Física IV

2020

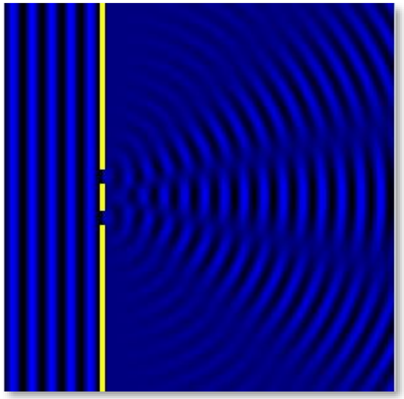
Professor: Valdir Guimarães

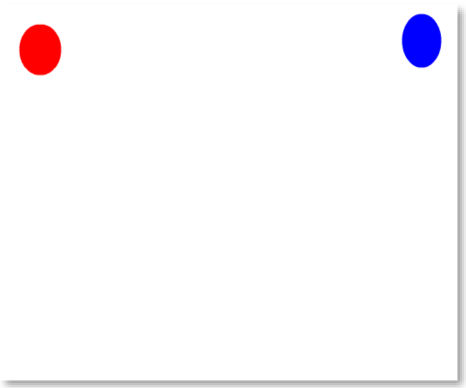
E-mail: valdir.guimaraes@usp.br

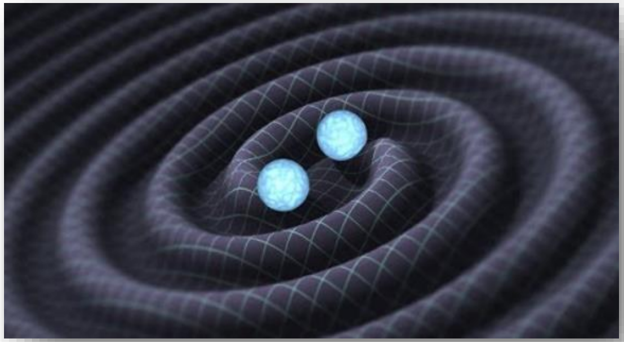
Aula-15: função de onda

Dualidade onda-partícula

A luz é uma onda ou uma partícula?



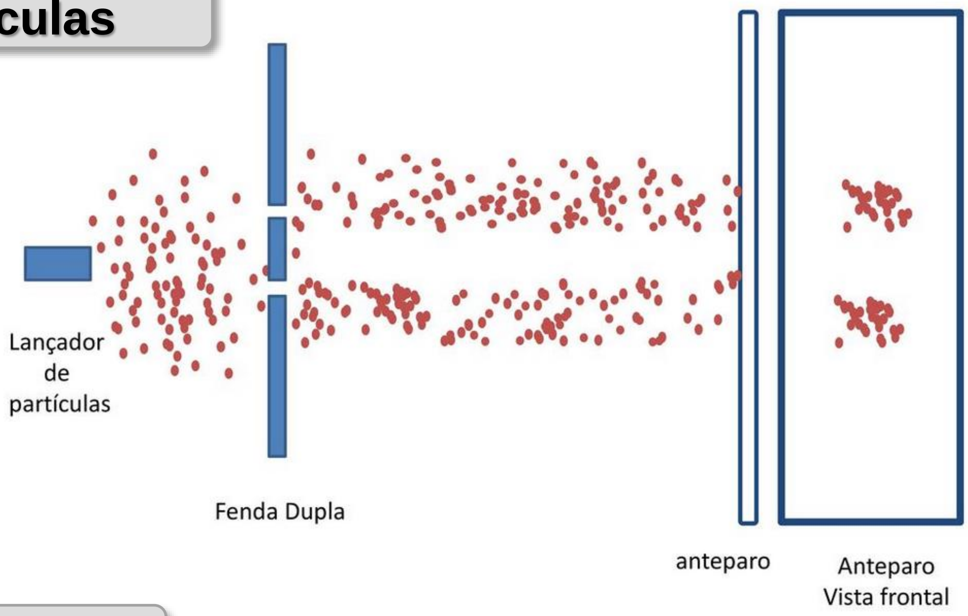




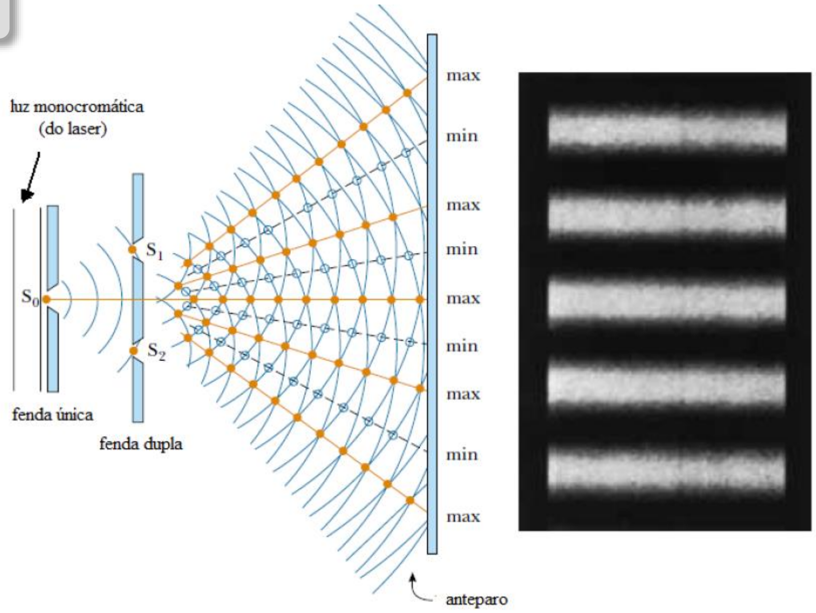
A luz se propaga como onda mas interage como partícula

