

Universidade de São Paulo Instituto de Física

EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS DA NATUREZA QUÂNTICA DA
RADIAÇÃO E DA MATÉRIA

AULA 09

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br
rodrigo.fernandes.me@gmail.com

2º. Semestre de 2023

Monitores: Rodrigo Fernandes de Almeida
Samuel Pizzol

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

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

Puderam ser explicados pelas hipóteses de quantização

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

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 falha 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:

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

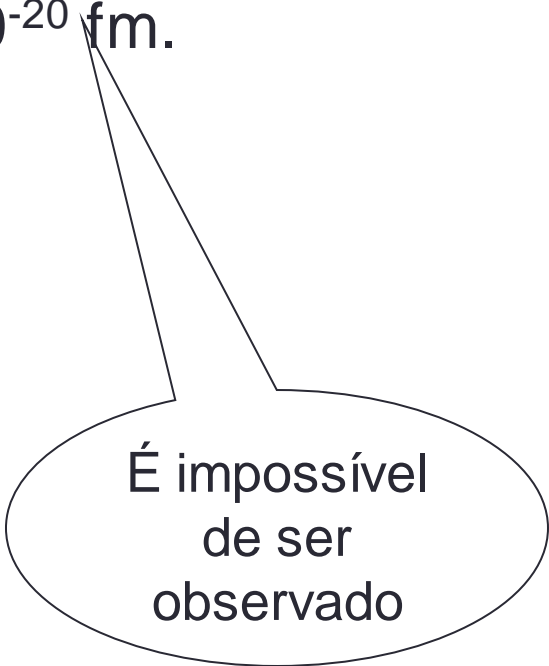
Exemplo:

Corpos macroscópicos \Rightarrow massa \Rightarrow momento $\Rightarrow \lambda$ pequeno

Objeto de massa de 1 kg com $v=10$ m/s

$$\Rightarrow \lambda = h/mv = 6,6 \times 10^{-34} \text{ J.s}/10 \text{ kg.m/s}$$

$$\Rightarrow \lambda = 6,6 \times 10^{-35} \text{ m} = 6,6 \times 10^{-20} \text{ fm.}$$



É impossível
de ser
observado

Exemplo:

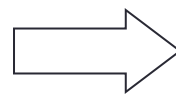
Elétron Qual é o comprimento de onda associado, se este possui energia cinética de 100 eV:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2 E}} = \frac{1,24keVnm}{\sqrt{2.5 \cdot 10^5 \cdot 100(eV)^2}} = 0,12nm = 1.2 \text{ \AA}$$

OU

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{6.6 \times 10^{-34} J \cdot s}{\sqrt{2 \cdot 9.1 \times 10^{-31} kg \cdot 100eV \cdot 1.6 \times 10^{-19} J/eV}} = 1.2 \times 10^{-10} m$$

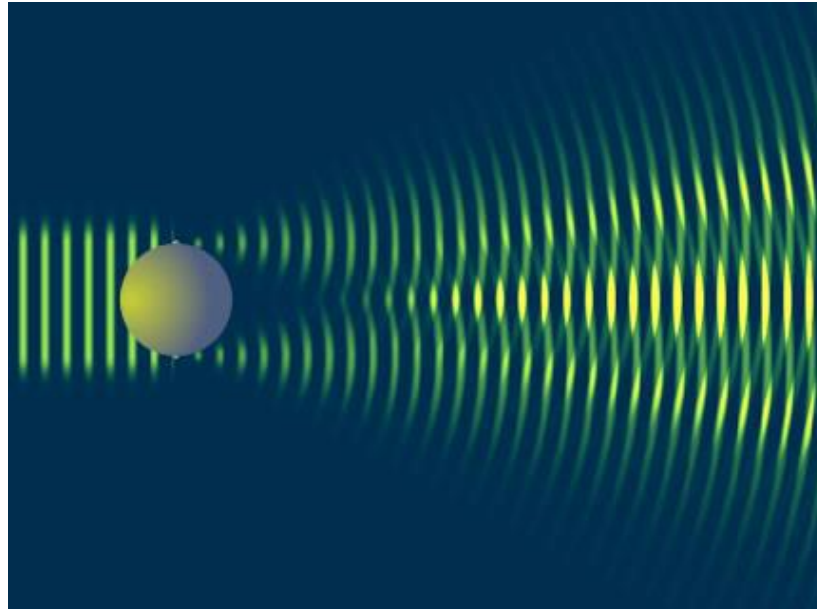
Comprimento de onda é pequeno, da mesma ordem de grandeza que o tamanho de um átomo e que o espaçamento dos planos atômicos de um cristal



