

Universidade de São Paulo Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 12

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

1o. Semestre de 2015

Monitor: Gabriel M. de Souza Santos

Página do curso:

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=5215>

17/04/2015

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:

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

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Uma interpretação física da regra de quantização de Bohr foi dada em 1924 por de Broglie

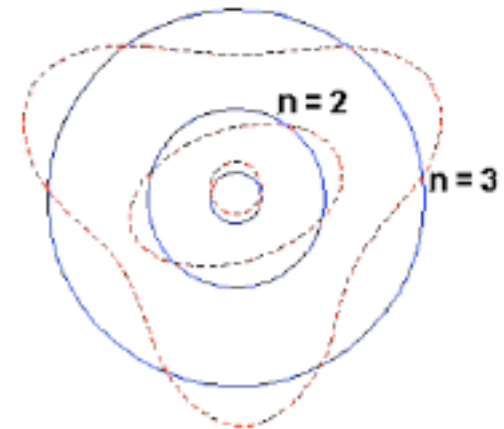
$$L = mvr = n\hbar \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

$$pr = \frac{nh}{2\pi}$$

Momento do elétron em uma órbita possível de raio r ,

$$\frac{h}{\lambda} r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$2\pi r = n\lambda$$



As órbitas possíveis são aquelas nas quais as circunferências podem conter exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de de Broglie

Sommerfeld trabalhou com órbitas elípticas para o átomo de H e também levou em conta as correções relativísticas para a energia do elétron. Usou isto como tentativa de explicar a estrutura fina do hidrogênio (**Estrutura fina é uma separação das linhas espectrais em várias componentes diferentes**).

Órbitas elípticas de Sommerfeld

Sommerfeld calculou os valores dos semi-eixos maior (a) e menor (b) que dão a forma e o tamanho das órbitas elípticas e a energia total E do elétron nessa órbita

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2}$$

$$b = a \frac{n_\theta}{n}$$

$$E = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2}$$

μ é a massa reduzida
n é o número quântico:

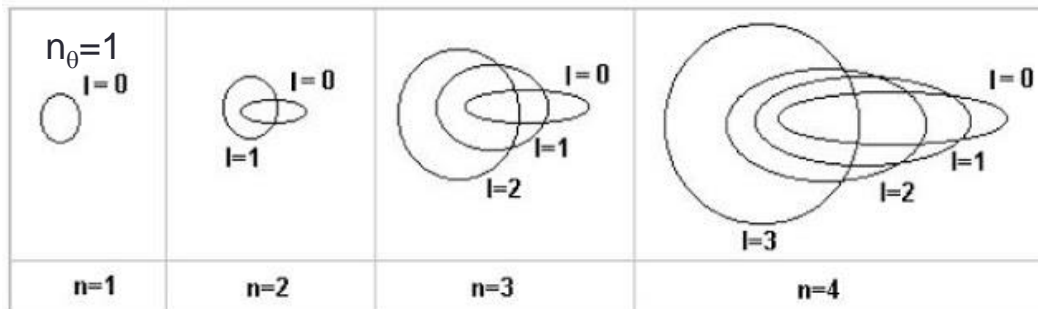
$$n \equiv n_\theta + n_r$$

$$n_\theta = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

As energias são degeneradas

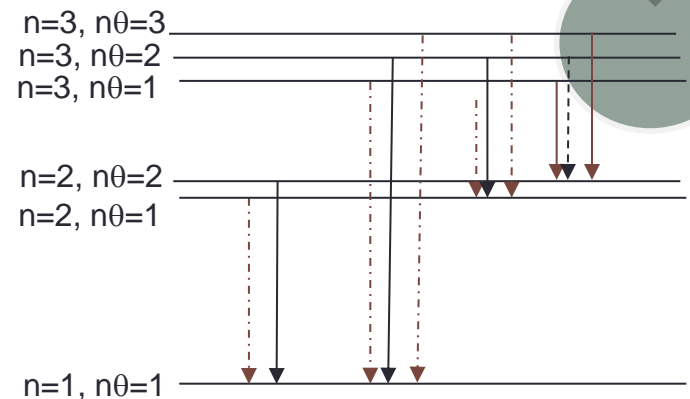


$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

$$E = E_4$$



Órbitas elípticas de Sommerfeld tratadas relativisticamente

O tamanho real da correção depende da velocidade média do elétron que por sua vez depende da excentricidade da órbita, correções da ordem de v^2/c^2 , era provável que a maior correção fosse na órbita muito excêntrica, porque v aumenta à medida que o elétron se aproxima do núcleo

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{mr} \quad (n=1)$$

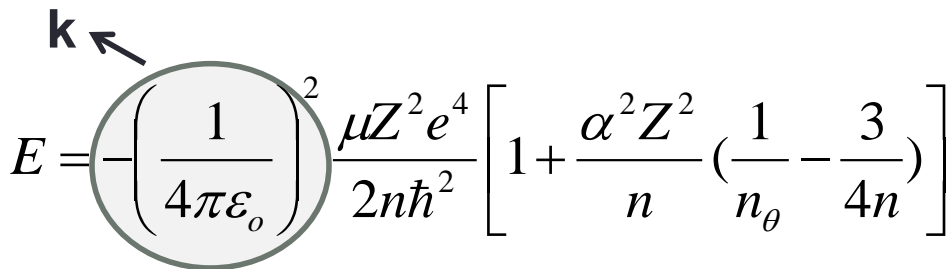
$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

$$v = \frac{\hbar}{mr_1} = \frac{\hbar}{m\left(\frac{\hbar^2}{mke^2}\right)} = \frac{ke^2}{\hbar}$$

$$\frac{v}{c} = \frac{ke^2}{\hbar c} = \frac{1,44\text{ev.nm}}{197,3\text{ev.nm}}$$

As linhas tracejadas não foram observadas nos espectros e estas transições não ocorrem (regras de seleção):

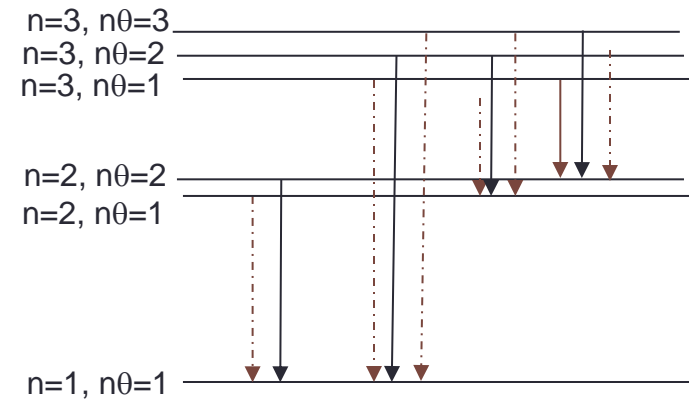
$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1$$



