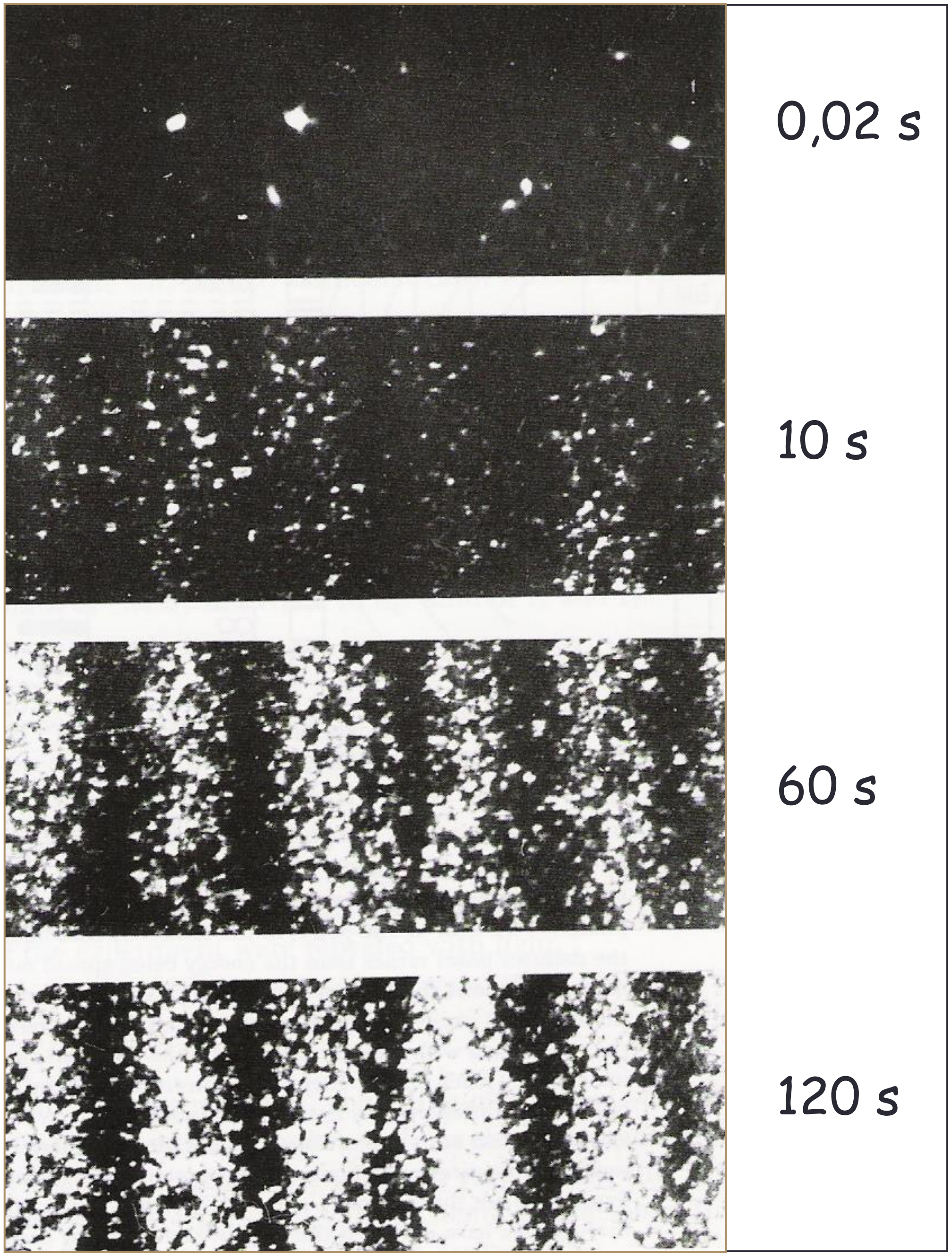


Elétrons

Feixe de elétrons incidindo sobre um anteparo com duas fendas:

Interferência!