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

Difração de elétrons

- Como verificar se a hipótese de de Broglie está correta?
- Podemos tentar observar a difração de elétrons, da mesma forma como observamos a difração da luz ou de raios X



Difração de RX

Na descoberta do RX por Roentgen este verificou que os raios X :

- 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

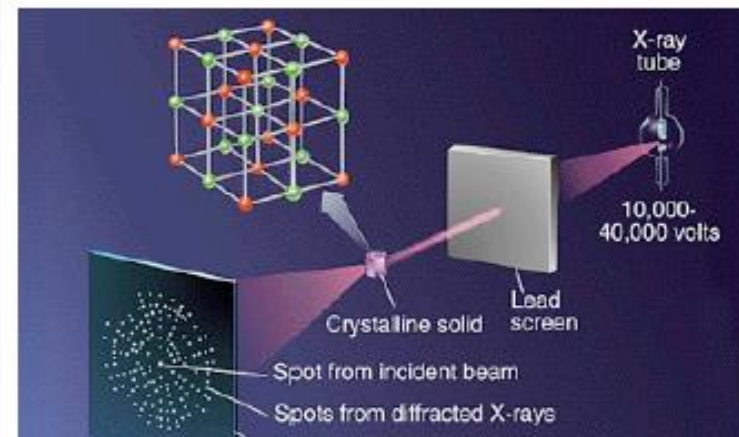
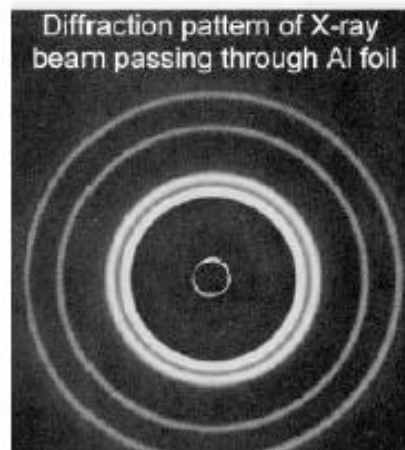
$$\lambda \sim 10^{-10} m = 0,1nm$$

- 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

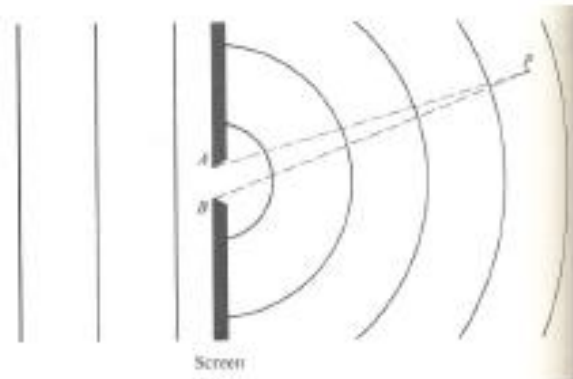
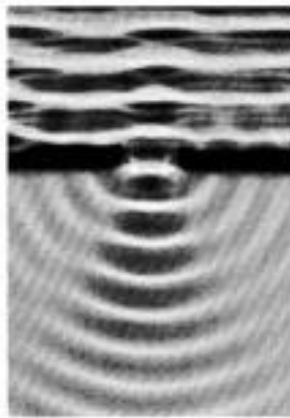
- Para ocorrer o fenômeno da difração é preciso que a dimensão do “obstáculo óptico” (abertura da fenda, espaçamento em uma rede de difração, etc.) seja da ordem de grandeza do comprimento de onda que se deseja estudar
- Bragg em 1912 estudou a difração de raios X em várias famílias de planos paralelos 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 número inteiro de comprimento de onda