$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

α é chamada de “constante de estrutura fina”

$$\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$



Princípio de Correspondência

Um postulado auxiliar proposto por Bohr em 1923, pode auxiliar na justificativa das regras de seleção:

1) Para grandes números quânticos, os cálculos quânticos e os clássicos devem levar aos mesmos resultados

2) Uma regra de seleção é válida para todos os números quânticos possíveis. Portanto, todas as regras de seleção que são necessárias para obter a correspondência exigida no limite clássico (n grande) também se aplica no limite quântico

A partir de espectro vibracionais de moléculas $n_i - n_f = \pm 1$

pode-se dizer que os estados de energia vibracional para este sistema de moléculas são exatamente os mesmos de um oscilador harmônico simples, pois a força que leva a separação de equilíbrio de dois átomos tem a mesma forma de uma força de restauração harmônica

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

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

Propriedades ondulatórias da matéria – Cap. 3.4 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

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

Uma solução simples é a chamada onda harmônica

Cujo nº de onda

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

Velocidade de fase

$$v = f\lambda$$

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

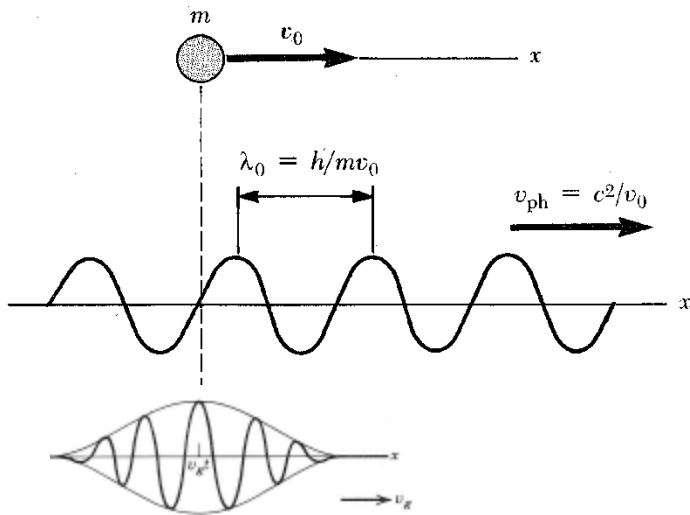
$$\Psi(x, t) = A \cos k(x - vt)$$

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

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

v é a
velocidade
de fase

Curva que viaja na
direção de x positivo

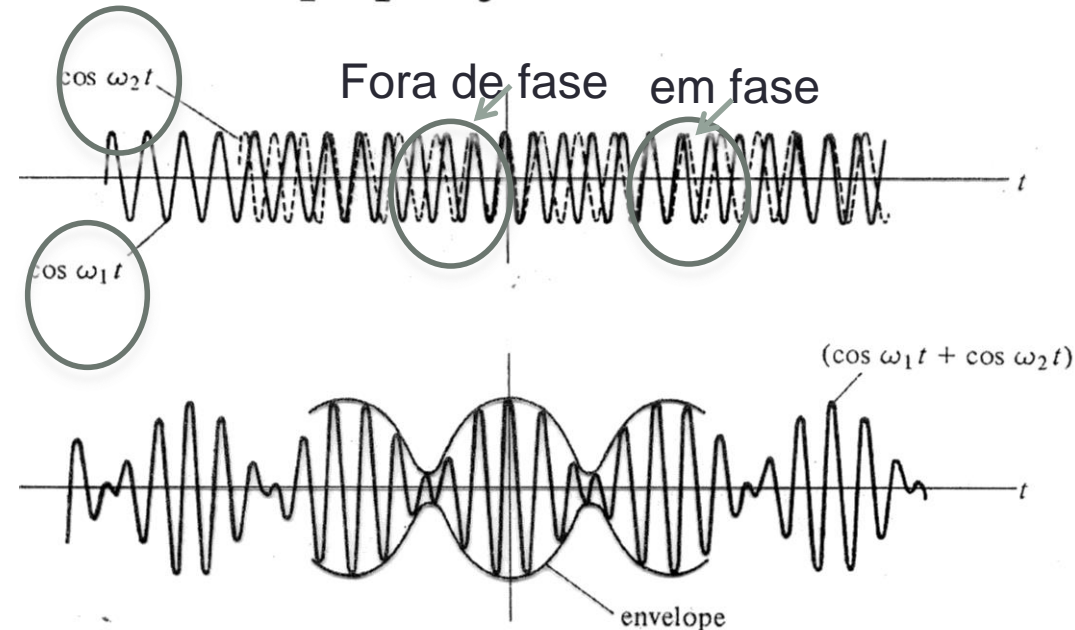


- Para representar uma partícula, devemos utilizar uma onda “localizada” no espaço, ou seja, um “pacote de ondas”, cuja velocidade de grupo coincide com a velocidade da partícula

Partícula \leftrightarrow 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

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

$$\omega = 2\pi f \text{ e } k = 2\pi/\lambda. \text{ Adicionamos as ondas}$$

usando o princípio de superposição:

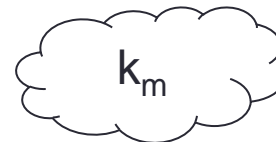
$$y = y_1 + y_2 = A \cos(k_1 x - \omega_1 t) + A \cos(k_2 x - \omega_2 t)$$