Dualidade onda-partícula

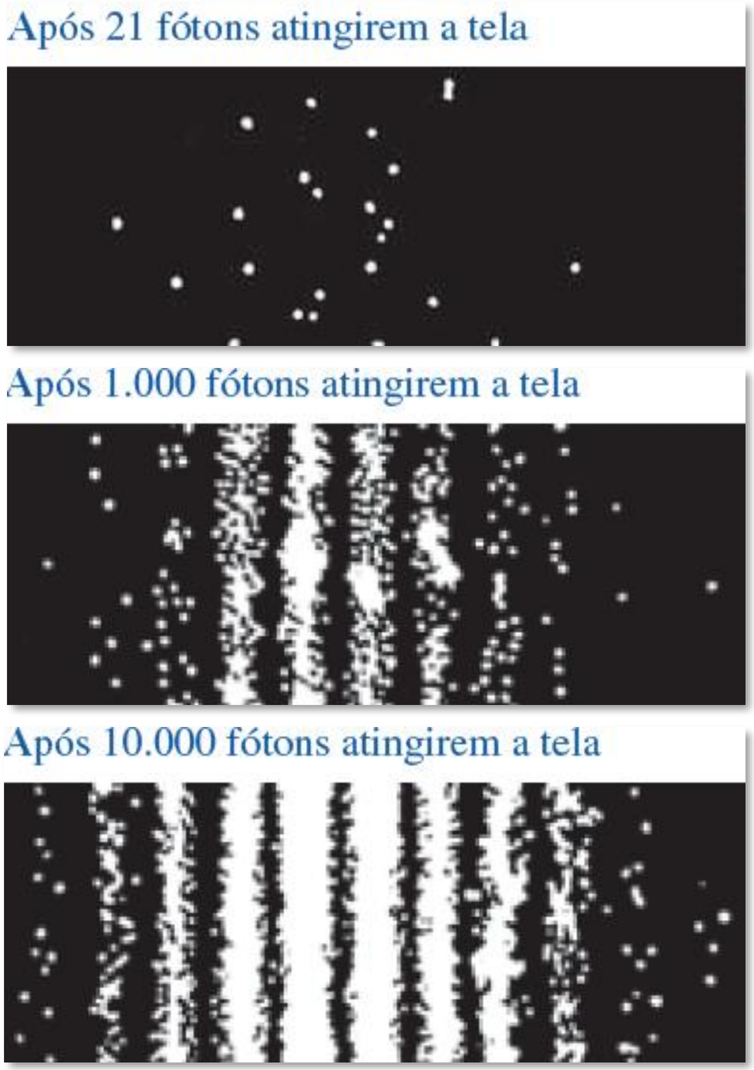
Partículas



ondas



Dualidade onda-partícula



Como podemos ver a interação com o detector o fóton se comporta como partícula mas na propagação se comporta como onda.

Princípio da complementaridade
Niels Bohr (1928).

- A descrição ondulatória é complementar à descrição corpuscular.
- Precisamos das duas descrições para completar nosso modelo da natureza, mas nunca precisaremos usar ambas as descrições simultaneamente.
- A interação com o detector o fóton se comporta como partícula mas na propagação se comporta como onda.

Niels Bohr
(1885-1962)

Nobel 1922

Consequência da natureza dual (onda e partícula) da luz:

- Embora os fótons possuam energia e momento linear, são muito diferentes do modelo corpuscular que usamos para partícula na mecânica newtoniana (partícula com massa).

- Podemos descrever a localização e o estado do movimento de uma partícula em qualquer instante usando três coordenadas espaciais e três componentes do momento linear e, assim, podemos prever o movimento da partícula no futuro.

- No entanto, fótons não tem massa. Então esse modelo não funciona para fótons:

- simplesmente não podemos tratar um fóton como um objeto pontual.

Onda de De Broglie

Louis De Broglie
(1892-1985)

Nobel 1929

- Louis De Broglie postulou em 1924, em sua tese de doutorado, que partículas também poderiam possuir um comprimento de onda.
- Seria uma onda de matéria.
- O físico francês relacionou o comprimento de onda (λ) com a quantidade de movimento (p) da partícula, mediante a fórmula:

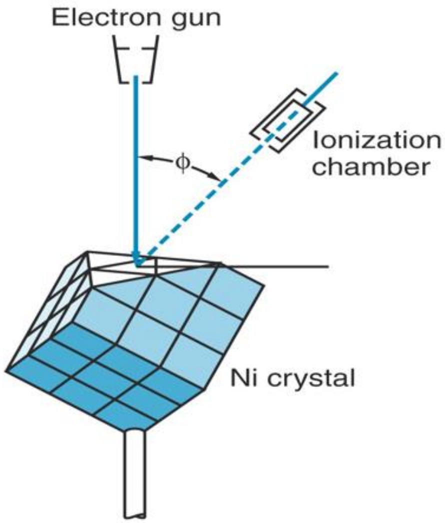
$$\lambda_{broglie} = \frac{h}{p}$$

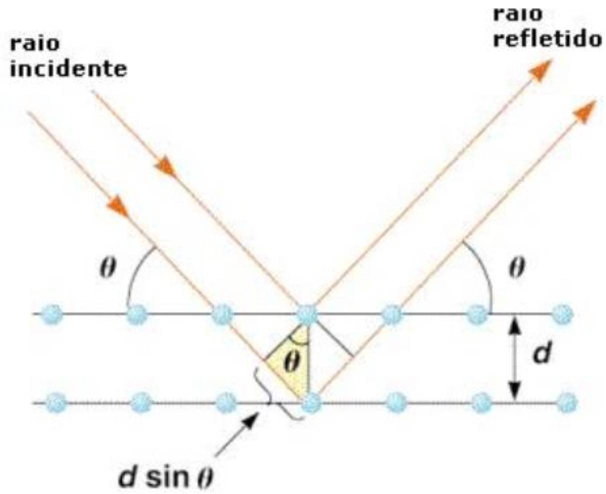
Comprimento de onda de De Broglie

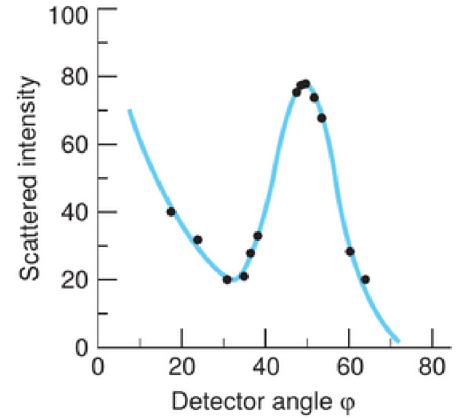
- De Broglie propôs que os elétrons sofreriam difração na fenda simples e interferência na fenda dupla como os fótons.
- Em 1927, o experimento de Davisson-Germer confirmou essa previsão de De Broglie, estabelecendo a dualidade onda-partícula da matéria.
- Em 1929, recebeu o Prêmio Nobel pela descoberta da natureza ondulatória do elétron

Experiência Davisson-Germer

- Difração de elétrons por cristal (1927).







Lei de Bragg => Ocorrerá interferência se a diferença de caminho for múltiplo do comprimento de onda.

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

Os máximos observados comprovavam que o comprimento de onda era o mesmo que o obtido pela equação de De Broglie **para os elétrons.**

$$V = 54\ \mathrm{V} \Rightarrow E = 54\ \mathrm{eV} = 8.64\times10^{-18}\mathrm{J}$$

$$E = \frac{p^2}{2m},\quad p = \sqrt{2mE},\quad \lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

$$\lambda_B = \frac{6.63\times10^{-34}\,\mathrm{J\text{-}sec}}{\sqrt{2\times9.1\times10^{-31}\mathrm{kg}\times8.6\times10^{-18}\mathrm{J}}} = 1.67\ \mathring{\mathrm{A}}$$