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



Difração de Fraunhofer: espalhamento por um ponto

- Princípio de Huygens-Fresnel
 - “Todo ponto não-obstruído de uma frente de onda, servirá como uma fonte de ondas esféricas secundárias”
 - Neste caso, teremos apenas interferência construtiva

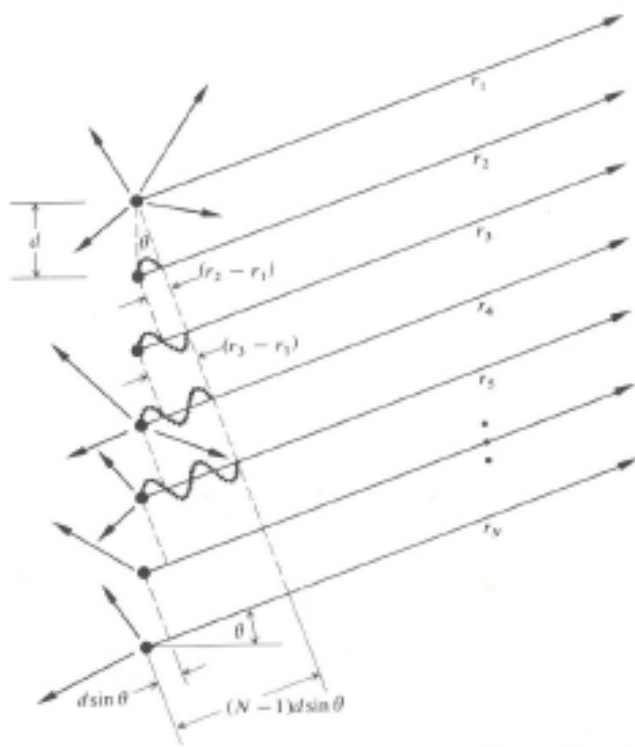


Se houver duas ou mais fontes ocorrerá também uma interferência construtiva/ destrutiva formando o conhecido padrão de interferência

Difração de Fraunhofer: espalhamento por vários pontos

- Princípio de Huygens-Fresnel:
 - Haverá interferência construtiva/destrutiva e os pontos de máximo ocorrerão para ângulos de espalhamento dados por:

