

* Introduzimos o conceito de quantização

* Modelo de Bohr tem serias limitações

- não explica os espectros de átomos complexos
- não prevê as variações de intensidade nas linhas espectrais
- divisão de certas raías espectrais observadas em condições especiais em laboratório (campo magnético)

fóton $\Rightarrow E = hf$ (onda e partícula)
 \hookrightarrow Compton
 Fotoelétrico

Bohr $\Rightarrow \Delta E_{elétrons} = n h f$
 $E_n = \text{energia quantiz}$

* Avanis : Mecânica Quântica \rightarrow Schrödinger, Heisenberg e outros (nova teoria) (1925 a 1926)

Primeira ideia : dualidade onda-partícula (de Broglie)

não só o fóton, mas também o e^-
 . comprimento de onda
 . momento linear

Discutiremos e apresentaremos : - formalismo da Mecânica Quântica
 - partícula numa caixa (fio quântico \Rightarrow dispositivos)
 - túnelamento (STM) \Rightarrow imagem de átomos

* Fótons e Ondas Eletromagnéticas

- Efeitos fotoelétrico e Efeito Compton \Rightarrow fóton (partícula)
 $(E = hf)$ e $(p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda})$
- Interferência e Difração \Rightarrow fóton (onda)
 Compton \Rightarrow cristal analisador
 Lei de Bragg $\Rightarrow \lambda' = 2d \sin \theta$

Os dois modelos são complementares \Rightarrow a verdadeira

natureza da luz não pode ser descrita mediante um único modelo clássico.

- Perguntas intrigantes: - Qual é o significado de "frequência" e "comprimento de onda" de uma partícula? (2)

- $m_{\text{fóton}} = 0 \Rightarrow$ massa do fóton em movimento? Eles sofrem atração gravitacional?

- Qual é a extensão espacial do fóton? (tamanho de partícula)

- Como o e^- absorve / espalha fóton?

* A resposta a essas perguntas é simples:

"A natureza corpuscular ou ondulatória da luz se manifesta predominantemente em certas circunstâncias experimentais, nas quais uma ou outra característica é mais acentuada."

Exemplo: 1) Onda de rádio $\Rightarrow f = 2,5 \text{ MHz} = 2,5 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$
 $E_{\text{fóton}} = hf = 6,626 \times 10^{-34} \times 2,5 \times 10^6 \approx 10^{-27} \text{ J} \approx 10^{-8} \text{ eV}$

Seria necessário 10^{10} desses fótons para que o receptor de rádio gere um sinal perceptível. Esse número imenso de fótons parece uma onda contínua.

Impossível perceber nessa experiência a característica corpuscular desse fóton

2) Raios X $\Rightarrow E = 10 \text{ keV} \approx 10^4 \text{ eV} \Rightarrow \lambda \approx 10^{-10} \text{ m} \approx \text{Å}$
frequência elevada / comprimento de onda mais curto / difusão com os átomos (característica ondulatória)

Absorção de 1 fóton pode ser vista (espectroscopias - EXAFS)

baixa frequência / baixa energia } + fácil observar fenômenos ondulatórios

alta frequência / alta energia } + fácil observar fenômenos de partículas.

Extremo: raio γ \Rightarrow λ muito pequeno \Rightarrow difração e interferência \Rightarrow só por métodos indiretos.

(3)

* Conclusões: A luz tem dupla natureza (mas será que só a luz?)

* Mundo clássico \Rightarrow onde e onda / partícula e partícula

* Mundo quântico \Rightarrow partículas como os elétrons também evidenciam características ondulatórias

* Ideia revolucionária de de Broglie:

Todas as formas de materia talvez tenham características ondulatórias e corpusculares. \Rightarrow confirmação ocorreu somente em 1927

acidental (cristais) \leftarrow (difração de elétrons) com a experiência de Davisson e Germer

* Partículas materiais com momento p devem também ter propriedades ondulatórias e um comprimento de onda determinado:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} \quad \left| \quad p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow mv = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} \right.$$

