

Instituto de Física
USP

Física V - Aula 28

Professora: Mazé Bechara

Aula 28 – Ondas de partículas materiais - observações e postulados de uma teoria.

- 1. Postulados sobre a existência da onda da partícula e seu significado.**
- 2. Experimentos que revelam a onda de partículas - sequencia histórica (com entendimento dos experimentos).**
- 3. O Princípio de Complementaridade de Bohr.**
- 4. Outros postulados da interpretação probabilística da função de onda na Mecânica Quântica , devida à Max Born.**

Tópico IV – a Mecânica Quântica (ondulatória) de Schroedinger

- Conteúdo resumido (veja o conteúdo detalhado no Guia)
- **“Anyone at present in this room has a finite chance of leaving it without opening the door - or, of course, without being thrown out the window” - George Gamow**
- IV.1. Bases da mecânica quântica em forma de postulados.
- IV.2 A equação de Schroedinger dependente do tempo ou a equação para a função de onda da partícula no espaço real - tempo: a equação geral da mecânica quântica e a equação dos estados estacionários para os potenciais conservativos.
- IV.3 Soluções das autofunções de energia de estados ligados da partícula sujeita a potenciais unidimensionais.
- IV.4 A possibilidade de transições nos estados mistos – estados não estacionários O valor médio e o valor medido da energia dos estados mistos.
- IV.5 Solução da equação de auto-estado para uma partícula livre e estados não ligados em movimentos unidimensionais. Os coeficientes de incidência, reflexão e transmissão.
- IV.6 Uma partícula em movimento em uma **caixa tridimensional de potencial infinito – a degenerescência em energia.**
- IV.7 A equação de Schroedinger para potenciais centrais (tridimensionais). O átomo de H.

Questões a serem respondida pós de Broglie

- O que significa a função de onda da partícula material?
- Há mesmo uma onda de partícula? Ela é observada?!
- Qual é a equação de onda da partícula material?

Mecânica Ondulatória para a partícula: A Interpretação Estatística de Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 01: o estado dinâmico de uma partícula pode ser descrito por uma **função de onda espaço-temporal** $\Psi(\vec{r}, t)$ que permite extrair (todas) **informações** sobre a dinâmica da partícula.

Postulado 02: O que tem significado físico direto não são as funções de onda espaço-temporais $\Psi(\vec{r}, t)$, que podem até ser funções imaginárias. **O significado físico está na grandeza** $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$.

O módulo ao quadrado da função de onda se relaciona com a **densidade de probabilidade**, ou seja, no caso de movimentos vale a relação:

$$\rho(x, y, z, t) = \frac{dP(\vec{r}, t)}{dV} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$$

$dP(\vec{r}, t)$ é a probabilidade de **uma única** partícula estar na posição \vec{r} , dentro do volume $dV = dx dy dz$ (em coordenadas cartesianas), no instante t , por unidade de dV .

Mecânica Ondulatória para a partícula: A Interpretação Estatística e Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Analogamente, para os movimentos **bidimensional e unidimensional** a relação do módulo ao quadrado da função de onda é com a densidade superficial e a densidade linear de probabilidade, **respectivamente**:

$$\sigma(x, y, t) = \frac{dP(\vec{r}, t)}{dA} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$$

$$\lambda(x, t) = \frac{dP(x, t)}{dx} = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$$

Postulado 3. Há uma outra função de onda que também define **o estado dinâmico** da partícula e a função de onda momento linear-temporal $\Phi(\vec{p}, t)$ que **analogamente tem seu quadrado do módulo definido**

por:

$$\rho(p_x, p_y, p_z, t) = \frac{dP(\vec{p}, t)}{d\vec{p}} = |\Phi(\vec{p}, t)|^2 = \Phi^*(\vec{p}, t)\Phi(\vec{p}, t)$$

probabilidade da partícula ter momento linear \vec{p} , dentro do volume $d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$, por unidade de $d\vec{p}$

Observando ondas das partículas breve histórico

- 1924 – proposta teórica de de Broglie. (Postulou onda estacionária para estados ligados, e neste caso sua quantização corresponde à de Wilson-Sommerfeld para dinâmica periódica. Mas de Broglie abre espaço para onda de estados não ligados: espalhamentos, transmissões...)
- **1925 – Davidson e Germer** trabalhando no Laboratório da Bell (companhia telefônica americana) observam um “**estranho**” comportamento na “**reflexão**” dos elétrons de 54eV que incidiam em amostras de Níquel após um acidente com o vácuo (onde estavam elétrons e a amostra de níquel). **Estranho porque mudou em relação à observação antes do acidente, e porque a intensidade dos elétrons espalhados parecia o que se observava com raios-X incidindo em cristais.**

Observando ondas das partículas – breve histórico (continuação)

- Em 1925 Schroedinger faz a mecânica ondulatória da partícula (o mais usado formalismo da mecânica quântica). **E as ondas estacionárias da solução desta equação descrevem os estados do átomo de H e as transições observadas. (Tópico IV).**
- Em 1926 Davidson em Londres toma conhecimento da proposta de de Broglie e é convencido por Bohr, Richardson e Franck que ele teria observado a difração do elétrons de comprimento de onda de 1,67 angstroms por cristais de Níquel formados na amostra no acidente com vácuo. **Aí se tratava de feixe de partículas livres difratadas pelas partículas do cristal!**
- Em 1926 G. P. Thomson (filho do J.J.) observa a **difração de elétrons entre 10 e 40KeV (relativísticos) por transmissão de elétrons através de finas folhas de sólidos (cristais policristalinos com orientação aleatória). Aqui também seriam partículas livres sendo difratadas pçor pçartículas ligadas no sólido!**

Observando ondas das partículas – breve histórico (continuação)

- **Em 1927 Davidson** estuda sistematicamente a difração de elétrons com energia cinética entre 40eV e 400eV (não relativísticos). Confirma os resultados de comprimento de onda de de Broglie.
- **Em 1927, Dirac** escreve uma equação de onda para uma partícula em movimento relativístico, e o spin está na equação de onda. A solução para o átomo de H nesta equação relativística (ou em Schroedinger + spin) usando interação coulombiana como interação, principal entre elétron e núcleo, tem todas as transições observadas, incluída a estrutura fina nas transições.
- Neste mesmo ano de 1927 há uma reunião em Solvay com enormes debates sobre o significado das interpretações da quântica, principalmente entre Bohr e Einstein.