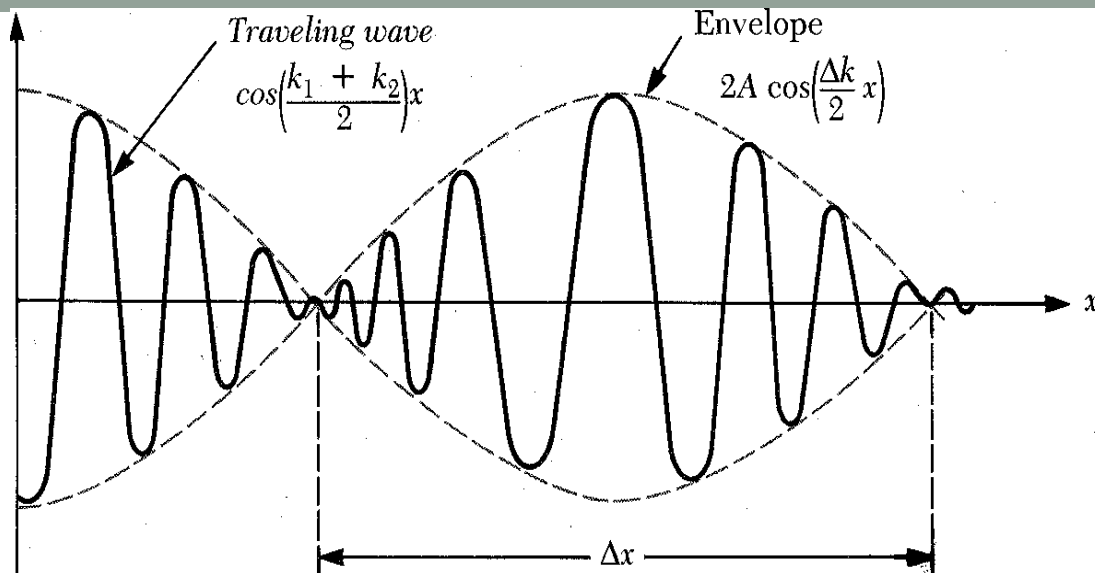
É conveniente escrever isso em uma forma que use a identidade trigonométrica

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

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

$$\begin{aligned} y &= 2A \cos\left[\frac{(k_1 x - \omega_1 t) - (k_2 x - \omega_2 t)}{2}\right] \cos\left[\frac{(k_1 x - \omega_1 t) + (k_2 x - \omega_2 t)}{2}\right] \\ &= \left[2A \cos\left(\frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta \omega}{2} t\right)\right] \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2} x - \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} t\right) \end{aligned} \quad [28.12]$$





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

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

amplitude
(envelope)

A velocidade de propagação das ondas individuais $v_f = w/k$

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

velocidade de grupo

A velocidade de propagação do grupo

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

- Para o postulado de de Broglie

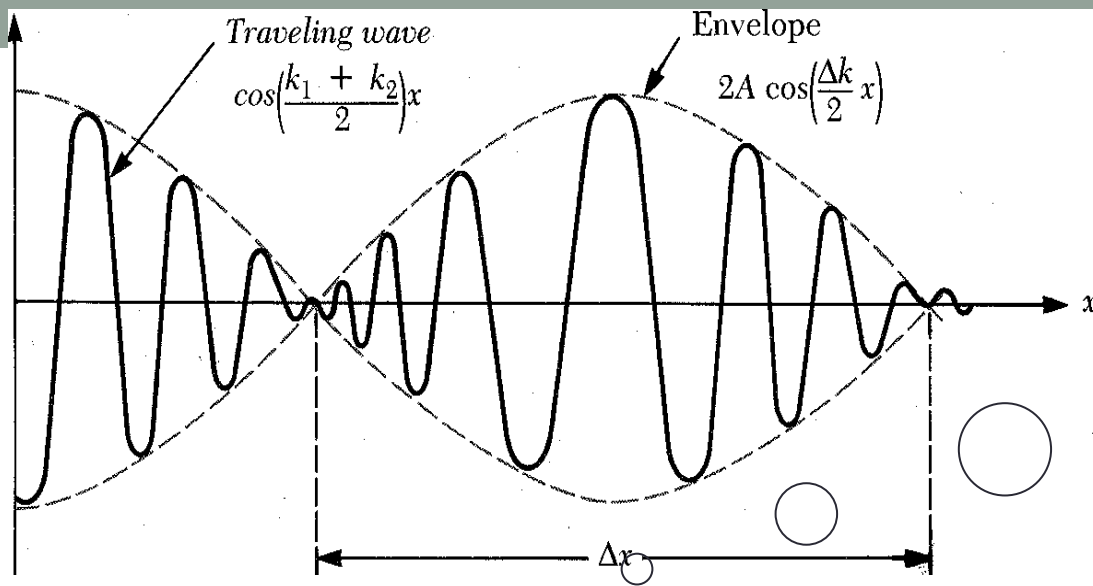
$$E = h\nu = \hbar\omega \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

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

- 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:

$$\frac{1}{2}(\Delta kx_2 - \Delta\omega t) - \frac{1}{2}(\Delta kx_1 - \Delta\omega t) = \pi$$

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

e

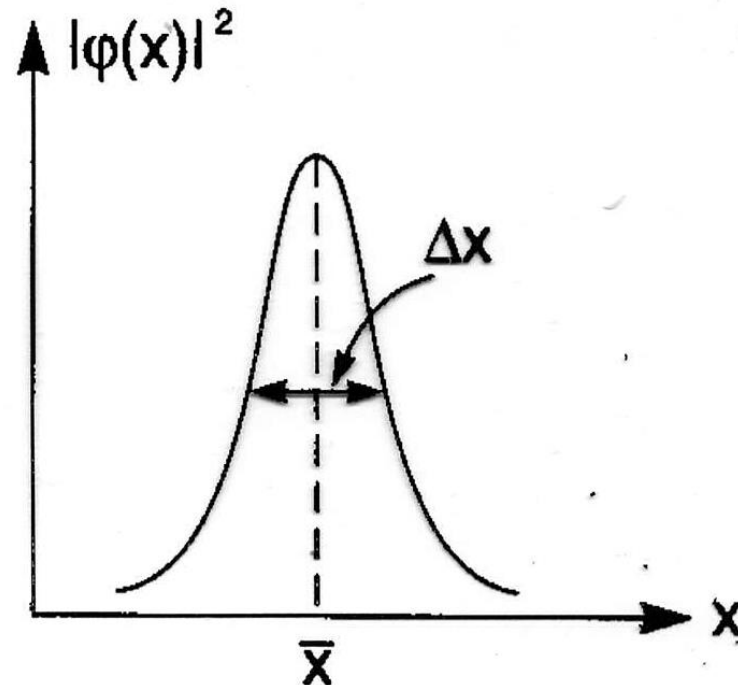
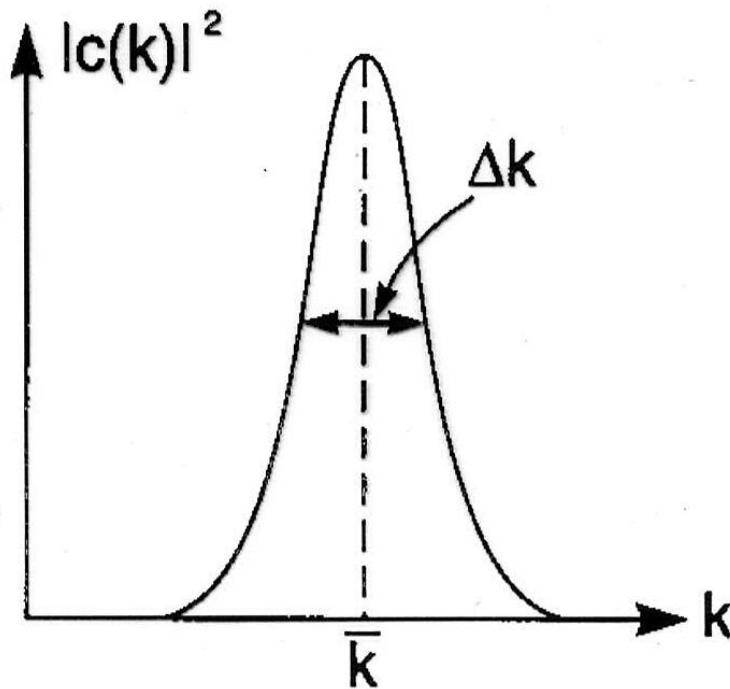
$$\Delta\omega\Delta t = 2\pi$$