$E = pc$

comprimento de onda de de Broglie \leftarrow

E as frequências das "ondas" de matéria:

$$\left| f = \frac{E}{h} \right|$$

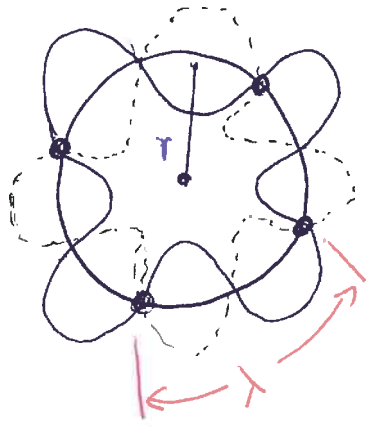
* Conceito corpuscular:

$$\begin{array}{c}
 mv \\
 \downarrow \\
 \lambda
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{c}
 E \\
 \downarrow \\
 f
 \end{array}$$

* Conceito ondulatório:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{mv}} \qquad \boxed{f = \frac{E}{h}}$$

* Visualizar a quantização do Momento Angular no átomo de Bohr
"e- como onda"



n = 4

nλ = 2πr (órbitas)

ondas de matéria dos e- são ondas estacionárias (λ, v, E)

$$n \left(\frac{h}{mv} \right) = 2\pi r \Rightarrow \frac{nh}{2\pi} = mvr$$

$$\underline{nh = mvr}$$

$$\boxed{L = nh}$$

Exemplo 1: Comprimentos de onda de 1 elétron

λ de Broglie de um elétron?

m = 9,11 x 10⁻³¹ kg

v = 10⁷ m/s

$$\lambda_B = \frac{h}{mv} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{9,11 \times 10^{-31} \times 10^7} = 7,28 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$\lambda_B = 0,728 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,728 \text{ \AA} \quad (\text{átomos})$$

λ₁₀ = 0,71 Å ⇒ difração raios X.

Próton?

$$m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\lambda_B \text{ próton} = 3,97 \times 10^{-14} \text{ m} = 3,97 \times 10^{-4} \text{ \AA}$$

Exemplo 2 : Comprimento de onda de uma pedra (5)

$$m = 50 \text{ g}$$

$$v = 40 \text{ m/s (arremessada)}$$

$$\lambda_{\text{pedra}} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{50 \times 10^{-3} \times 40} = 3,32 \times 10^{-34} \text{ m}$$

tamanho muito menor
que qualquer abertura por onde a
pedra pode passar \Rightarrow nelas se
observa efeitos de difração \Rightarrow

Propriedades ondulatórias de corpos
macroscópicos nelas podem ser
observadas

Exemplo 3 : Uma carga acelerada \Rightarrow altera o comprimento de
onda de de Broglie

$$\left. \begin{array}{l} q \\ m \\ v \end{array} \right\} \frac{1}{2} m v^2 = q V \Rightarrow \frac{(m v)^2}{2m} = q V \Rightarrow \frac{p^2}{2m} = q V \Rightarrow p = \sqrt{2mqV}$$
$$p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mqV}}$$

Partícula e^- :

$$\left. \begin{array}{l} m = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ q = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C} \\ V = 50 \text{ V} \end{array} \right\} \lambda = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 9,11 \times 10^{-31} \times 1,6 \times 10^{-19} \times 50}}$$
$$\lambda = 1,74 \times 10^{-10} \text{ m}$$
$$\lambda = 1,74 \text{ \AA} = 0,174 \text{ nm}$$

da ordem de dimensões atômicas \leftarrow
e da distância interatômica num sólido \Rightarrow difração de e^-


* Fenômeno que pode ser observado em um
microscópio eletrônico de transmissão (TEM)

EXPERIÊNCIA DE DIFRAÇÃO DE E⁻ NUMA FENDA DUPLA

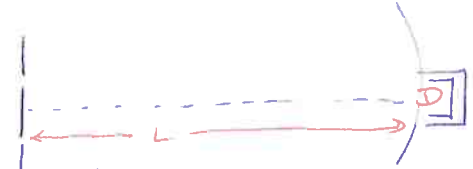
e⁻ } ondas → difração
partícula

Figura 1
(superior)

Supor:

①  $d \ll D \Rightarrow$ efeito de difração em 1 única fenda
ser desprezíveis.