- Mas não deveria haver um comportamento como o das esferas?
- Elétrons: partículas ou ondas?



Elétrons e ondas

Hipóteses:

- Os elétrons dividem-se em dois e essas metades passam pelas fendas.

Falso! Não existe esse elétron dividido

- Os elétrons do feixe ao atingirem as fendas, interagem e produzem esse padrão coletivo de interferência.

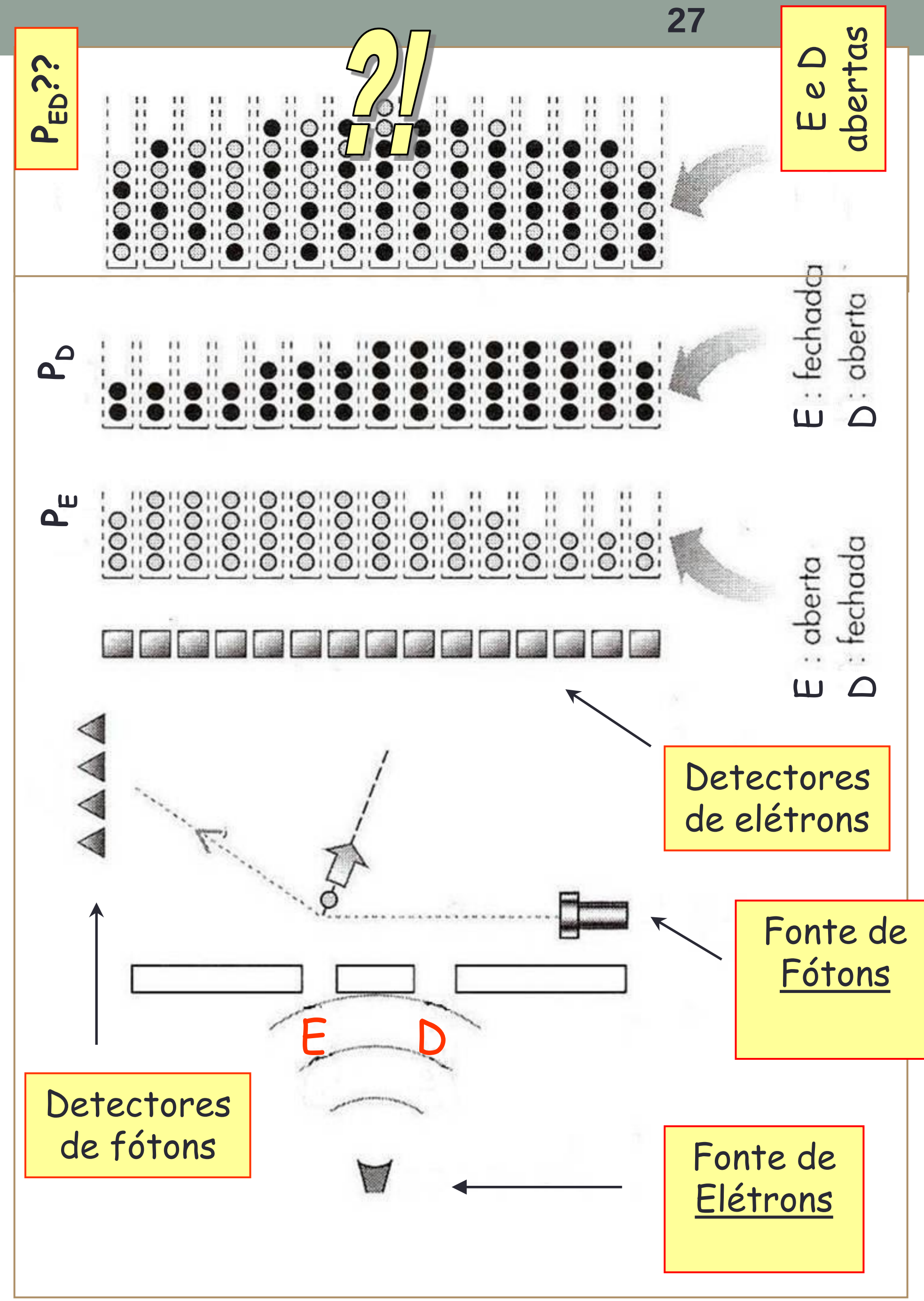
Falso! Basta fazer passar só 1 por vez

O que precisamos é saber por onde o elétron passou.

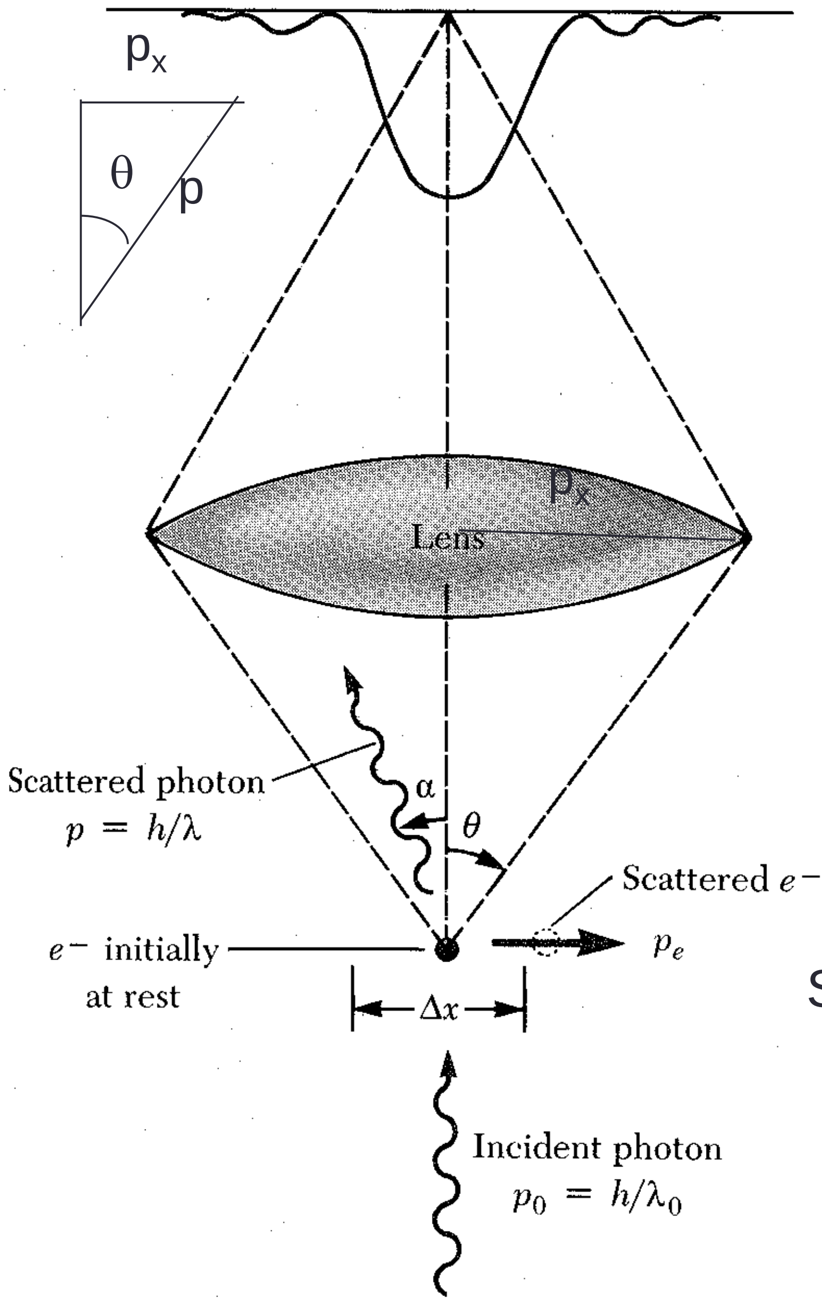
Observando elétrons

- Fácil: é só marcar por qual fenda o elétron passou.
- Isto pode ser feito usando uma fonte de fótons após o anteparo.