Difração elétrons – experiência G. P. Thompson

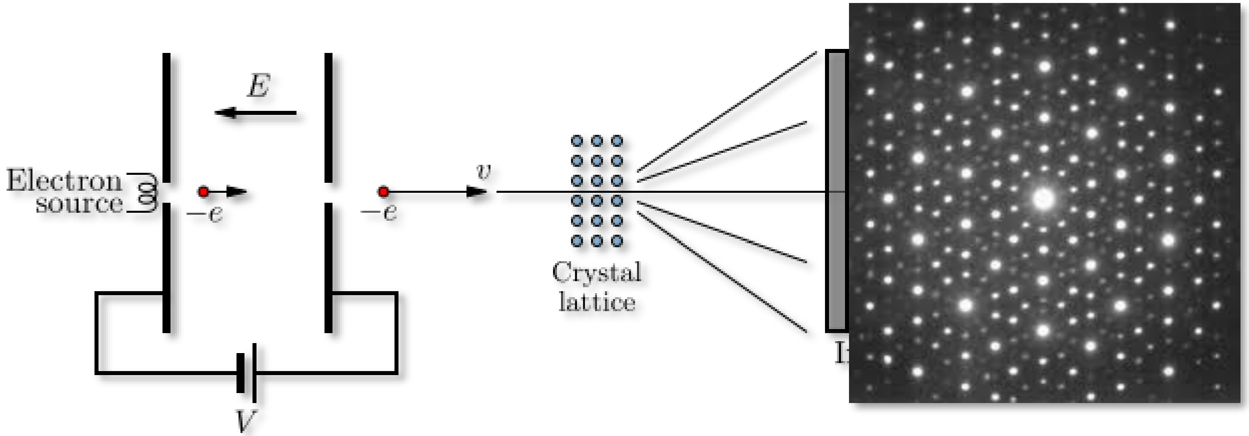
1927: Experimentos com metais: Difração em folhas finas de metais revelaram definitivamente a natureza ondulatória do elétron.

1937: Prêmio Nobel para Thomson e Davisson

G. P. Thompson
(1892-1975)

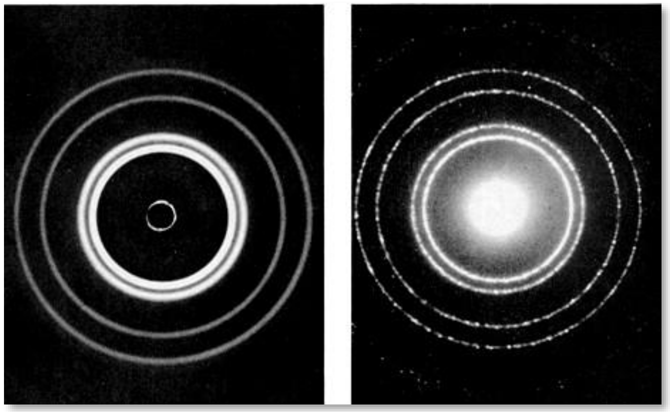
Nobel 1937

Com cristais:



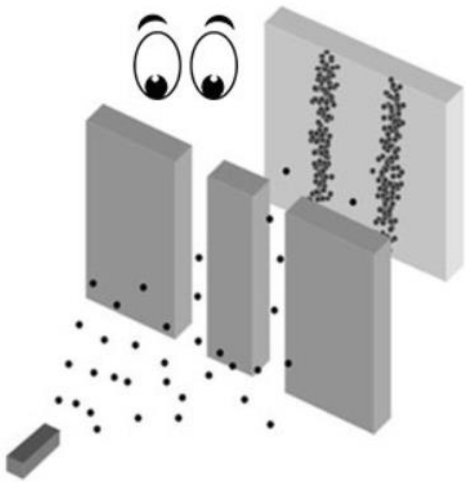
Com pó de alumínio:

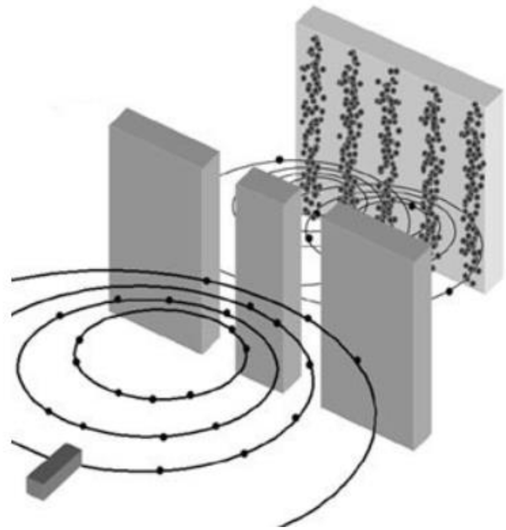
Raio-x eletrons

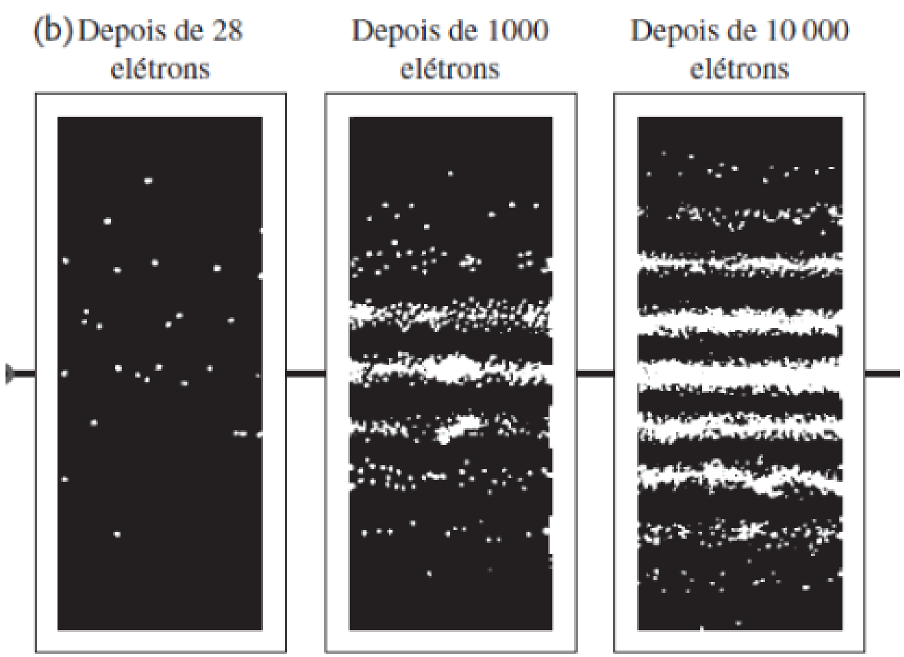


Experimento fenda dupla com eletrons

Figura:https://dcvcorp.com.br/?p=3363



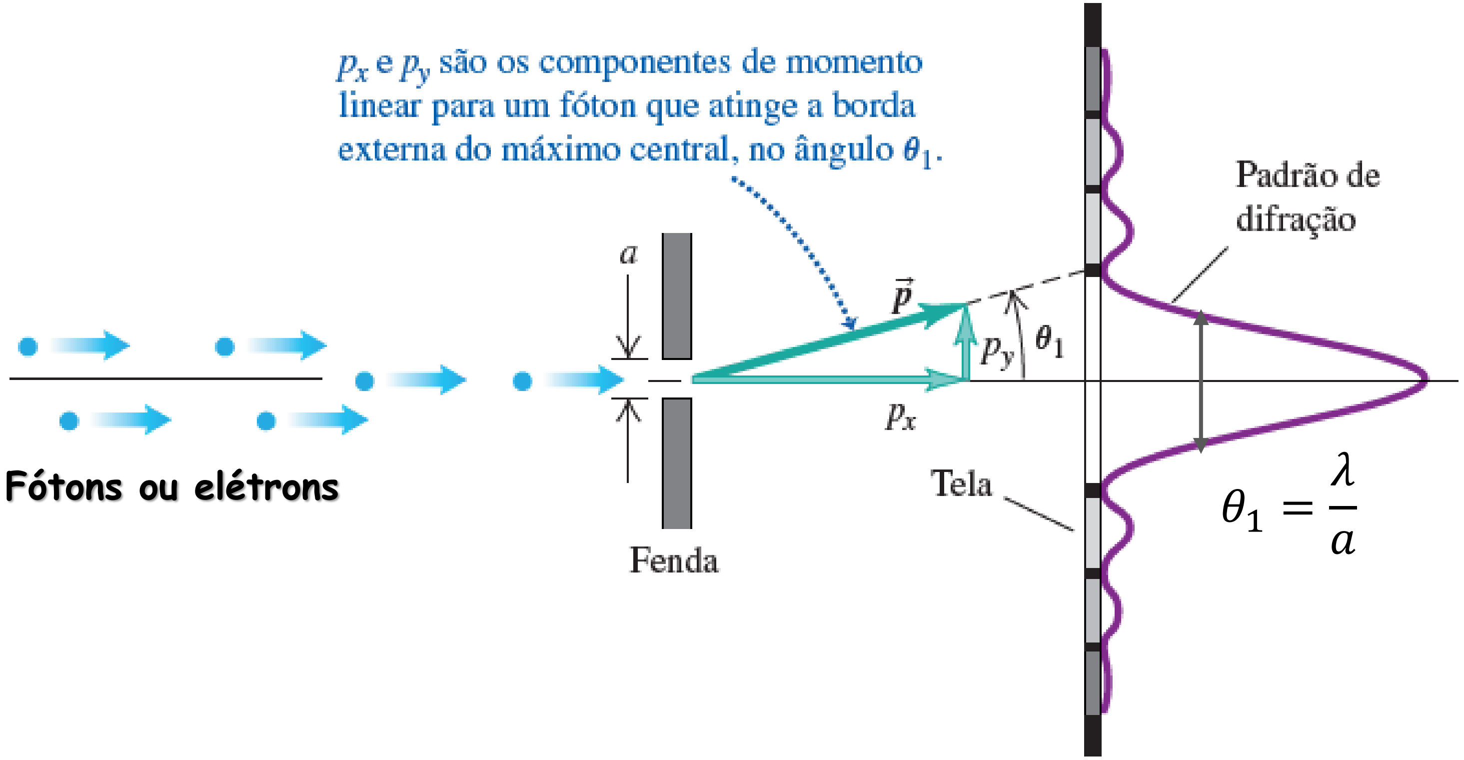




Elétrons também tem o comportamento dual onda-partícula

Difração fenda simples

Para estudar o problema de medirmos a posição e o momento linear de um fóton simultaneamente, vamos analisar novamente a difração da luz em uma fenda única.



Largura do primeiro máximo

$$sen\theta_m = \theta_m = m\frac{\lambda}{a} \qquad m = 1 \qquad \theta_1 = \frac{\lambda}{a}$$

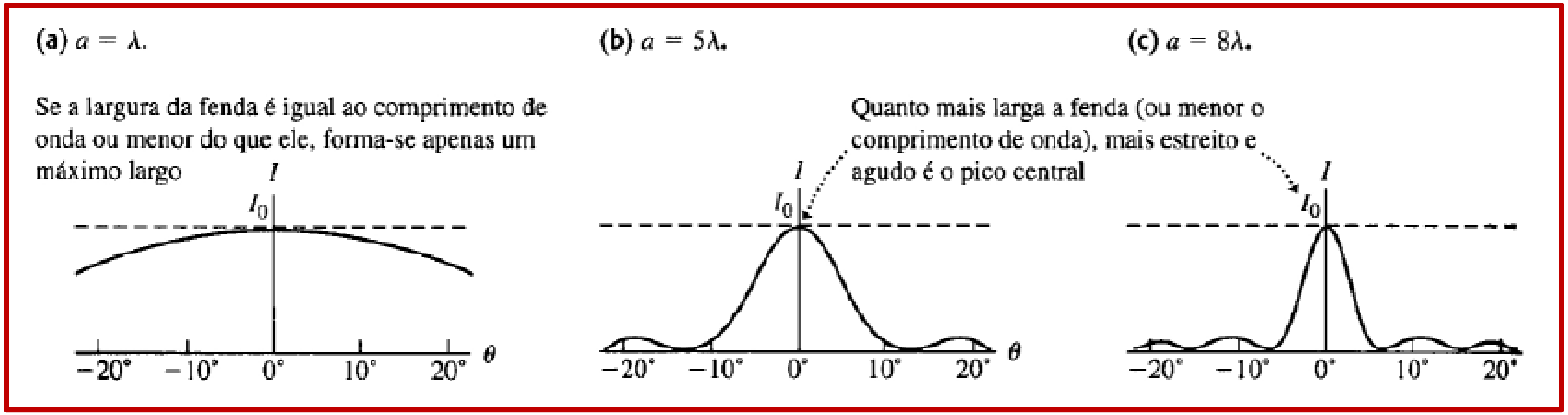
Difração de Fraunhofer – Largura da distribuição

$$sen\theta_m = \theta_m = m\frac{\lambda}{a} \qquad \theta_1 = \frac{\lambda}{a}$$

O valor de θ_1 determina a metade da largura do máximo central.

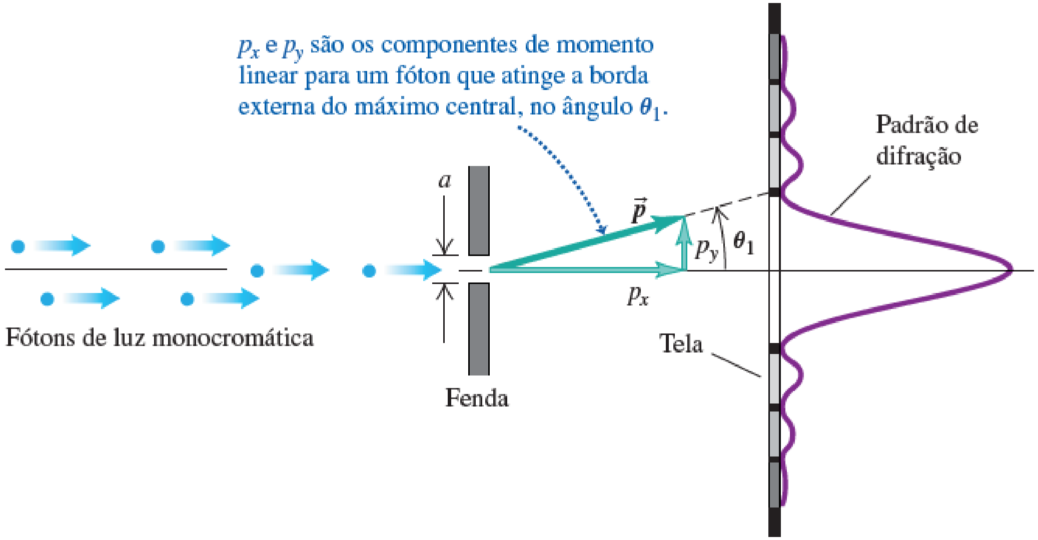
$$a \geq \lambda$$

- Efeitos da difração:
- Diminuição da abertura causa alargamento do máximo central.