② Detector de e⁻ $\Rightarrow L \gg D$



Coleta-se por um tempo longo \Rightarrow obtém-se uma
figura de interferência idêntica ao que foi obtido
com luz monocromática na experiência de Young.

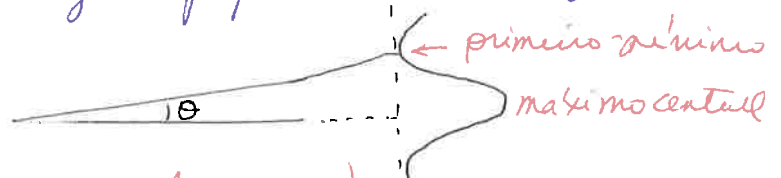
Figura 1
(inferior)

Resultado NÃO explicado por um comportamento clássico dos e⁻.

energia + baixa \Rightarrow continua sendo
mais tempo \Rightarrow mais múltipla

Explicação:

Os elétrons produzem pequenas ondas em fase nas
fendas.



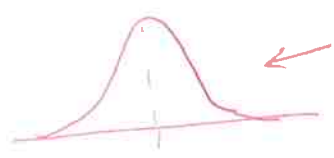
mínimo \Rightarrow diferença de percurso $\frac{\lambda}{2}$

$$D \sin \theta = \frac{\lambda}{2} \Rightarrow \left(\frac{h}{p_x} \right) \cdot \frac{1}{2} = D \sin \theta \approx D \theta$$

$$\theta \approx \frac{h}{2p_x D}$$

* Dupla natureza dos elétrons e⁻
proibida nesta experiência \Rightarrow Os e⁻ são percebidos
como partículas no detector e a probabilidade do
e⁻ atingir esse ponto está determinada pela intensidade
das ondas que interagem.

1) O que acontece se uma das fendas for coberta?



curva simétrica com um pico no centro da fenda aberta.

Figura 2 (superior esquerdo)

Impulsos/min (probabilidade de chegada dos e⁻) → mostrada na parte central.

* Essas curvas são expressas pelo quadrado do valor absoluto de uma certa função de onda

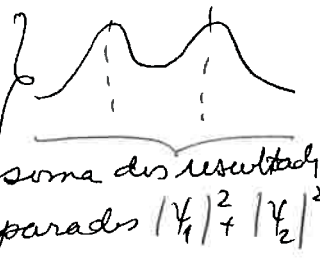
$$|\psi_1|^2 = \psi_1 \psi_1^*$$
$$|\psi_2|^2 = \psi_2 \psi_2^*$$

} é a probabilidade por unidade de volume da partícula ser encontrada num certo ponto num certo instante.

ψ_1 e ψ_2 representam as funções dos e⁻ passando através da fenda 1 e de fenda 2.

Experiência 1

metade do tempo fenda 1 aberta
metade do tempo fenda 2 aberta



Soma da figura de interferência.

Experiência 2

As duas fendas estão abertas ao mesmo tempo. (tempo total)

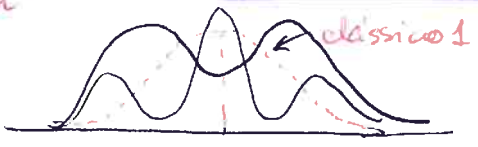
Figura de interferência ⇒ estado superposto

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

Probabilidade de se perceber o e⁻ na tela: $|\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2|\cos\phi$

↑
2 aberturas

termo de interferência ⇒ fasores



$\phi = 0$ (constitutiva)

$\phi = 180^\circ$ (destrutiva)

Figura 2 (superior esquerdo e direito) num

inferior

* Conclusões: e- interage simultaneamente

(8)

com as duas fendas.

O e- passa simultaneamente através das duas fendas.