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

A integral de Fourier

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

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



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

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

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

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

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

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:

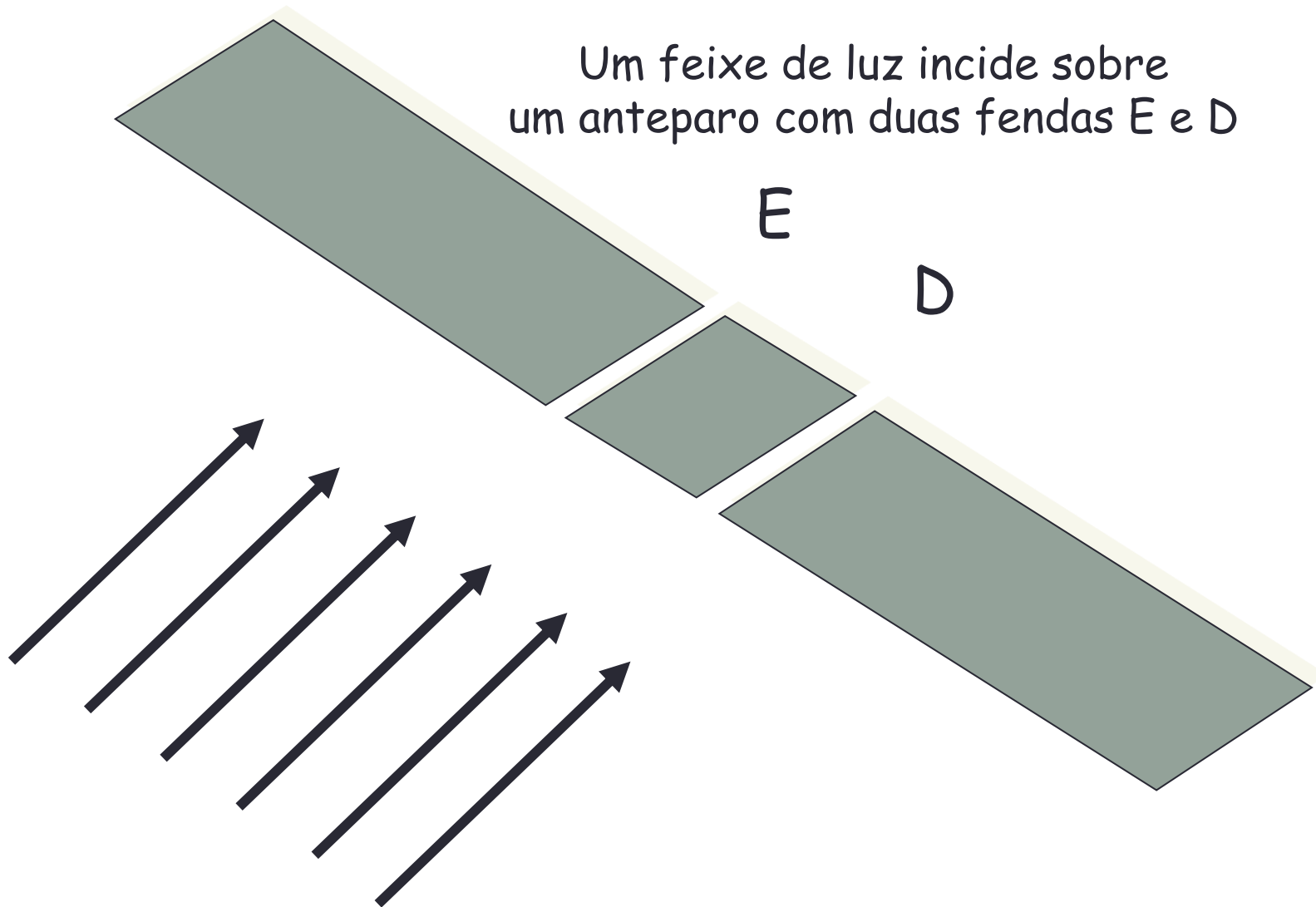
Das propriedades do pacote de onda, tem-se que:

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

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

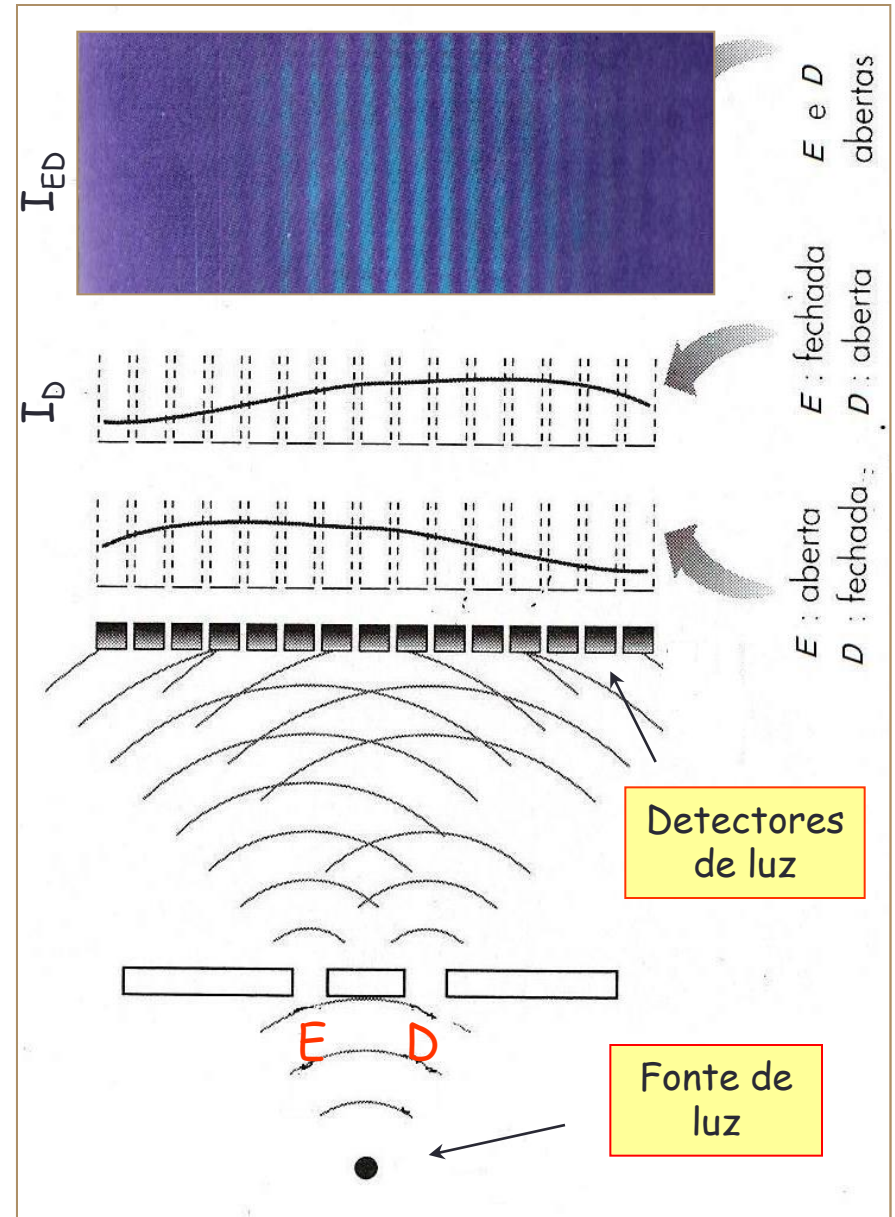
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Feixe de luz incidindo sobre fendas



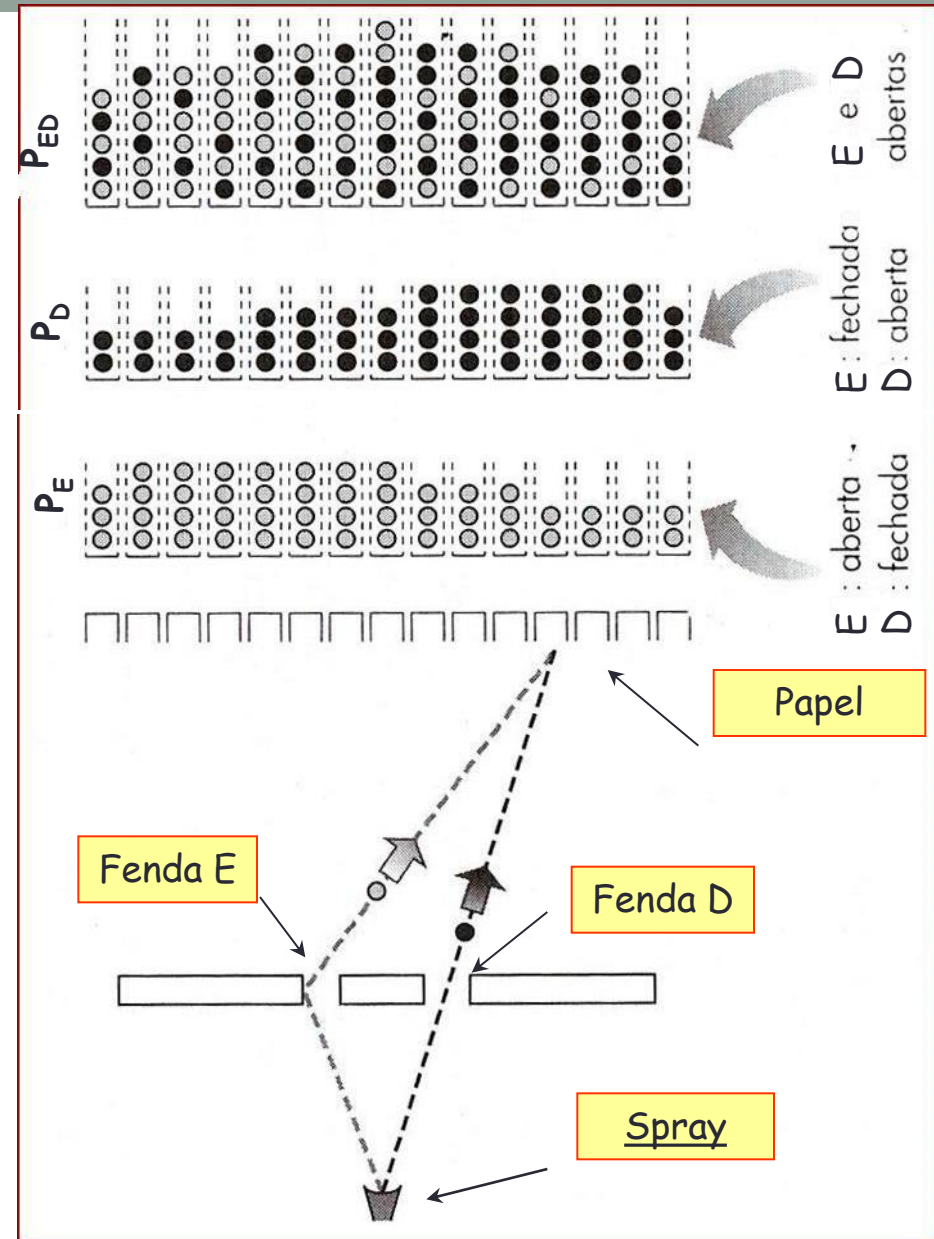
Interferência

- 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, ...) \Rightarrow fenômeno ondulatório.
- Mas...



Partículas (grandes)

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



Elétrons

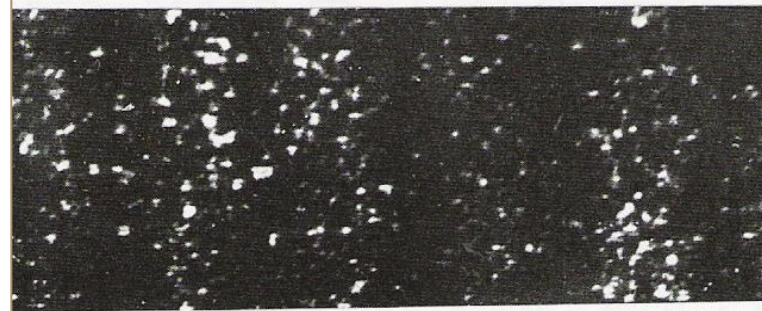
- Feixe de elétrons incidindo sobre um anteparo com duas fendas:

Interferência!