Observando ondas das partículas – breve histórico (continuação)

- 1930 Stern e Estermann **observam difração de He e moléculas de H (partículas neutras) em cristal de flúoreto de Lítio.**
- **1932** o neutron é descoberto por Chadwick e é observada a difração de neutrons por cristais e comparados com resultados de raios-X (figura e experimento discutidos em aula.) *Obs: neutrons são neutros e criados em reatores com velocidades “térmicas”. Só são estáveis nos núcleos. Fora dos núcleos têm meia vida de $885,7(8)s=14,8min$.*
- 1937 **Davidson e G. P. Thomson ganham o prêmio Nobel de Física** pela observação do **caráter ondulatório das partículas materiais.**
- **A partir daí da eletrônica à computação, tudo muito “palpável”, com base em efeitos quânticos ocorreu. Boa idéia com resultados experimentais comprovados vira ciência aceita!**

Observando ondas das partículas – breve histórico (continuação)

- 1930 Stern e Estermann **observam difração de He e moléculas de H (partículas neutras) em cristal de flutoreto de Lítio.**
- 1932 o neutron é descoberto por Chadwick e é observada a difração de neutrons por cristais e comparados com resultados de raios-X (figura e experimento discutidos em aula.) *Obs: neutrons são neutros e criados em reatores com velocidades “térmicas”. Só são estáveis nos núcleos. Fora dos núcleos têm meia vida de $885,7(8)s=14,8min$.*
- 1937 **Davidson e G. P. Thomson ganham o prêmio Nobel de Física** pela observação do **caráter ondulatório das partículas materiais.**

Observando ondas das partículas – breve histórico (continuação)

- *No mesmo ano de 1937, em uma reunião em openhaague os físicos fazem um acoardo sobre a interpretação "oficial" da MQ, muito sobre a proposta de Max Born, conhecida com interpretação de Copenhagen.*
- *A partir daí, ainda no século XX, da eletrônica à computação, tudo muito "palpável", consatruídos a partir de efeitos quânticos.*
- ***Boa idéia com resultados experimentais comprovados vira ciência aceita!***

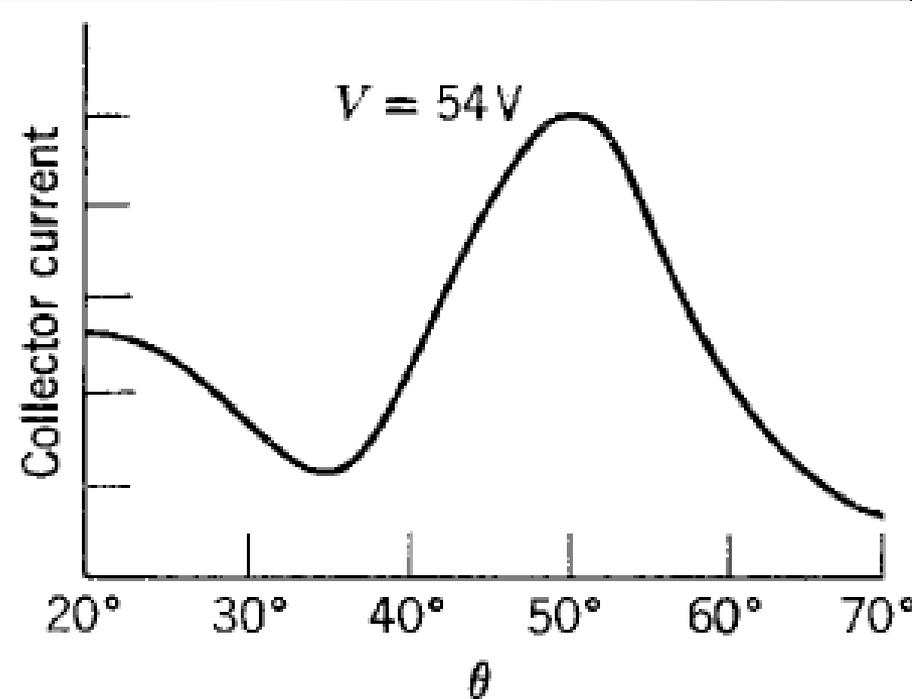
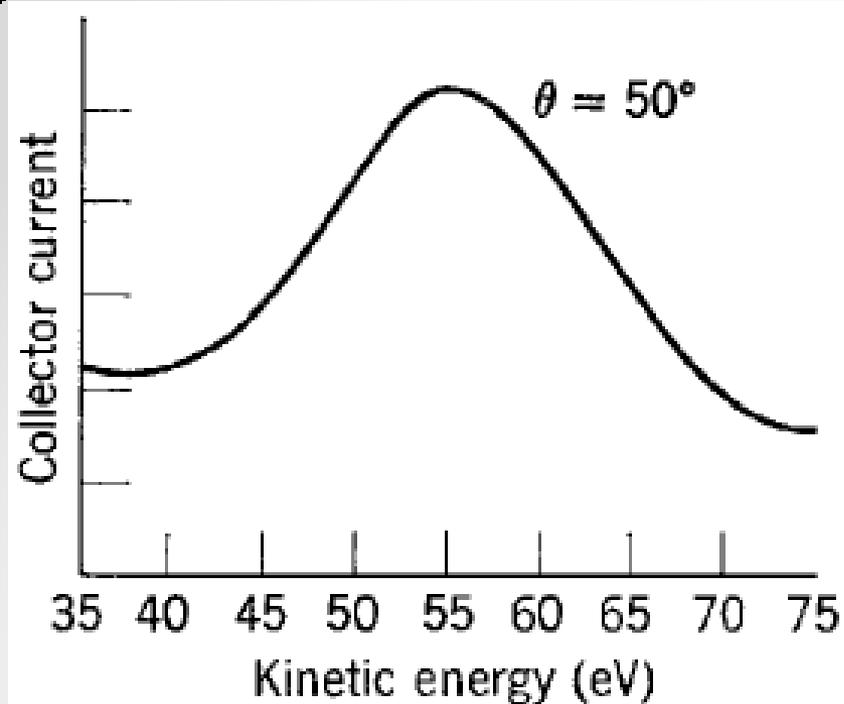