Se tentarmos determinar por qual fenda passa \Rightarrow

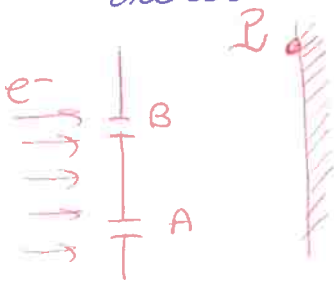
destruiremos a figura de interferência.

Exemplo: Detector de e- posicionado no ponto P de figura de forma que a parte de junção de onde free vem de A e $\psi_A = 2$ unidades e $\psi_B = 6$ unidades.

Quando somente A está aberta ser detectados 100 e/s.

- Quantos e- ser detectados quando só B está aberta?
- Supondo interferência construtiva em P, quantos e- ser detectados supondo A e B abertas?
- Supondo interferência destrutiva em P, quantos e- ser detectados supondo A e B abertas?

a) Razão entre as intensidades das ondas (probabilidade) $\frac{|\psi_B|^2}{|\psi_A|^2} = \frac{36}{4} = 9 \Rightarrow A$ intensidade relacionada com a fenda B 9x maior que a de A \Rightarrow 900 e-/s atingem P se só B é aberta.



b) Amplitude total de junção de onda: $\psi = \psi_A + \psi_B = 8 \Rightarrow |\psi|^2 = 64 \therefore \frac{|\psi|^2}{|\psi_A|^2} = \frac{64}{4} = 16$

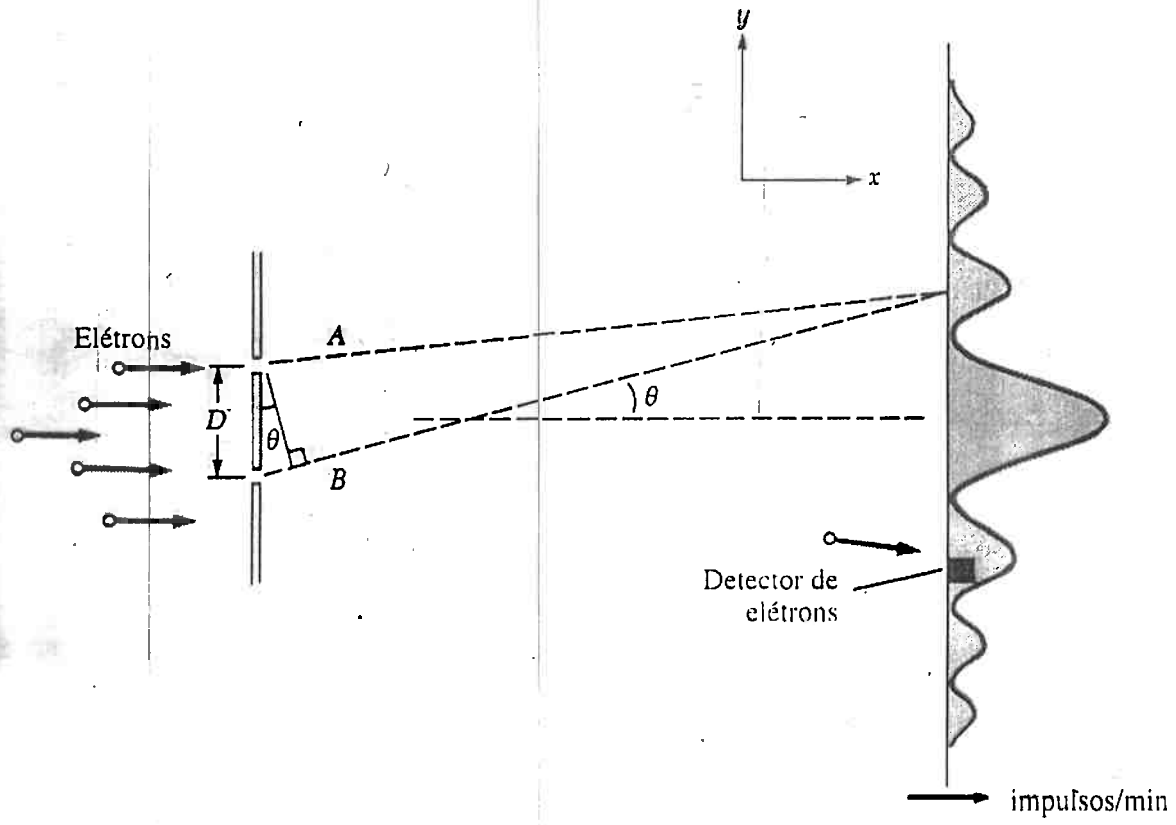
$|\psi|^2 = 16 |\psi_A|^2 \Rightarrow$ Interferência construtiva \Rightarrow 1600 e-/s