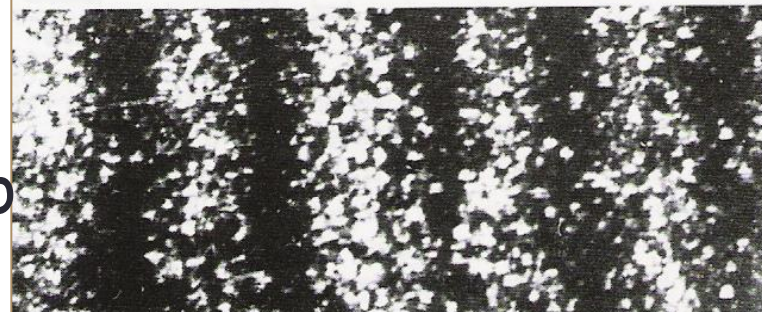
- Mas não deveria haver um comportamento como o das esferas?
- Elétrons: partículas ou ondas?



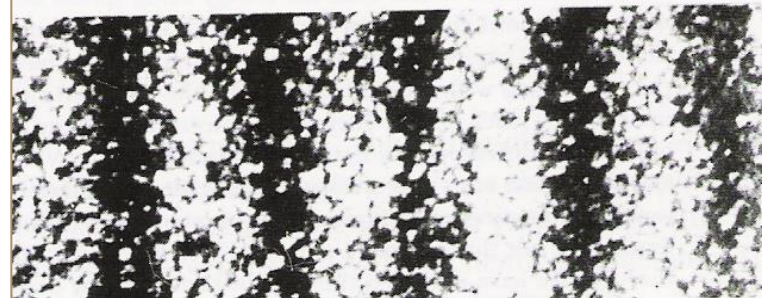
0,02 s



10 s



60 s



120 s

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.

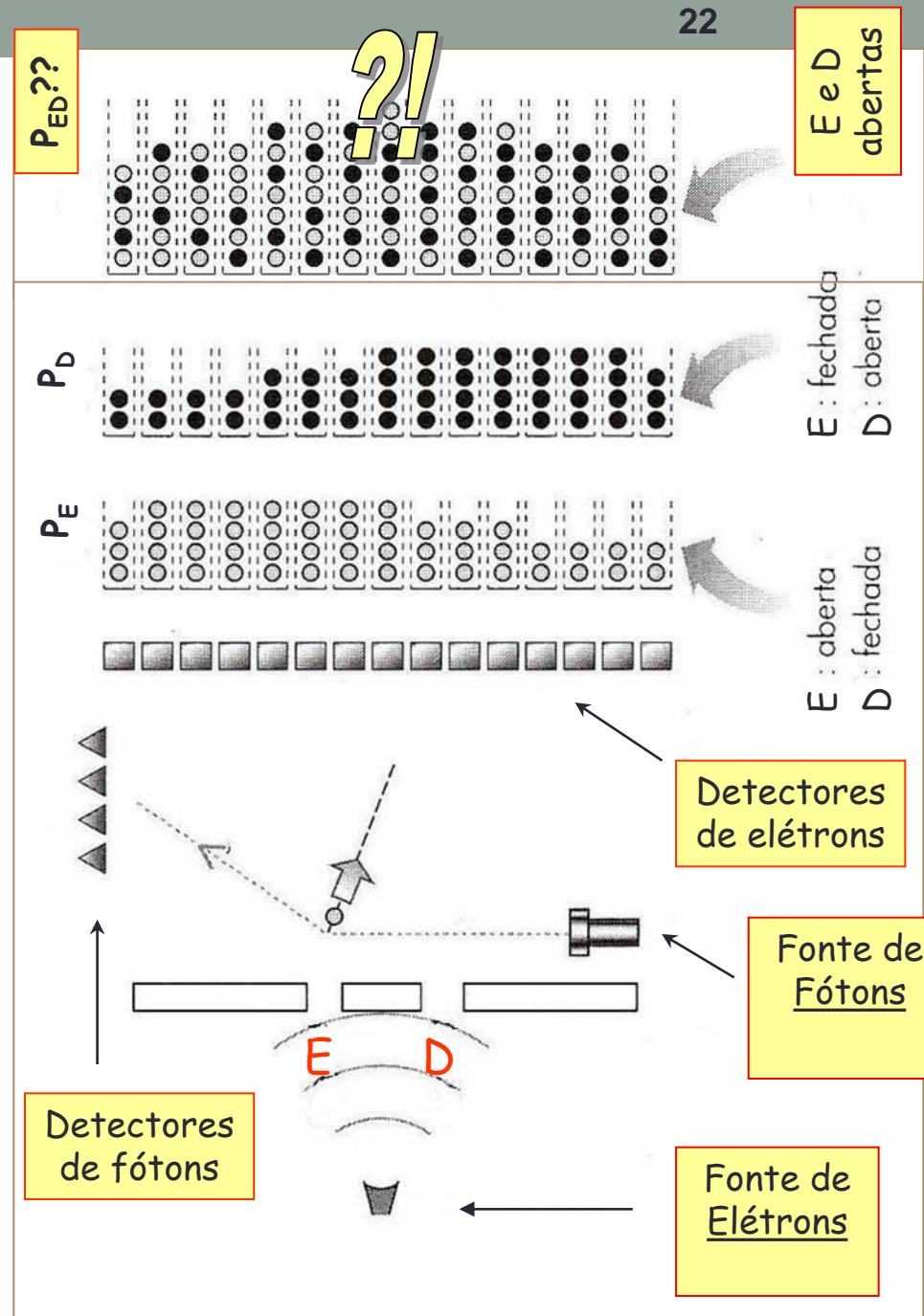
Falso! Basta fazer passar só 1 por vez

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

$$\text{Fóton: } -p \sin \theta \leq p_x \leq p \sin \theta \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta p_x = 2 p \sin \theta = \frac{2h}{\lambda} \sin \theta = \Delta p_e$$