Figure 3-2 *Left:* The collector current in detector D of Figure 3-1 as a function of the kinetic energy of the incident electrons, showing a diffraction maximum. The angle θ in Figure 3-1 is adjusted to 50° . If an appreciably smaller or larger value is used, the diffraction maximum disappears. *Right:* The current as a function of detector angle for the fixed value of electron kinetic energy 54 eV.

Acidente na Bell: elétrons de 54eV obedeciam a relação de Bragg $2d\cos \theta = m\lambda$, para $\theta=50$ e $d=0,91$ angstroms (mesmo d da difração e raios-X).

Difração na "reflexão" de feixe de elétrons por policristais (folhas finas)

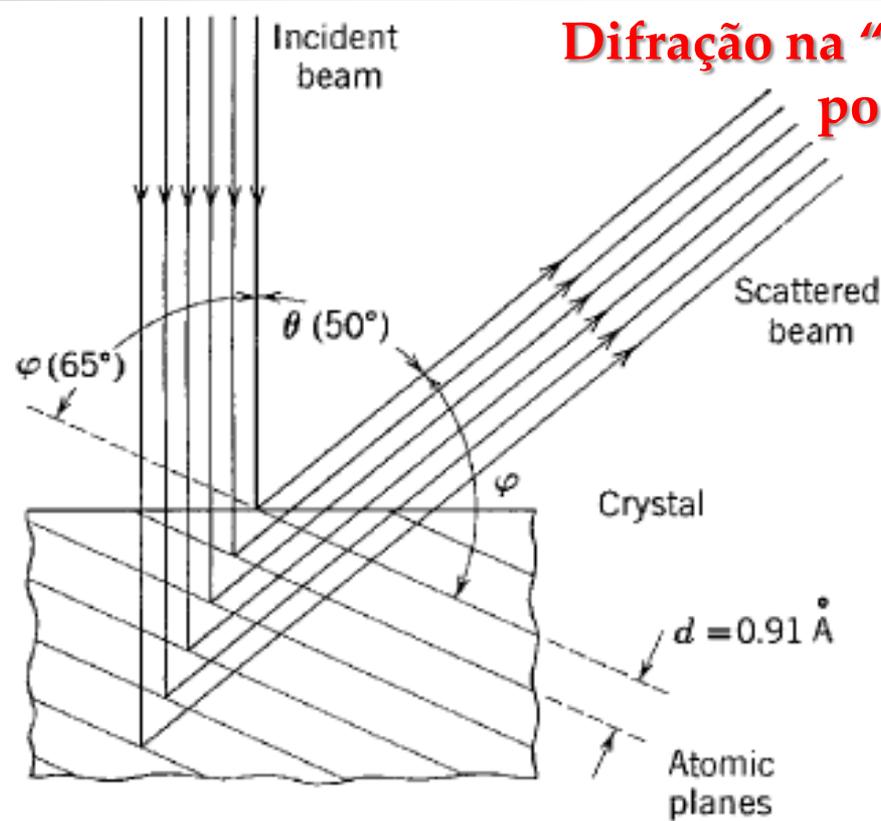
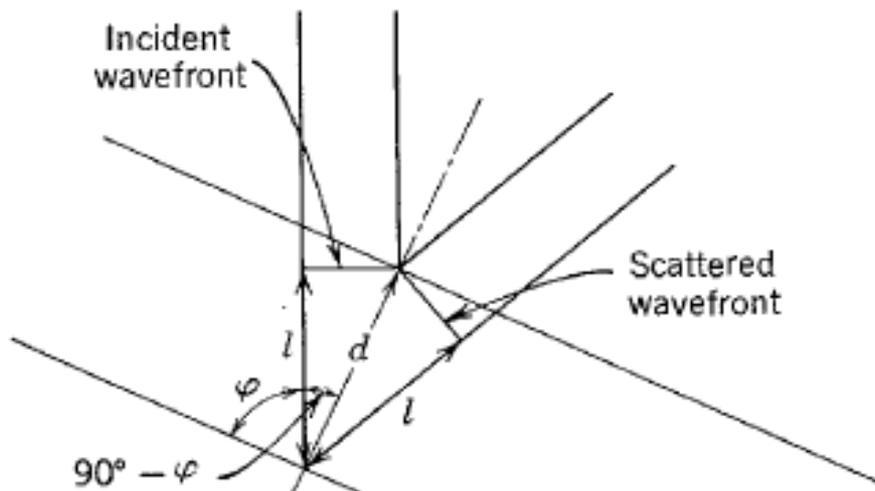
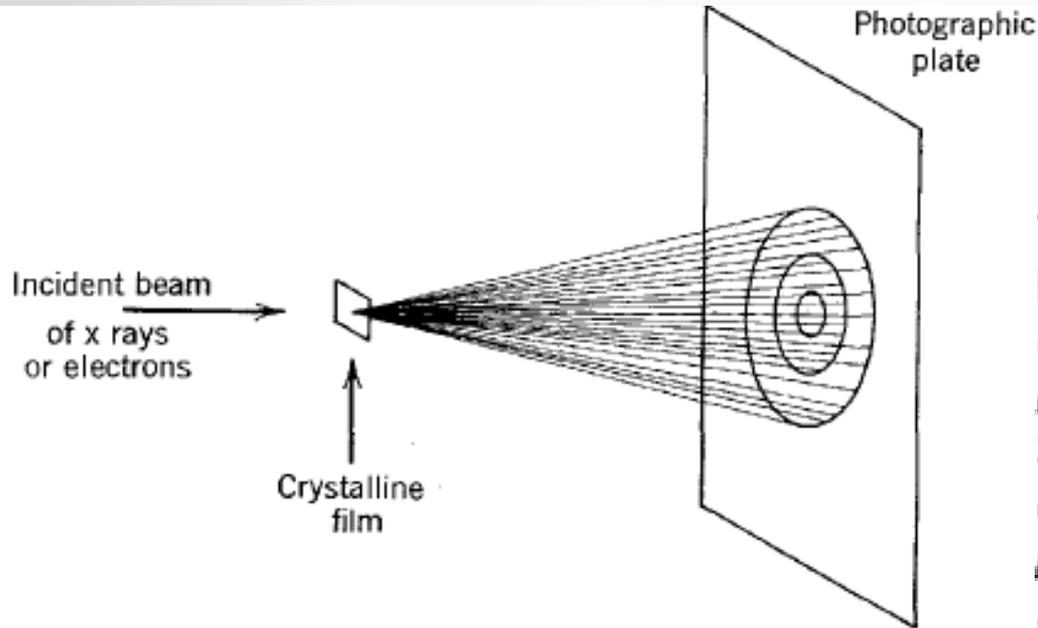