- MAS ....



Tentar observar (hipoteticamente) um 1 e^- num microscópio iluminando-o com 1 fóton



$$\text{Fóton}: -p\,\mathrm{sen}\theta \le p_x \le p\,\mathrm{sen}\theta \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta p_x = 2p\,\mathrm{sen}\theta = \frac{2h}{\lambda}\mathrm{sen}\theta = \Delta p_e$$

Microscópio: limite na definição da imagem devido à difração ⇒ poder de resolução (Δx)

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\,\mathrm{sen}\theta}$$

Portanto:

$$\Delta p_x \Delta x \approx \left(\frac{2h}{\lambda}\mathrm{sen}\theta\right)\left(\frac{\lambda}{2\,\mathrm{sen}\theta}\right) = h > \frac{\hbar}{2}$$

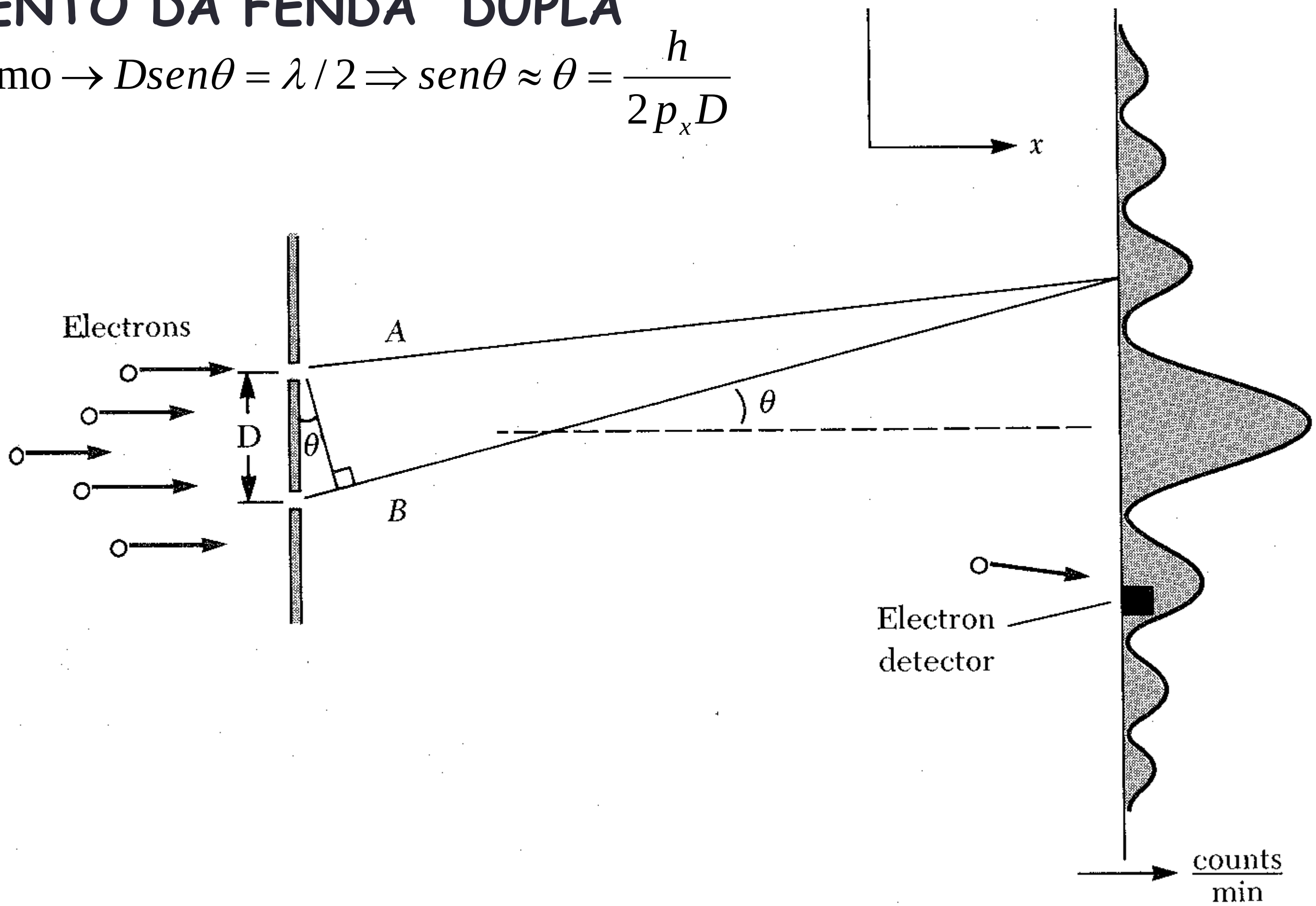
Se Δx diminui ⇒ Δp_x aumenta. Por ex.:

$\lambda\downarrow \Rightarrow \Delta x\downarrow \Rightarrow \Delta p_x\uparrow$

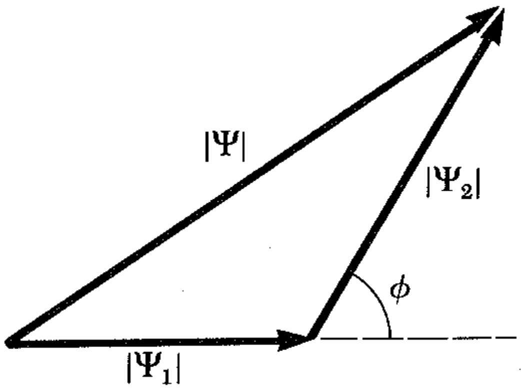
Esta análise mostra que o princípio de incerteza é uma imposição da natureza

EXPERIMENTO DA FENDA DUPLA

$$\text{Mínimo} \rightarrow D sen\theta = \lambda / 2 \Rightarrow sen\theta \approx \theta = \frac{h}{2 p_x D}$$

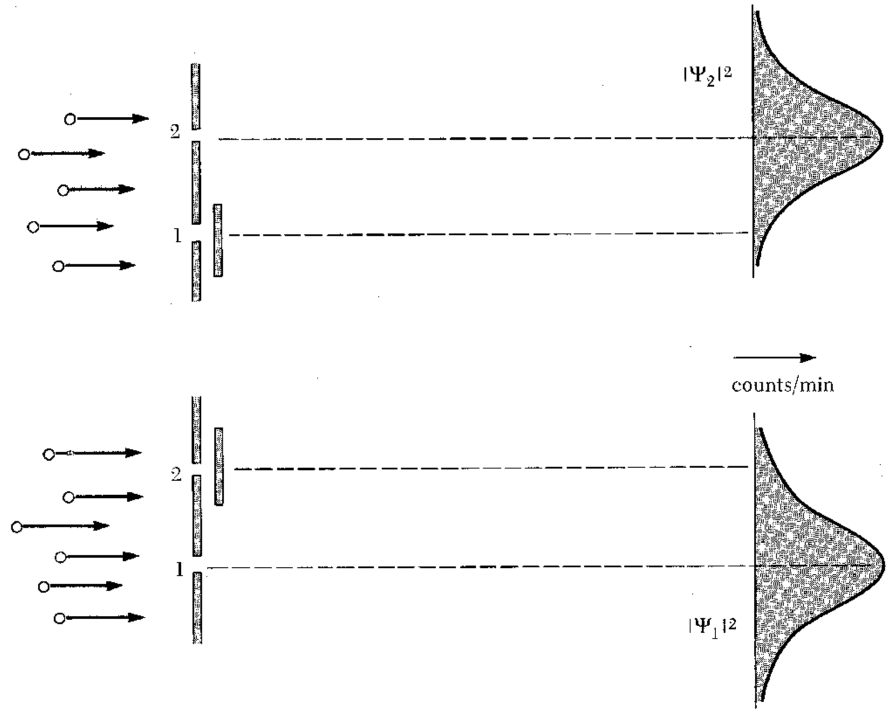


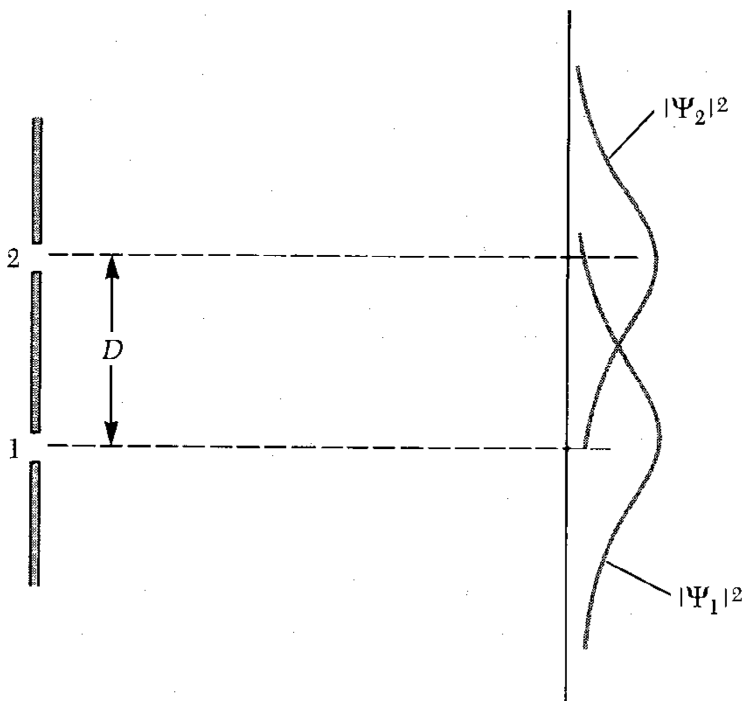
Característica fundamental: fase.
Ondas iguais, caminhos diferentes ⇒ fases diferentes ⇒ interferência

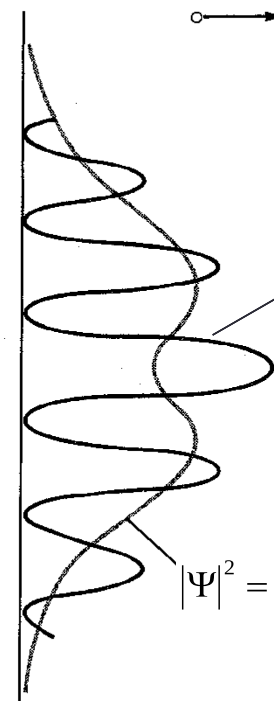


$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$|\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1||\Psi_2|\cos\phi$$







$|\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$

$|\Psi|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$

Caso	**Função de onda**	**Contagens/min. na tela**
Elétron é medido passando pela fenda 1 ou 2	Ψ_1 ou Ψ_2	$\|\Psi_1\|^2 + \|\Psi_2\|^2$
Sem determinar a passagem do elétron	$\Psi_1 + \Psi_2$	$\|\Psi_1\|^2 + \|\Psi_2\|^2 + 2\|\Psi_1\|\|\Psi_2\|\cos\phi$