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

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

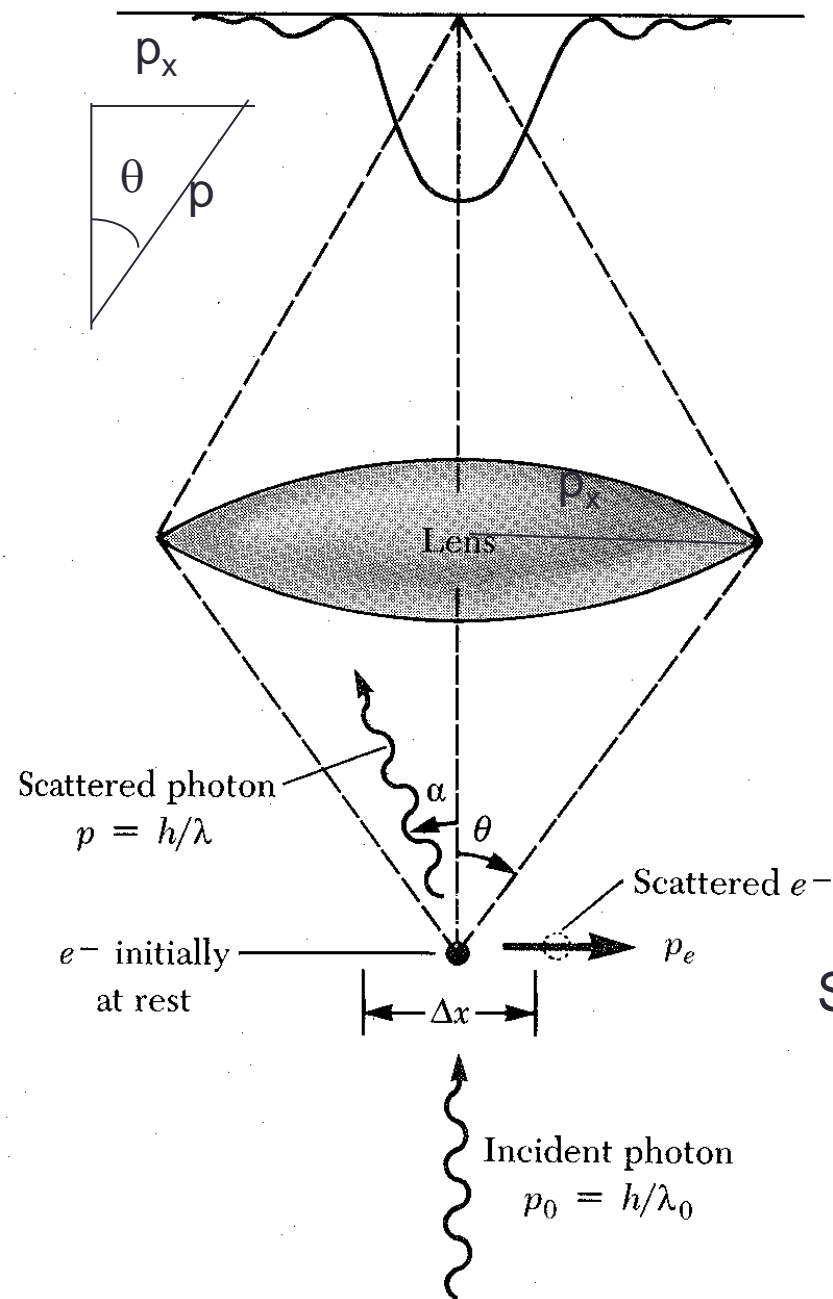
Portanto:

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

Se Δx diminui $\Rightarrow \Delta p_x$ aumenta. Por ex.:

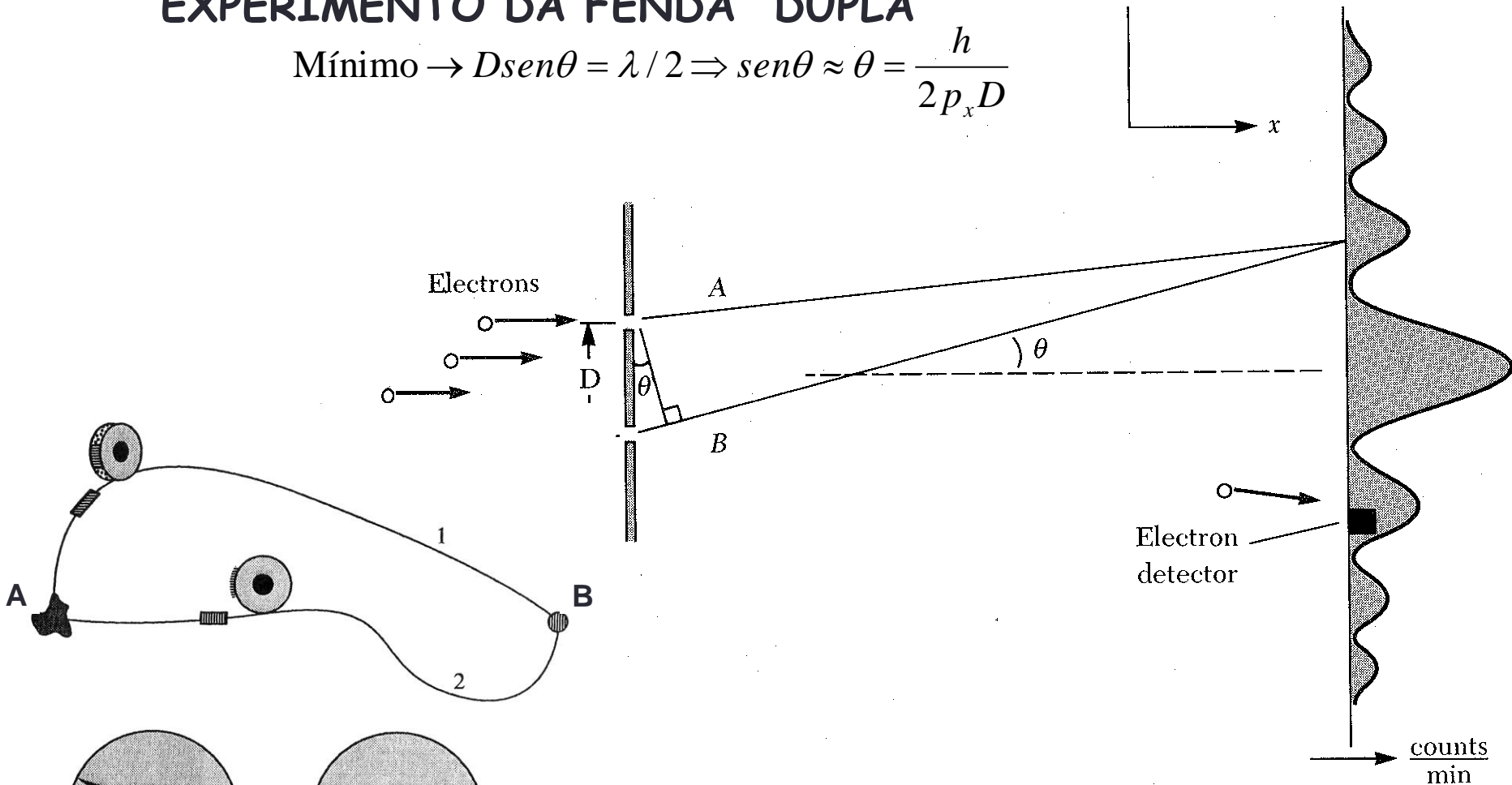
$$\lambda \downarrow \Rightarrow \Delta x \downarrow \Rightarrow \Delta p_x \uparrow$$