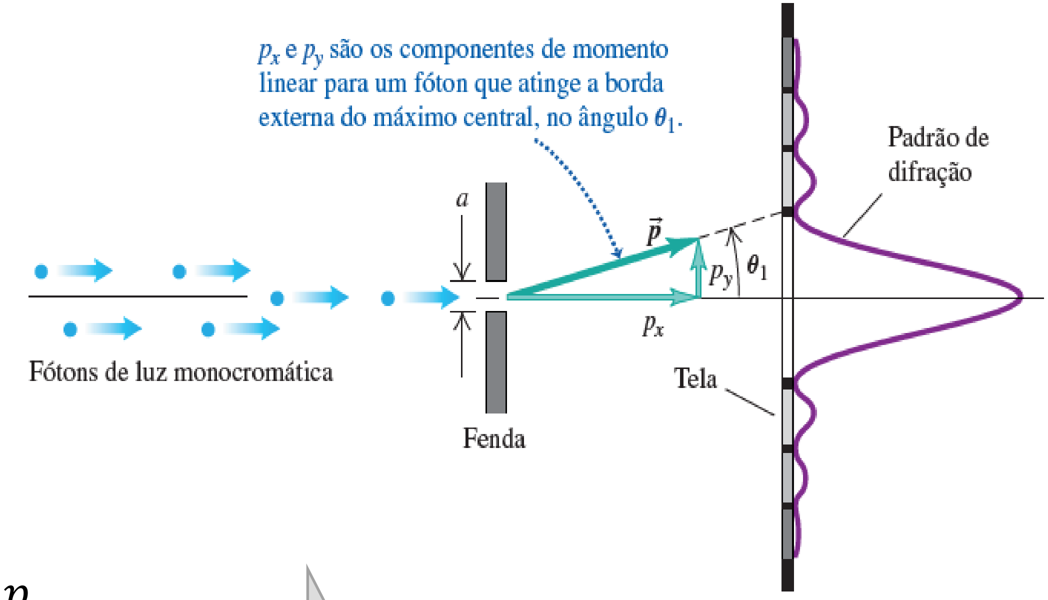


$$a >> \lambda$$

Nesse caso o ângulo θ_1 é muito pequeno (praticamente zero) e os raios de luz praticamente não se desviam.



- Mesmo os fótons tendo o mesmo estado inicial do movimento ao entrar na fenda, nem todos seguem o mesmo caminho.
- Não podemos prever a trajetória exata após passar a fenda.
- Só podemos descrever a probabilidade de que um fóton individual vai atingir um determinado ponto na tela.
- Essa indeterminação fundamental não tem correspondência na mecânica newtoniana.
- Além disso, as incertezas tanto na posição quanto no momento linear de uma fóton individual estão inseparavelmente relacionadas.



p_x Momento linear na direção x

p_y Momento linear na direção y

θ_1 angulo

$$\frac{p_y}{p_x} = \tan\theta_1 \quad\Rightarrow\quad p_y = p_x\theta_1$$

Considerando que: $\theta_1 = \dfrac{\lambda}{a} \quad\Rightarrow\quad p_y = p_x\dfrac{\lambda}{a}$

Isso indica que 85% dos fótons dentro do máximo central teriam momento p_y entre. $+p_x\dfrac{\lambda}{a}$ e $-p_x\dfrac{\lambda}{a}$

Valor médio $< p_y > = 0$ e incerteza $\Delta p_y \geq p_x\dfrac{\lambda}{a}$

Quanto menor for a largura a da fenda, mais larga será a figura de difração e maior a incerteza no valor da componente y do momento linear p_y

Principio de incerteza

Usando que $\lambda = \frac{h}{p_x}$ temos: $\Delta p_y \geq \frac{h}{a}$ e: $\Delta p_y a \geq h$

- A largura a da fenda representa uma incerteza na posição y de um fóton.
- Não podemos saber exatamente onde o fóton irá parar após passar através da fenda.
- Logo, a posição y e a componente p_y do momento linear possuem incertezas.
- Para diminuir a incerteza de p_y temos que reduzir a largura da figura de difração.
- Para aumentar a largura da figura de difração precisamos aumentar a largura a da fenda, o que aumenta a incerteza da posição y.
- Reciprocamente, quando diminuímos a incerteza da posição y reduzindo a largura da fenda, a figura de difração se alarga e a incerteza do momento linear aumenta.

- Isso é mais geral e considerando devios-padrões da posição e momento temos o principio de incerteza da mecânica quântica:

principio de incerteza

$$\boxed{\Delta \boldsymbol{y} \Delta \boldsymbol{p}_{\boldsymbol{y}} \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Principio de incerteza

principio de incerteza de Heisenberg

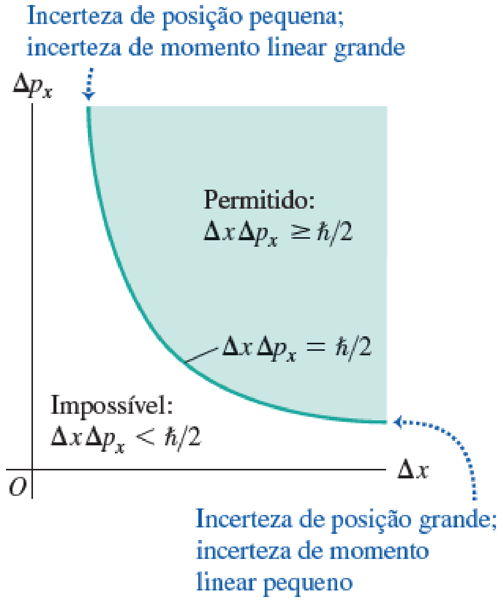
$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