$$d \cdot \text{sen}(\theta) = n\lambda$$

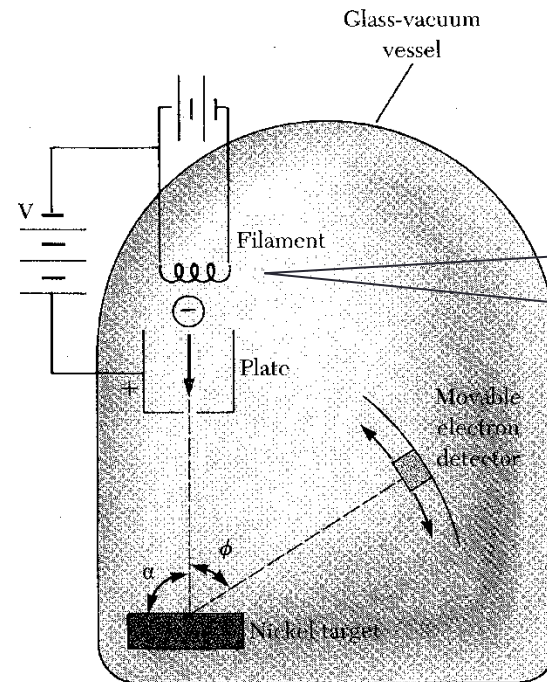


Difração de elétrons

Testes experimentais da hipótese de de Broglie

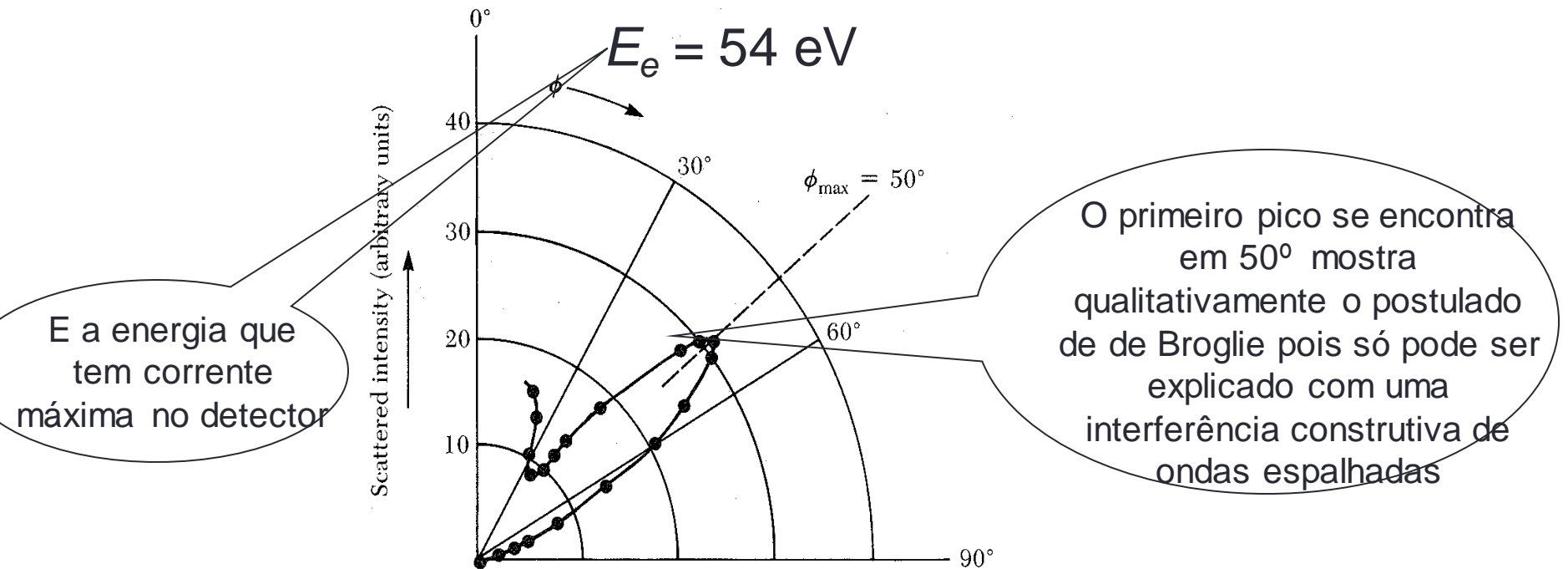
**1927 Davisson e Germer (USA)
e G. Thomson (Escócia):**

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

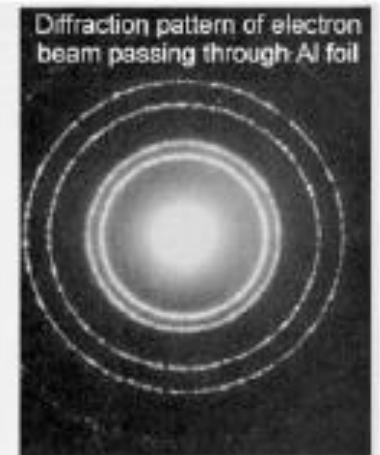
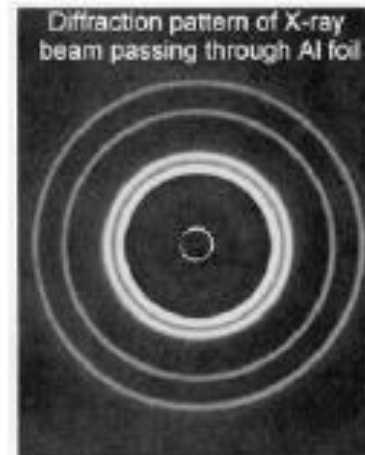