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

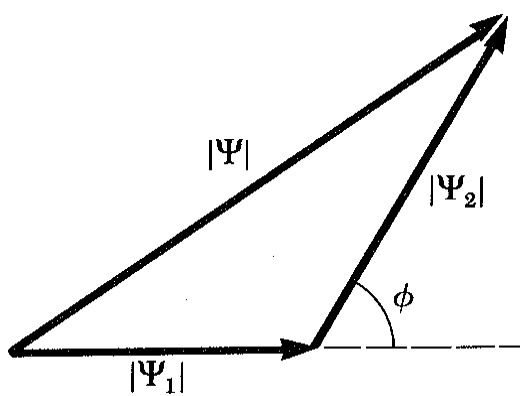


EXPERIMENTO DA FENDA DUPLA

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

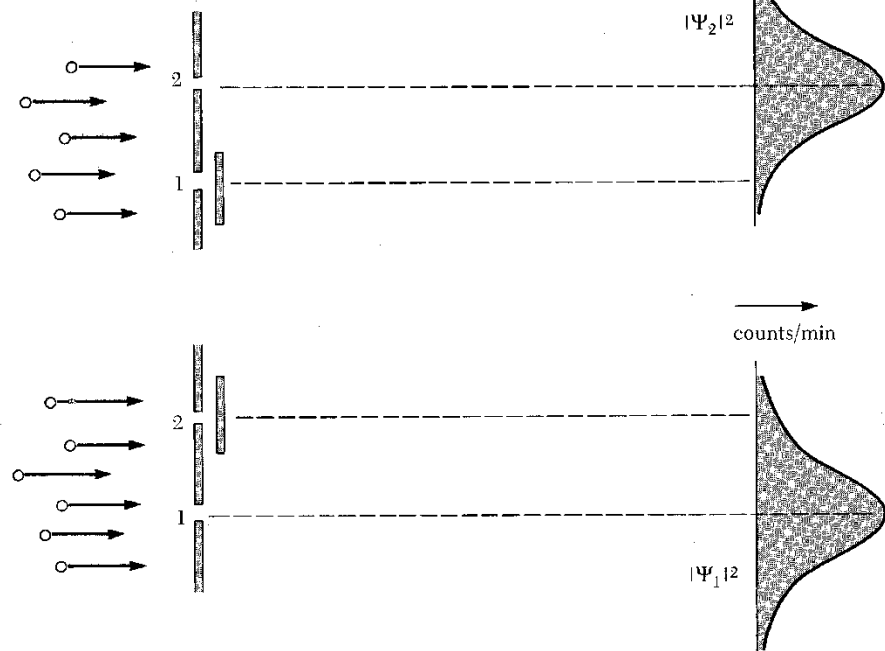
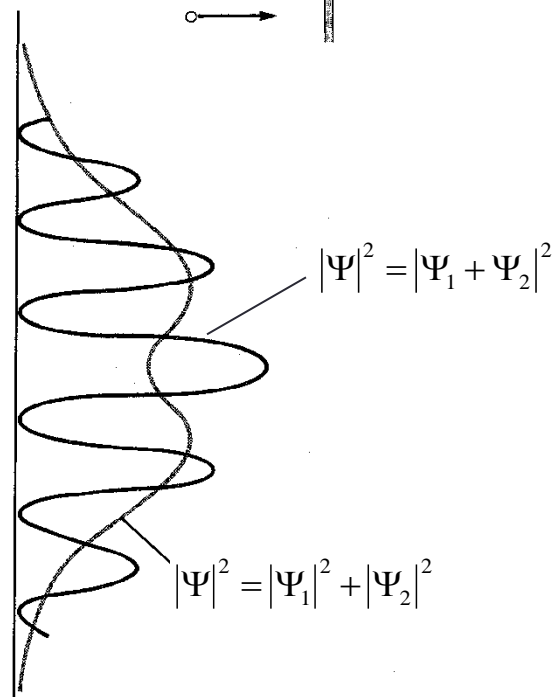
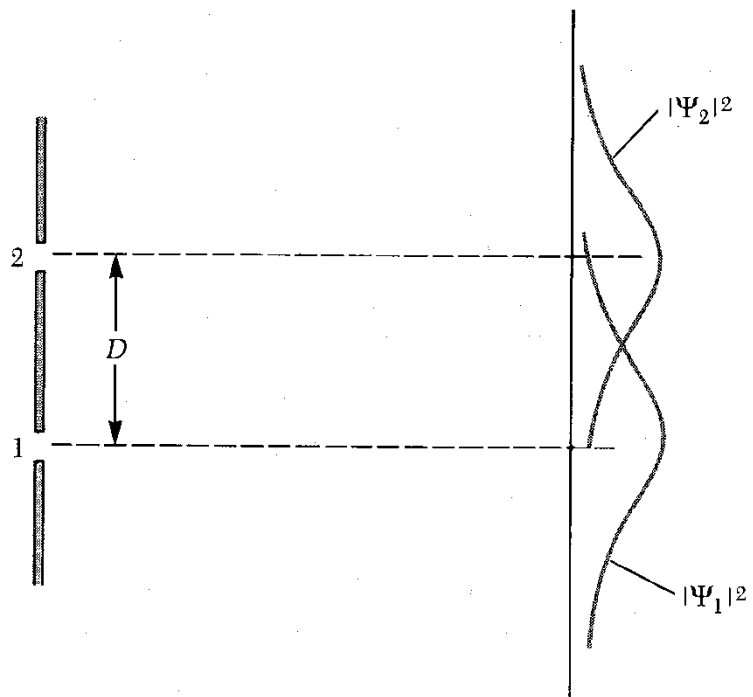


Característica fundamental: fase.
 Ondas iguais, caminhos diferentes \Rightarrow
 fases diferentes \Rightarrow interferência



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

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



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$