Figure 3-3 *Top:* The strong diffracted beam at $\theta = 50^\circ$ and $V = 54$ V arises from wavelike scattering from the family of atomic planes shown, which have a separation distance $d = 0.91$ Å. The Bragg angle is $\varphi = 65^\circ$. For simplicity, refraction of the scattered wave as it leaves the crystal surface is not indicated. *Bottom:* Derivation of the Bragg relation, showing only two atomic planes and two rays of the incident and scattered beams. If an integral number of wavelengths $n\lambda$ just fit into the distance $2l$ from incident to scattered wave fronts measured along the lower ray, then the contributions along the two rays to the scattered wave front will be in phase and a diffraction maximum will be obtained at the angle φ . Since $l/d = \cos(90^\circ - \varphi) = \sin \varphi$, we have $2l = 2d \sin \varphi$, and so we obtain the Bragg relation $n\lambda = 2d \sin \varphi$. The "first order" diffraction maximum ($n = 1$) is usually most intense.

$$\text{Relação de Bragg: } 2d \cos \theta = m\lambda$$

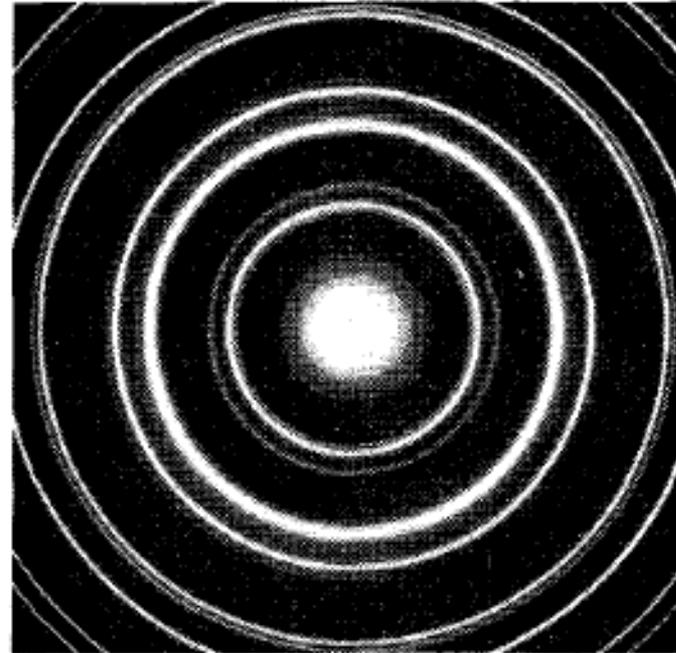
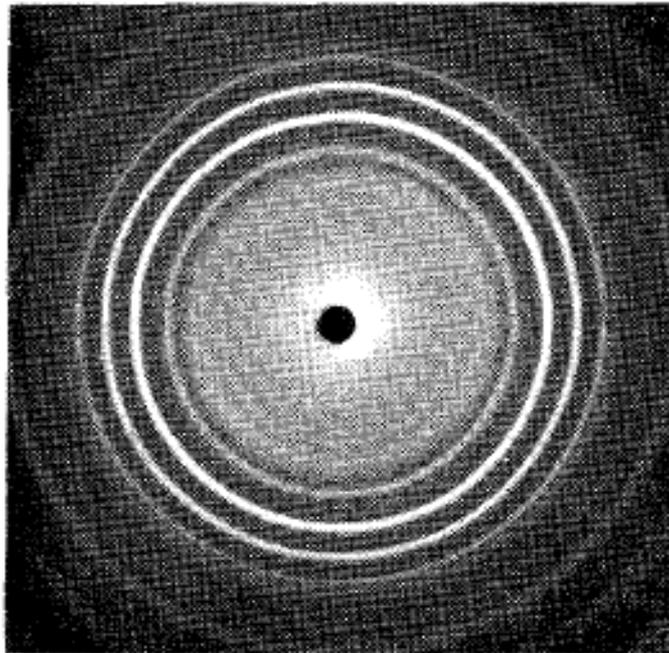