Probabilidade

Em 1925-1926 Max Born propôs como relacionar a Ψ (função de onda) com o comportamento das partículas que ela descreve:

A probabilidade que a partícula seja encontrada no instante t em uma coordenada entre x e x+dx é :

$$P(x)dx = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

$$P(x)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

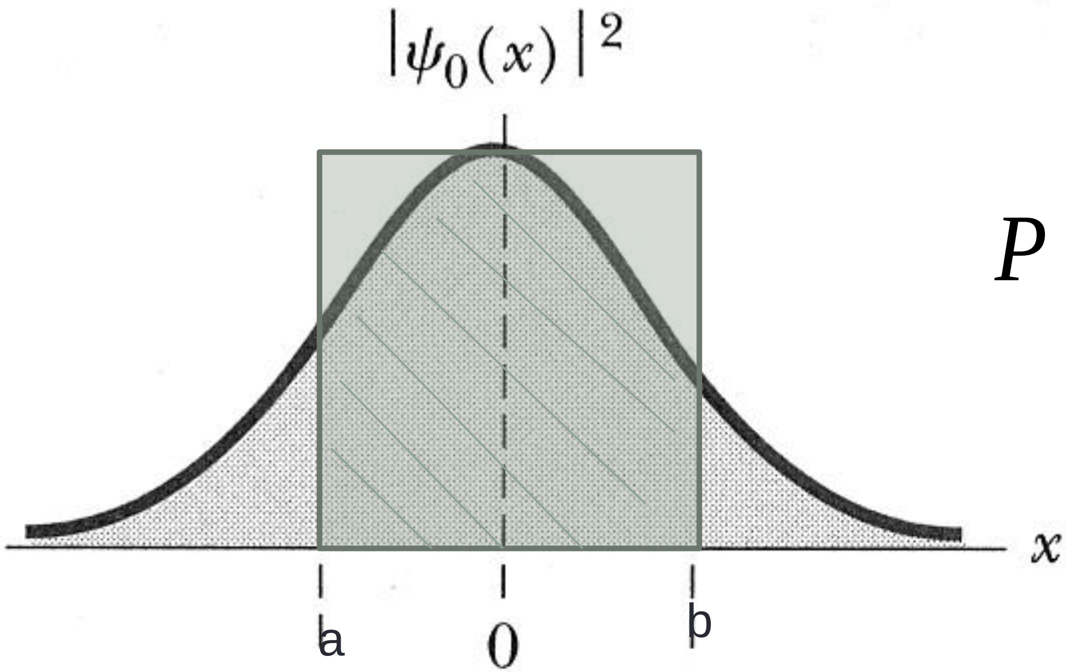
Ψ não é uma quantidade mensurável, mas o seu módulo ao quadrado é mensurável e é justamente a probabilidade por unidade de comprimento ou densidade de probabilidade P(x) para encontrar a partícula no ponto x no tempo t.

Já que a partícula deve ser encontrada em algum lugar ao longo do eixo x, a soma das probabilidade sobre todos os valores de x deve ser 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = 1$$

Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

A probabilidade de uma partícula estar no intervalo a=<x<=b esta relacionado área embaixo da curva de a até b de uma função densidade de probabilidade $\left|\Psi(x,t)\right|^2$