Potencial faz com que os e^- sejam emitidos com E (eV)

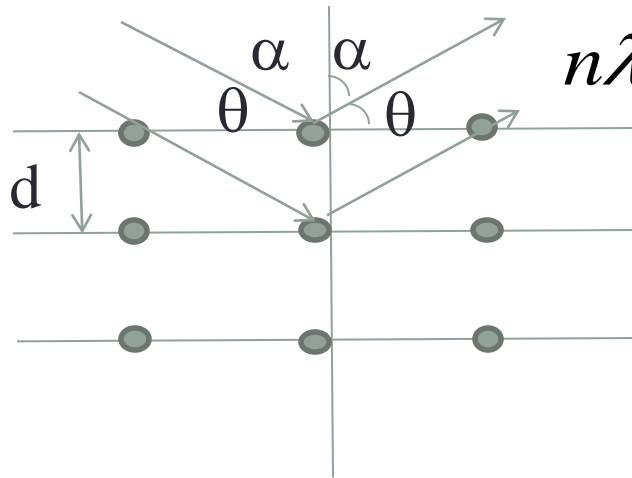
Difração de elétrons



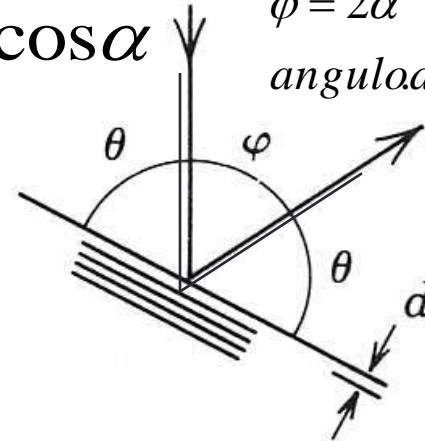
Eles observaram que, para elétrons com energia de 54 eV, a quantidade de elétrons espalhados apresentava picos em função do ângulo, como no caso de uma figura de difração



Difração de elétrons



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



Máximo \Rightarrow

$$\phi = 2\alpha$$

angulo de espalhamento

d é a distância entre os planos de Bragg está relacionada a distância interatômica D através da relação:

$$d = D \sin \alpha$$

$$n\lambda = 2D \sin \alpha \cos \alpha$$

$$n\lambda = D \sin 2\alpha = D \sin \phi$$

Vamos calcular o λ usando difração de RX (XRD):

A análise de XRD revelar que para o Níquel a $D=0,215\text{nm}$.

Então o comprimento de onda calculado para $n=1$ é:

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

Ou usando a distância Interplanar:

Medidas com raios-X $\Rightarrow d = 0,091 \text{ nm}$

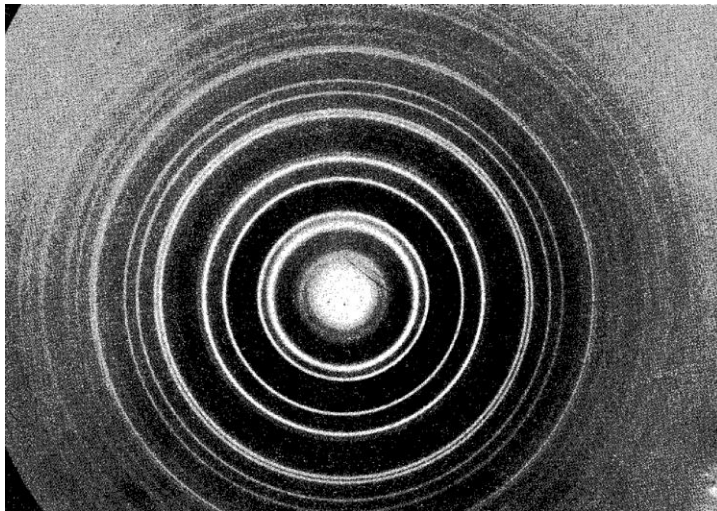
Máximo em $\varphi = 50^\circ \Rightarrow \lambda = 2d \cos \varphi / 2 = 2 \times 0,091 \times 0,906 = 0,165 \text{ nm}$