Difração em experimento de transmissão de feixe de elétrons e de raios X por material policristalino (folhas finas).

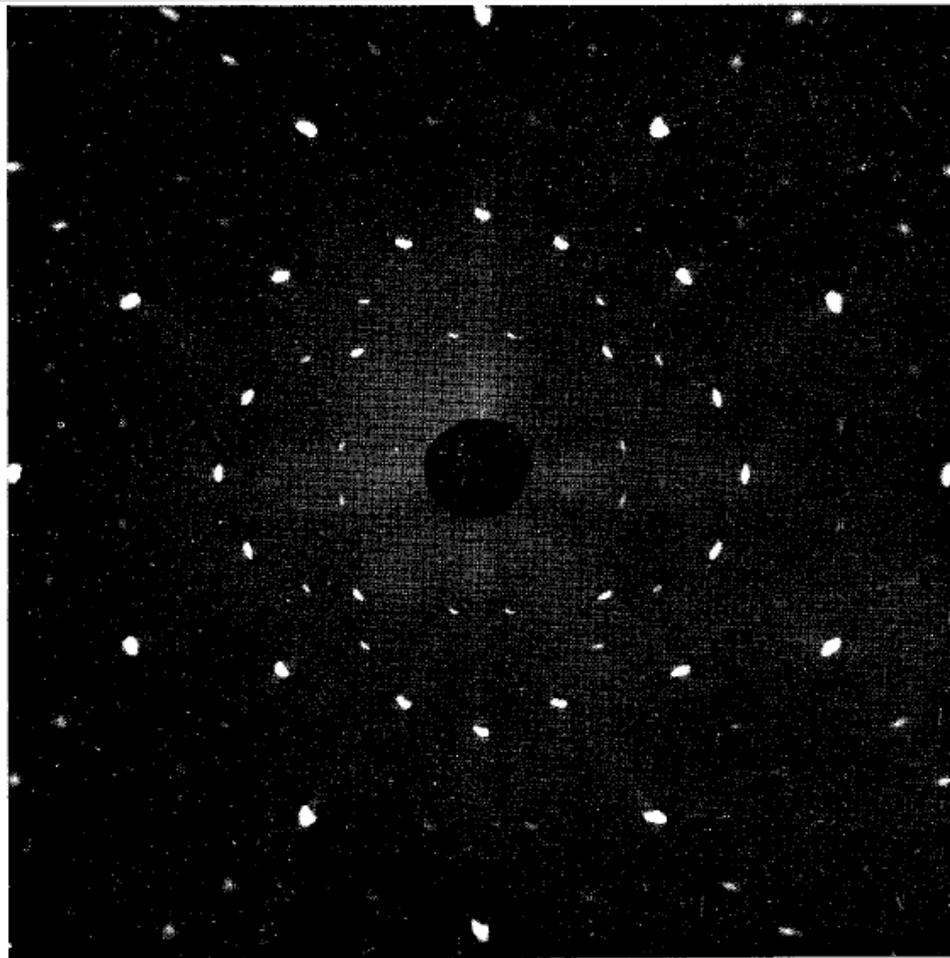


Top: The experimental arrangement for Debye-Scherrer diffraction of x rays or electrons by a polycrystalline material.
Bottom left: Debye-Scherrer pattern of x-ray diffraction by zirconium oxide crystals.

Bottom right: Debye-Scherrer pattern of electron diffraction by gold crystals.



Difração de nêutrons e de raios X em experimentos de transmissão por monocristal de cloreto de sódio



Left Laue pattern of x-ray diffraction by a single sodium chloride crystal.

Right Laue pattern of diffraction of neutrons from a nuclear reactor by a single sodium chloride crystal.

Princípio de complementaridade de Bohr ~ 1932



Os aspectos corpuscular e ondulatório da partícula material (e da radiação eletromagnética) são complementares: se uma observação (medida) revela o caráter corpuscular, então é impossível que revele também o ondulatório, e vice-versa.

Ao lado: armas desenhadas por Bohr para receber a comenda de Cavaleiro da Ordem do Elefante da Dinamarca em 1947

**Contraria sunt complementa
(contrários são complementares)**

Bohr e Einstein – debates acalorados...

sem perder a ternura!



Em 1927, na conferência de Solvay, Einstein bombardeou Bohr com questões que faziam objeções à interpretação probabilística para uma partícula colocando situações que violariam princípios básicos da Física. E o fez do café da manhã até o anoitecer.