$$P = \int_a^b \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx =$$

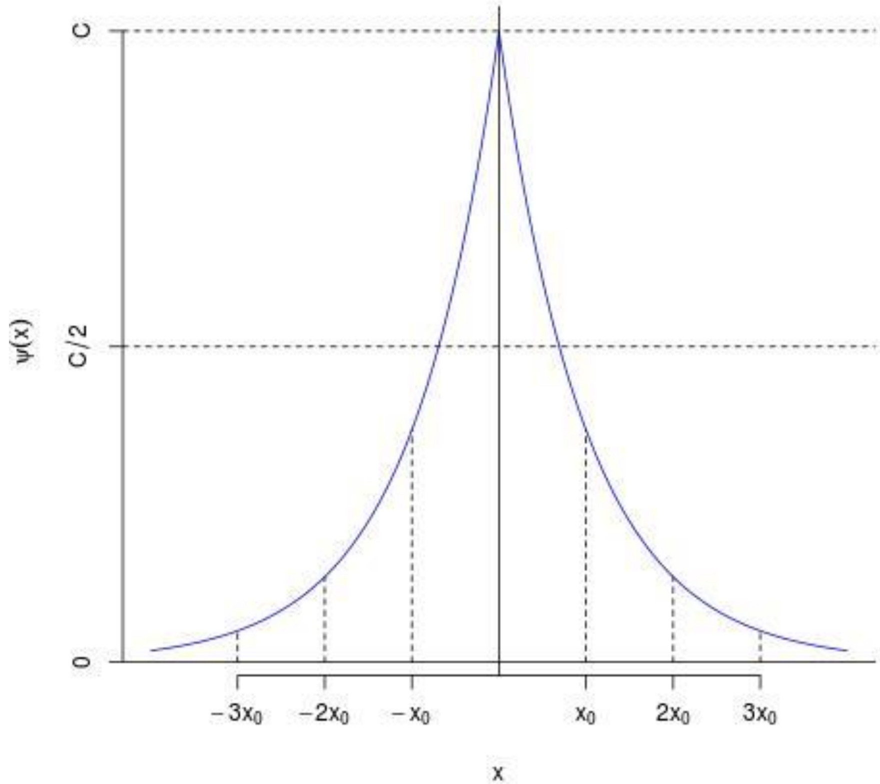
o área embaixo da curva entre a e b

Exercício:

2) A função de onda inicial de uma partícula é dada por:

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$ onde C e x_0 são constantes

a) Desenhe esta função



Exercício:

2) A função de onda inicial de uma partícula é dada por:

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$ onde C e x_0 são constantes.

b) Encontre C em termos de x_0 temos que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C^2 e^{-2|x|/x_0} dx = 1$$

$$2C^2 \int_{0}^{+\infty} e^{-2|x|/x_0} dx = 2C^2 \left.\frac{e^{-2|x|/x_0}}{-2/x_0}\right|_0^{\infty}$$

$$-C^2 x_0 (0-1) = C^2 x_0 = 1$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{x_0}}$$

Exercício:

2) A função de onda inicial de uma partícula é dada por:

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$

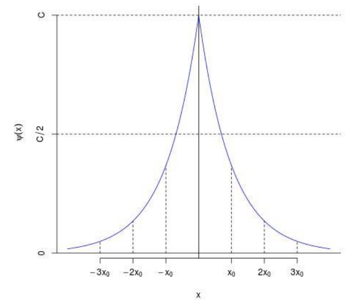
onde C e x_0 são constantes.

c)Calcule a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $-x_0 =< x <= x_0$.

$$P = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{x_0}}$$

$$P = \int_{-x_0}^{+x_0} C^2 e^{-2|x|/x_0} dx =$$



$$2C^2 \int_0^{+x_0} e^{-2|x|/x_0} dx = 2C^2 \left. \frac{e^{-2|x|/x_0}}{-2/x_0} \right|_0^{x_0}$$

$$-C^2 x_0 (e^{-2} - 1) = \frac{1}{x_0} x_0 (1 - e^{-2})$$

$$\boxed{P = (1 - e^{-2}) = 0.8647 = 86{,}5\%}$$

OBSERVÁVEIS:

Ψ não é uma quantidade mensurável

MAS como podemos relacionar a função de onda com grandezas observáveis????

COMO podemos obter a posição, o momento ou a energia de uma partícula a partir da função de onda (de maneira exata no mundo quântico)?????

VALORES ESPERADOS:

USANDO a interpretação probabilística de Bohr, podemos obter apenas os valores médios ou valores esperados das grandezas

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$