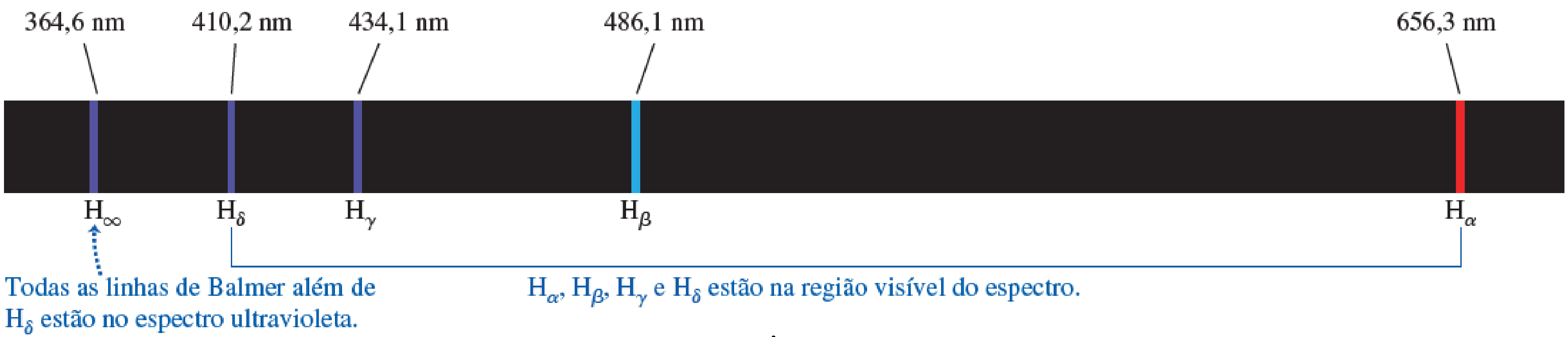
Efeitos da mecânica quântica:

- Limite na determinação simultânea da posição e o momento de partículas microscópicas.
- Não podemos determinar simultaneamente o momento e posição com grande precisão
- Indício do carácter probabilístico da mecânica quântica.

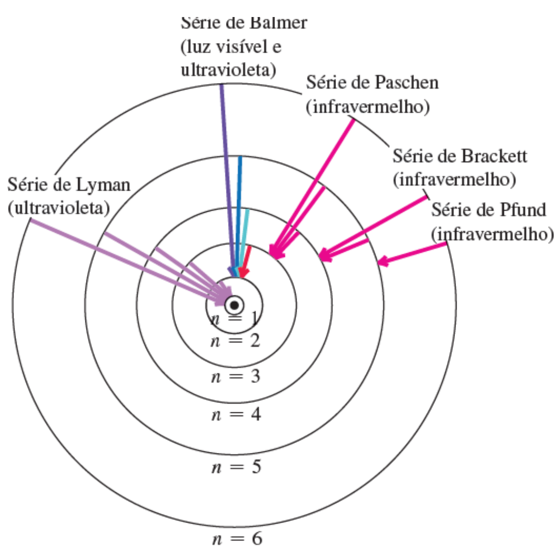
Werner Heisenberg
(1901-1976)

Nobel 1932

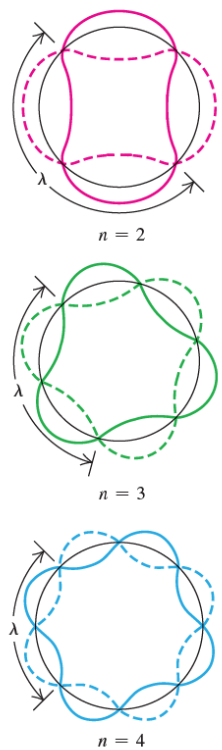




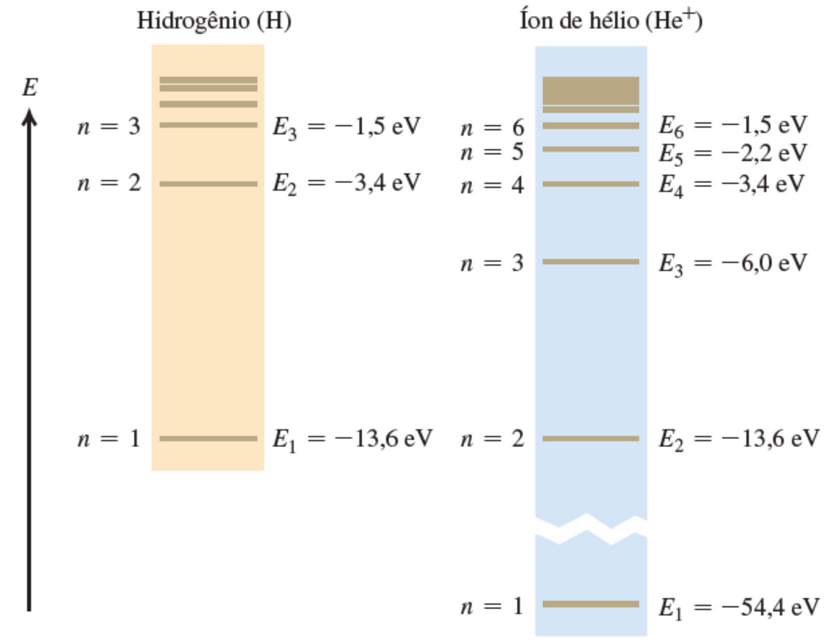
Eletrons em orbitais



Momento angular quantizado



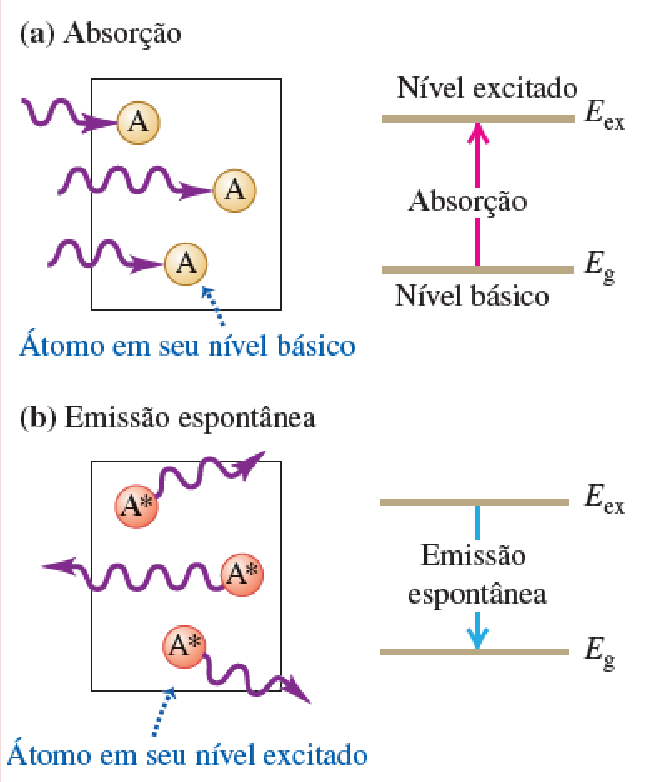
Níveis de energia atômicos



Quantização da energia

Linhas espectrais atômicas e níveis de energia: as energias dos átomos são quantizadas: elas só podem ter certos valores definidos, chamados níveis de energia. Quando um átomo faz uma transição de um nível de energia E_i para um nível inferior E_f, ele emite um fóton de energia $E_i - E_f$. O mesmo fóton pode ser absorvido por um átomo no nível de energia inferior, que excita o átomo para o nível superior. (Veja o Exemplo 39.5.)