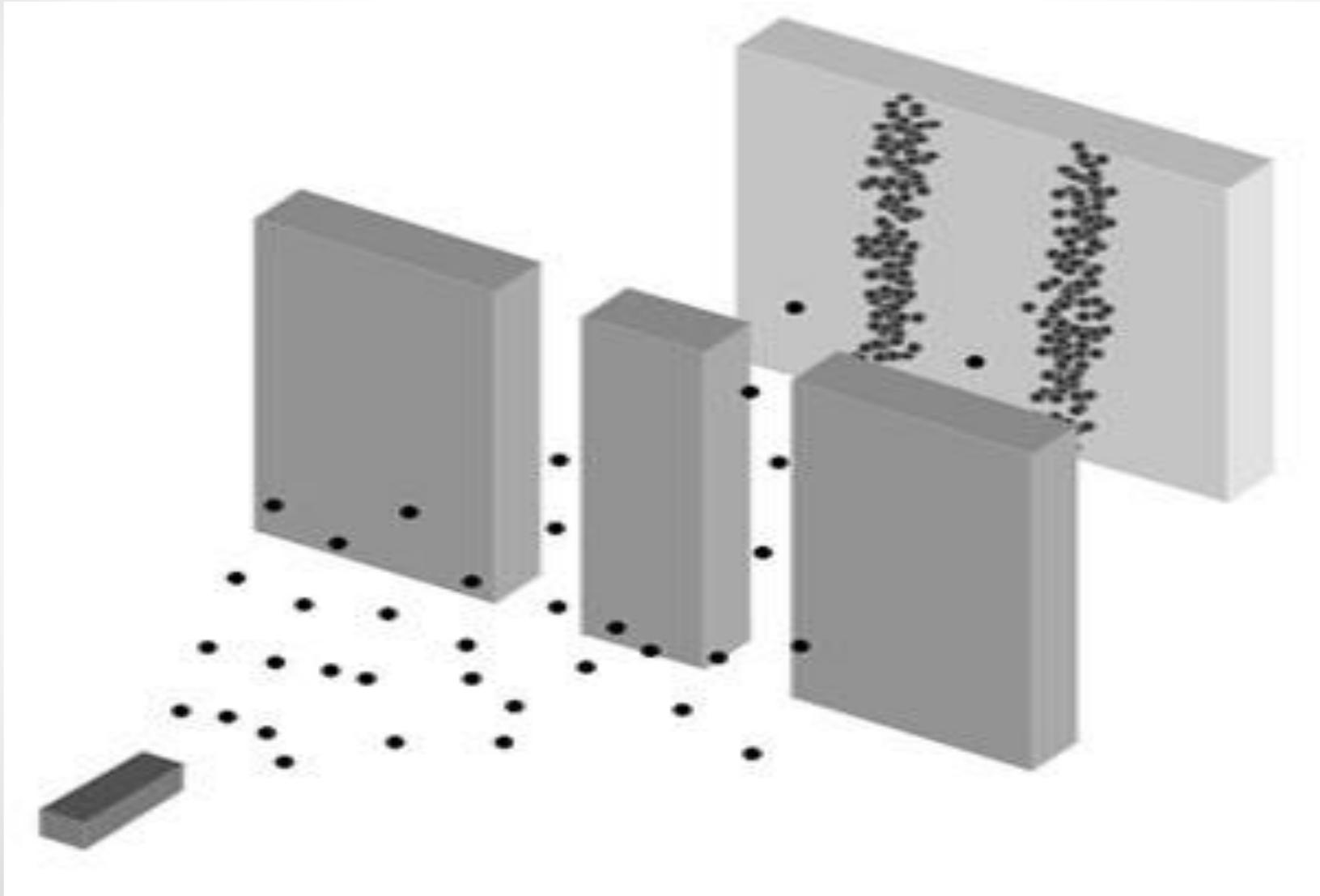
A cada “experimento de pensamento” proposto por Einstein como um paradoxo, Bohr refutou, cuidadosa e satisfatoriamente.

Na verdade esta discussão se prolongou até 1930 e levou Bohr ao princípio de complementaridade, e também ao entendimento vigente do princípio de incerteza de Heisenberg, acordado em uma conferência em Copenhague em 1937. Esta interpretação é a adotada na disciplina

Complementaridade na Mecânica Quântica

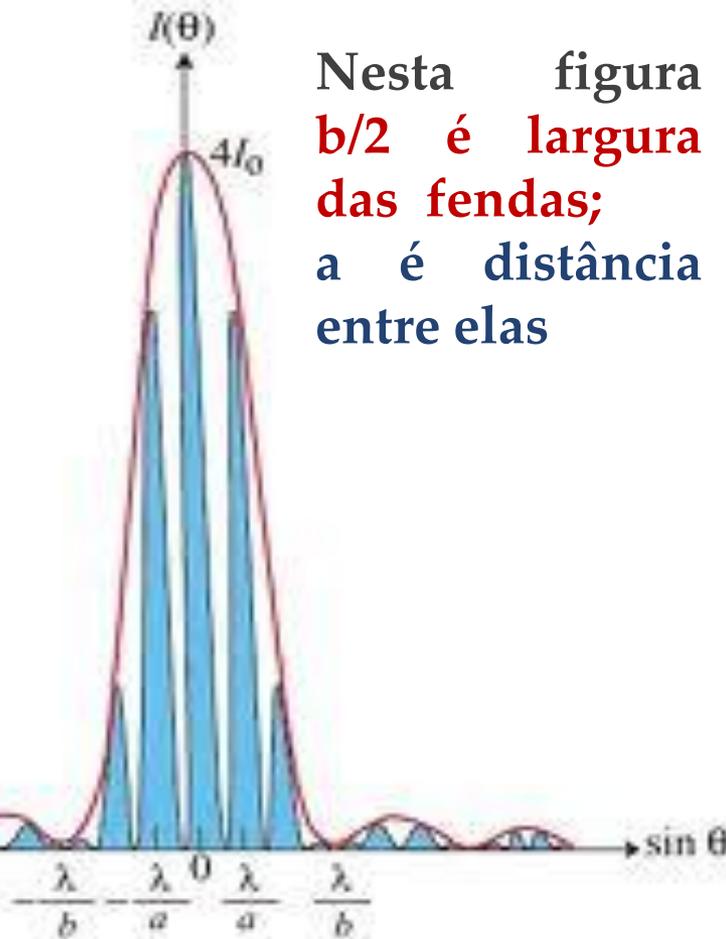
- [Leon Rosenfeld \(1\)](#)
- **"complementarity is not a philosophical superstructure invented by Bohr to be placed as a decoration on top of the quantal formalism, it is the bedrock of the quantal description".**
- Em tradução livre: **"complementaridade não é uma superestrutura filosófica inventada por Bohr para ser colocada como uma decoração sobre o formalismo quântico; ela é o alicerce da descrição quântica"**
- [\(1\) "Complementarity: Bedrock of the Quantal Description"](#), Léon Rosenfeld, ed. Kalckar, et.al. (1996), em *Foundations of Quantum Physics II (1933 - 1958)*. Edição de J. Kalckar, Niels Bohr Collected Works; Elsevier. pp. 284–285.