Agora vamos calcular λ por De Broglie para elétrons de 54eV e´:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2 E}} = \frac{1,24 \text{ keV nm}}{\sqrt{2.5 \cdot 10^5 \cdot 54 (eV)^2}} \approx 0,168 \text{ nm}$$

Valor consistente com o anterior

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

$$E = E_0 + E_K$$

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

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

$$mc^2 = E_0 \dots$$

Energia de
repouso da
partícula

Energia cinética relativística

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

$u/c \ll 1$ – temos a energia cinética clássica

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

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

Caso relativístico

- Em algumas situações é importante escrever uma expressão que relacione a energia total e o momento p relativístico:

Energia total

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

$$mc^2 = E_0$$

Energia de repouso da partícula

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

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

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

Aplicável a qualquer partícula com qualquer energia

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?

- 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”

Dualidade Onda-partícula

Exercício

Um fóton realiza produção de pares de tal forma que o pósitron esteja em repouso e o elétron tenha uma energia cinética de 1,0 MeV e se move na direção na qual o fóton que produziu o par incidiu.

- (a) Desprezando a energia transmitida ao núcleo do átomo próximo, ache a energia do fóton incidente.
- (b) Que porcentagem do momento do fóton é transferida ao núcleo?

a) Conservação de energia

$$E_i = E_f$$

$$E_{\text{fóton}} = E_{e^+} + E_{e^-} + E_{K e^-} \quad E_0 = mc^2$$

$$E_{\text{fóton}} = mc^2 + mc^2 + 1\text{MeV} \quad E_e = E_0 + E_K$$

b) Conservação de momento

$$p_i = p_f$$

$$p_{\text{fóton}} = p_{e^+} + p_e + p_N$$

$$\frac{E_{\text{fóton}}}{c} = 0 + p_e + p_N$$

$$cp_N = E_{\text{fóton}} - p_e c$$

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

$$E_e^2 = p^2 c^2 + E_0^2$$

$$(E_K + m_0 c^2)^2 = p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2$$

$$E_K^2 + 2E_K m_0 c^2 + (m_0 c^2)^2 - (m_0 c^2)^2 = p^2 c^2$$

$$p^2 c^2 = E_K^2 + 2E_K m_0 c^2$$

$$cp_N = 2,022 - \sqrt{E_K^2 + 2E_K m_0 c^2}$$

$$cp_N = 2,022 - \sqrt{1^2 + 2 \times 1 \times 0,511}$$

$$cp_N = 2,022 - \sqrt{2,022} = 0,6$$

$$\frac{p_N}{p_{\text{fóton}}} = \frac{0,6/c}{E_{\text{foton}}/c} = \frac{0,6}{2,022} = 29,7$$

~30% do momento do fóton é transferido para o núcleo

Propriedades ondulatórias da matéria

- Se as partículas que constituem a matéria (como os elétrons) possuem propriedades ondulatórias, como podemos descrever um elétron então?
- **O que seria essa “onda” que constitui o elétron? O elétron é uma onda se propagando em que meio?**
- Como descrever essa “onda” do elétron matematicamente?

Dualidade Onda-Partícula

- A mesma ideia da dualidade onda-partícula da radiação eletromagnética é válida para a matéria
- 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”

Dualidade Onda-Partícula

- Max Born introduziu uma interpretação probabilística para a dualidade onda-partícula
- Como no caso da radiação eletromagnética, podemos descrever a propagação da matéria a partir de uma abordagem ondulatória
- Essa onda, chamada de *função de onda* e representada pela letra grega Ψ , determina a **probabilidade** da partícula ser observada em uma certa posição em um certo instante de tempo