$$hf = \frac{hc}{\lambda} = E_i - E_f$$



$$L_n = mv_n r_n = n\frac{h}{2\pi}$$
$$(n = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$r_n = \epsilon_0 \frac{n^2h^2}{\pi m e^2} = n^2 a_0 \quad (39$$

$$v_n = \frac{1}{\epsilon_0}\frac{e^2}{2nh}$$

$$E_n = -\frac{hcR}{n^2} = -\frac{13{,}60\text{ eV}}{n^2}$$
$$(n = 1, 2, 3, \ldots)$$

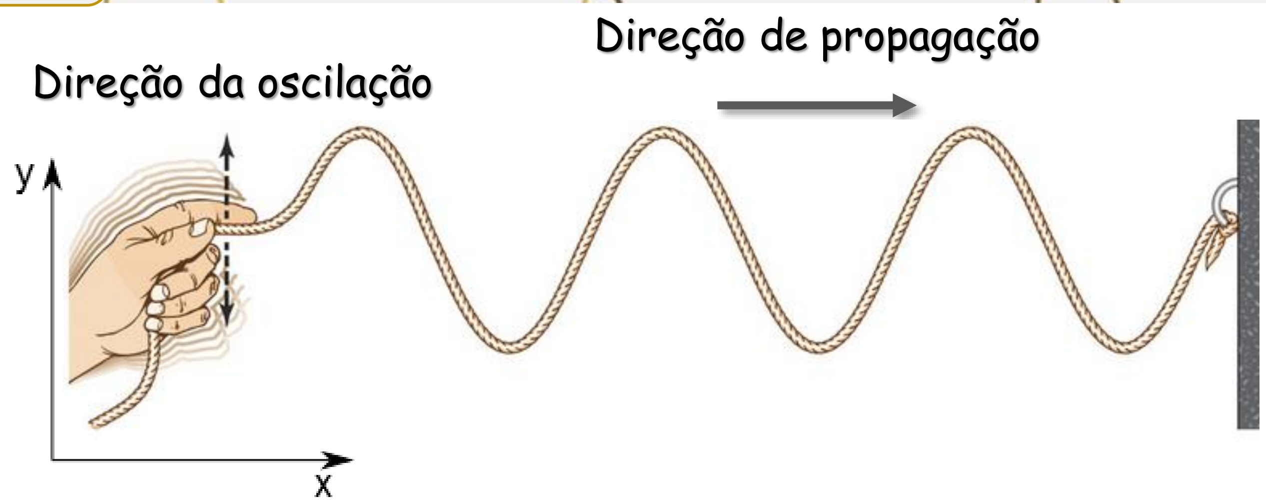
- Em escala atômica, um objeto como um elétron não pode ser descrito simplesmente como uma partícula newtoniana clássica.
- Em vez disso, devemos levar em conta suas características de onda.
- Principio de incerteza evidencia uma característica probabilística na descrição do movimento da partícula.
- Energia é quantizada.
- Comprimento de onda de De Broglie.

- Devemos construir uma nova estrutura de equações.
- Devemos postular uma função de onda que possa descrever o movimento dessa partícula.
- Tratamento probabilístico. A função de onda deve descrever probabilidades.
- $E = hf = \hbar\omega$
- $\lambda = p/h$

- Função de onda
- Equações de Schrodinger

- Mecânica Quântica

Onda transversal



Onda transversal deve satisfazer a equação de onda, com velocidade de propagação v

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2}$$

$$y(x,t) = A\cos(kx - \omega t) + B\,\mathrm{sen}(kx - \omega t)$$

(onda senoidal em uma corda)

$\omega = 2\pi f$ é a *frequência angular*.

$k = 2\pi/\lambda$ é o *número de onda*

Velocidade de propagação $v = \frac{\lambda}{T} = \lambda f$ ou $v = \frac{\omega}{k}$

Partículas como onda

Energia para uma partícula livre: $$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \qquad \text{(I)}$$

Considerando que a energia deve ser proporcional a frequência e momento dado pela equação de De Broglie

$$E = hf = \frac{h}{2\pi}2\pi f = \hbar\omega \qquad \text{(II)}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \qquad \text{(III)}$$

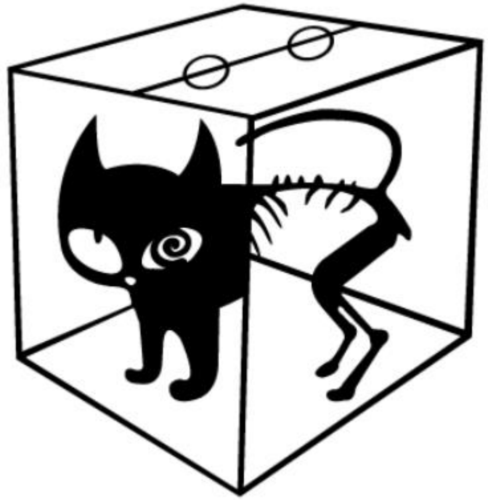
$$\boxed{\hbar = h/2\pi}$$

Combinando (I), (II) e (III) $$\frac{p^2}{2m} = \hbar\omega \;\Rightarrow\; \boxed{E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}}$$

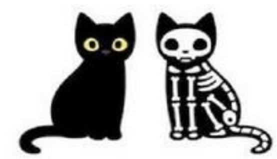
energia de uma partícula livre na mecânica quântica.

Gato de Schrodinger

- O carácter probabilístico da mecânica quântica é ilustrada pelo exemplo do Gato de Schrodinger.
- Um gato dentro de uma caixa tem 50% de chance de ser morto.
- Com a caixa fechada é impossível saber se o gato está vivo ou morto.



- Dizemos então que sem abrir a caixa existe duas possibilidades



- Essa situação pode ser representada por uma função de onda.
- A função de onda deve descrever as duas possíveis situações, 50% de chance do gato estar vivo e 50% de estar morto.
- Apenas abrindo a caixa, que corresponde a fazer uma observação, é que poderemos saber se o gato está vivo ou morto.

Função de onda

- Erwin Schrödinger desenvolveu em 1926 a equação que leva seu nome.
- Seria uma versão de F=ma para a mecânica quântica.
- A base é a função de onda que deve descrever propriedades de movimento da matéria.

Erwin Schrodinger
(1887-1961)

Nobel 1933

Função de onda: $\boxed{\psi = \psi(x, y, z, t)}$

Função de onda para uma partícula livre: $\Psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t) + B\,\mathrm{sen}(kx - \omega t)$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = k^2 \cdot \Psi(x,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi(x,t)$$

energia

Se derivarmos em relação ao tempo teremos algo relacionado com energia também.