Partículas passando por duas fendas

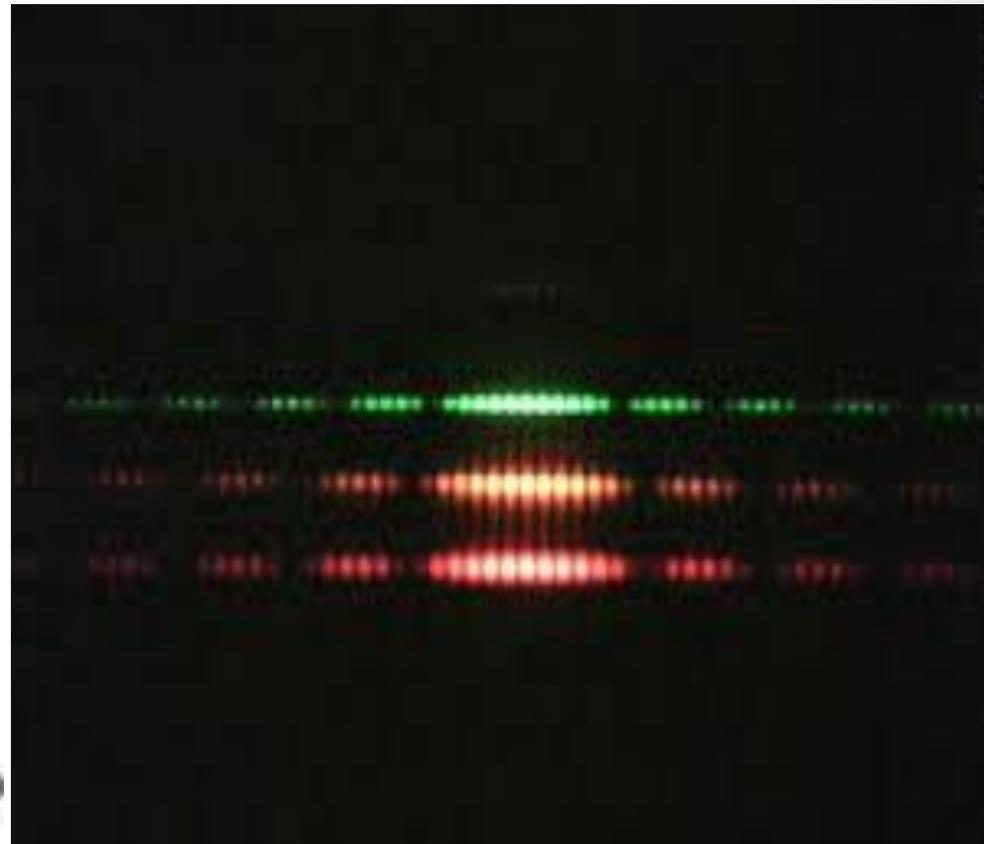


Onda plana: difração em cada fenda e interferência de duas fendas

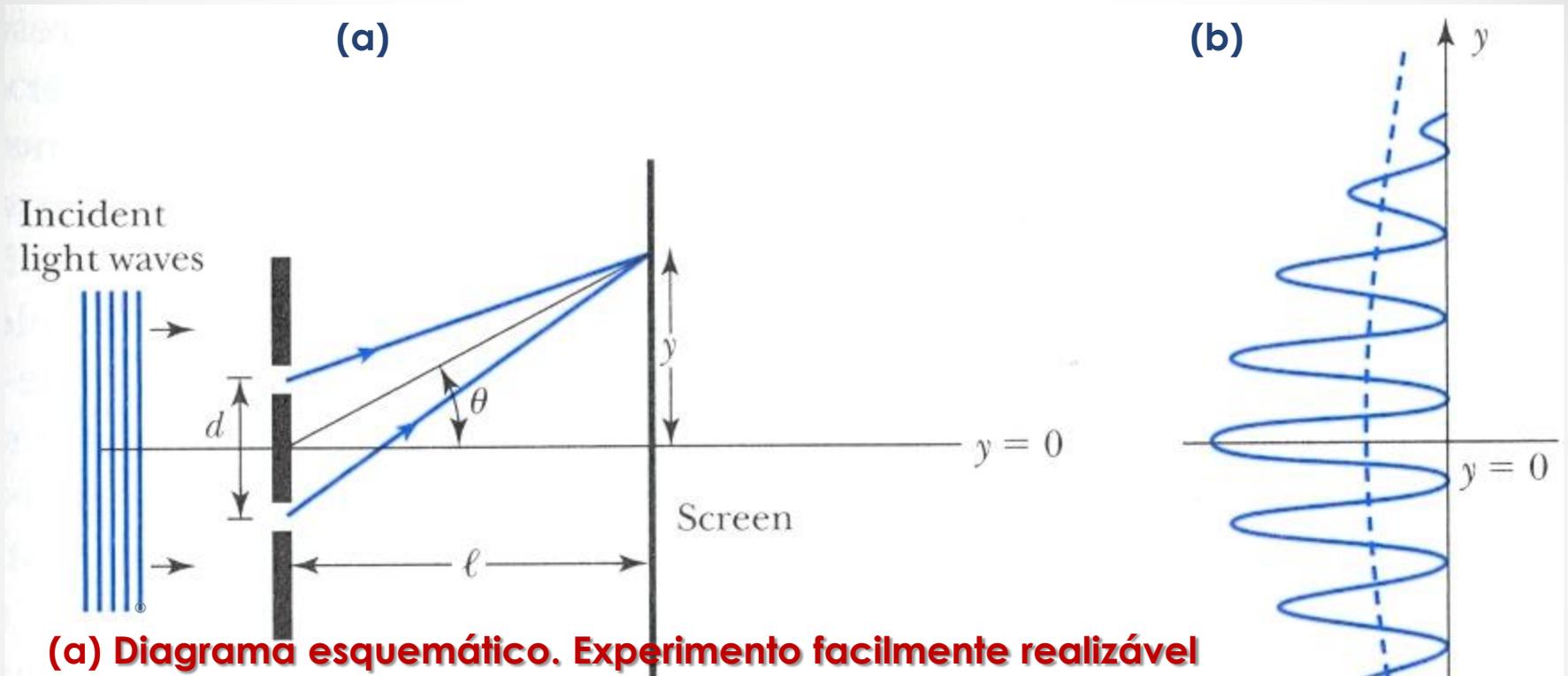
A intensidade na tela



A tela de frente



O experimento de duas fendas de Young

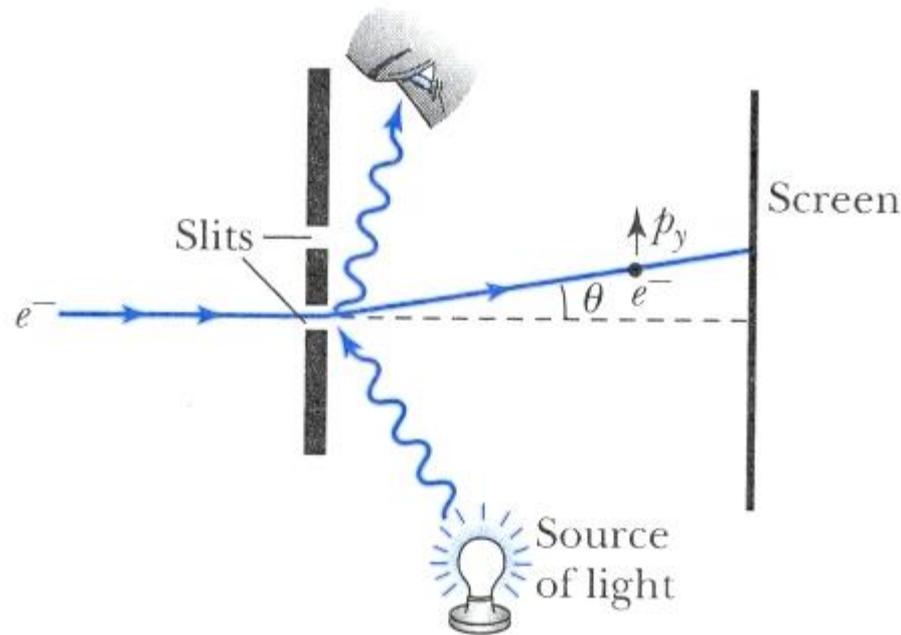


(a) Diagrama esquemático. Experimento facilmente realizável com laser como fonte de luz ($\ell \ll d$). Esperado o mesmo de partículas materiais com o mesmo comprimento de onda.

(b) A linha sólida indica o padrão de Interferência das duas fendas superposta à difração nas fendas. Se uma das fendas for coberta se observará uma intensidade como a da linha tracejada, mas com o máximo em frente à fenda aberta, devido à difração na fenda.

Experimento no debate Einstein-Bohr

Einstein: e se for observado em qual fenda o elétron passou, o que se observa na tela? E se for fechada a fenda? O Observador “interfere” na natureza Física?



O $\lambda_f \sim d/2$ para ser possível distinguir se a partícula passou pela fenda de cima ou de baixo. Mas isto quer dizer que na direção vertical se passa a ter uma indeterminação da ordem de $d/2$. Pelo princípio de incerteza, $\Delta p_y \geq \hbar/d$. Este momento Δp_y (já que inicialmente $p_y=0$) causa um desvio na direção y que “borra” a franja de interferência. (Reveja a condição da posição do primeiro mínimo em relação ao máximo central).

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 4. As funções de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ e $\Phi(\vec{p}, t)$ **são a transformada de Fourier uma da outra**, ou seja, ao se conhecer uma a outra pode ser determinada pela transformada de Fourier. **O vínculo entre as duas funções de onda vem das relações de incerteza**, que relaciona a indeterminação de cada coordenada com o momento linear naquela direção.

Postulado 5. Quando se descreve a dinâmica da partícula pelas funções de onda espaço real $\Psi(\vec{r}, t)$ **as grandezas físicas que dependem somente da posição são representadas pelas mesmas funções que na Física clássica.**