Função de onda

Função de onda para uma partícula livre se movendo no eixo x com um momento "p" deve ser complexa:

$$\Psi(x,t) = A[\cos(kx - \omega t) + i\,\mathrm{sen}(kx - \omega t)]$$

Usando a formula de Euler:

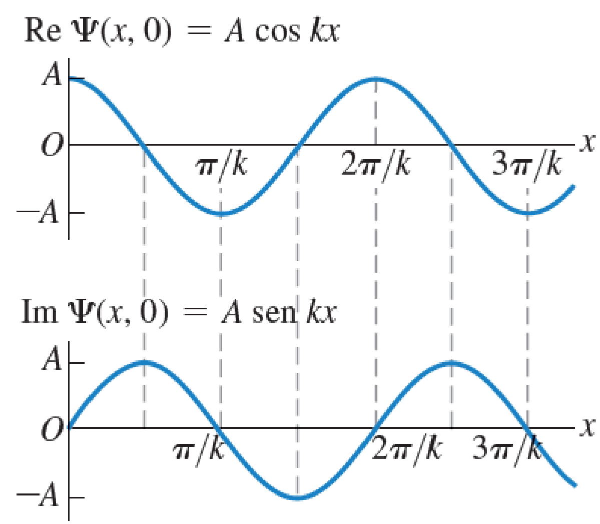
$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\,\mathrm{sen}\,\theta$$

$$e^{-i\theta} = \cos(-\theta) + i\,\mathrm{sen}(-\theta) = \cos\theta - i\,\mathrm{sen}\,\theta$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{ikx}e^{-i\omega t}$$

Equação de Schrodinger para uma partícula livre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$



Interpretação da função de onda

- A natureza complexa da função de onda para uma partícula livre torna essa função difícil de interpretar.
- A função de onda é complexa mas as grandezas observáveis são reais.
- **Interpretação de Max Born: A função de onda descreve a distribuição de uma partícula no espaço, exatamente como as funções de onda para uma onda eletromagnética descrevem a distribuição dos campos elétricos e magnéticos.**
- Quando estudamos padrões de interferência verificamos que a intensidade I da radiação em qualquer ponto em um padrão é proporcional ao quadrado da magnitude do campo elétrico, E^2.
- Função de onda ao quadrado deve estar relacionado com a probabilidade de encontrar a partícula.

Max Born
(1882-1970)

Nobel 1954

$|\Psi(x, t)|^2$ → Função de distribuição de probabilidades
ou
Densidade de probabilidade

Probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar do espaço em algum tempo.

$|\Psi(x, t)|^2$ → Função de distribuição de probabilidades

Função de onda

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{ikx}e^{-i\omega t}$$

Complexo conjugado

$$\Psi^*(x, t) = A^*e^{-i(kx-\omega t)} = A^*e^{-ikx}e^{i\omega t}$$

Densidade de probabilidade

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\,\Psi(x, t) = (A^*e^{-ikx}e^{i\omega t})\,(Ae^{ikx}e^{-i\omega t})$$

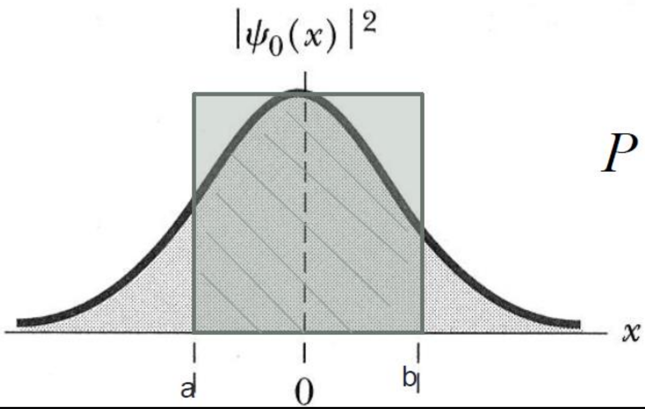
$$= A^*Ae^0 = |A|^2$$

Probabilidade de encontrar uma partícula entre x e dx

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

Probabilidade de encontrar uma partícula entre x_1 e x_2.

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*\,\Psi\,dx$$



$P =$ constante

Probabilidade deve ser normalizada.

A probabilidade de encontrar uma partícula em algum lugar entre x=-∞ e x=+∞ deve ser 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\,\Psi\,dx = 1$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) = (A^* e^{-ikx} e^{i\omega t})\,(A e^{ikx} e^{-i\omega t})$$
$$= A^* A e^0 = |A|^2$$

Sobre o que trata exatamente a mecânica quântica.

- A maioria dos físicos não considera que a mecânica quântica necessite de uma interpretação além da mínima encerrada na interpretação instrumentalista.
- No entanto, alguns são solidários à Interpretação de Copenhague desenvolvida por Niels Bohr e Werner Heisenberg quando trabalhavam juntos em Copenhague (1927).
- Interpretação de Conpenhague:
- As previsões probabilísticas feitas pela mecânica quântica são irredutíveis no sentido em que não são um mero reflexo da falta de conhecimento de hipotéticas variáveis escondidas. No lançamento de dados, usamos probabilidades para prever o resultado porque não possuímos informação suficiente apesar de acreditarmos que o processo é determinístico. As probabilidades são utilizadas para completar o nosso conhecimento. A interpretação de Copenhague defende que em Mecânica Quântica, os resultados são indeterminísticos.
- A Física é a ciência dos resultados de processos de medida. Não faz sentido especular para além daquilo que pode ser medido. A interpretação de Copenhague considera sem sentido perguntas como "onde estava a partícula antes de a sua posição ter sido medida?".
- O ato de observar provoca o colapso da função de onda, o que significa que, embora antes da medição o estado do sistema permitisse muitas possibilidades, apenas uma delas foi escolhida aleatoriamente pelo processo de medição, e a função de onda modifica-se instantaneamente para refletir essa escolha.

Interpretações da mecânica quântica.

https://pt.wikipedia.org/wiki/Interpretações_da_mecânica_quântica

- As diferentes interpretações da mecânica quântica são agrupadas em três escolas: a realista, a ortodoxa e a agnóstica. As posições de cada escola são determinadas através da resposta à seguinte pergunta: supondo que medimos uma partícula no ponto A, onde ela estava logo antes da medida?

- Segundo a escola realista, ela estava no ponto A. Isso implica que a mecânica quântica é uma teoria incompleta e que há, portanto, outras variáveis (variáveis ocultas) que são necessárias para descrever o comportamento da particula. Einstein defendia essa ideia. (deve ser determinística)
- Segundo a escola ortodoxa, foi o ato da medida que colapsou a função de onda obrigando a partícula a obter uma posição definida. Essa interpretação, conhecida como interpretação de Copenhague, foi defendida por Bohr. (intrinsicamente indeterminística).
- Segundo a escola agnóstica, não se pode afirmar algo que não se pode medir. Portanto, precisaríamos medir a posição da particula para saber onde ela está, de modo que não se sabe onde a partícula estava antes de medí-la e o questionamento proposto perde o sentido. Conforme as palavras de Pauli: “'Não devemos nos torturar tentando resolver um problema sobre algo que não sabemos se existe ou não, assim como é inútil tentar resolver o antigo problema de quantos anjos cabem sentados na ponta de uma agulha"