c) Interferência destrutiva: $\psi = \psi_A - \psi_B$ (ou vice-versa)
 $\psi = 2 - 6 = -4 \Rightarrow |\psi|^2 = 16$

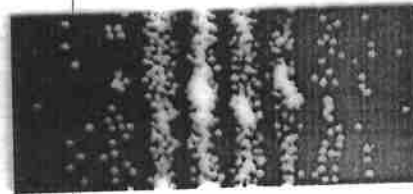
$\frac{|\psi|^2}{|\psi_A|^2} = \frac{16}{4} = 4 \Rightarrow |\psi|^2 = 4 |\psi_A|^2 \Rightarrow$ 400 e-/s

1) Por esta fórmula as ondas ψ associadas às partículas nas provocam oscilay de espécie alguma.

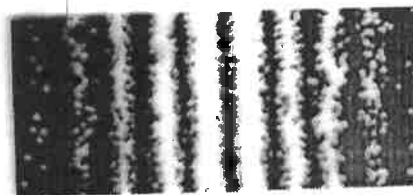
2) ψ nas tem significados físicos diretos, só $|\psi|^2$ que define a probabilidade de 1 fenômeno ocorrer.



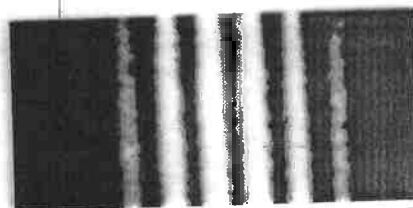
(a) Depois de 28 elétrons



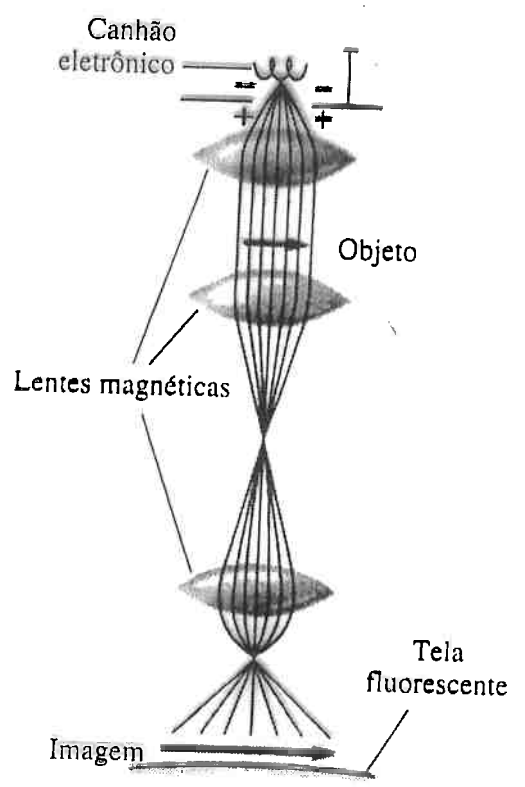
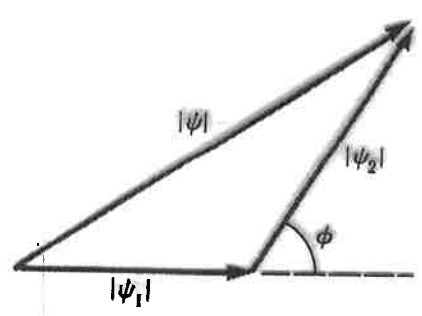
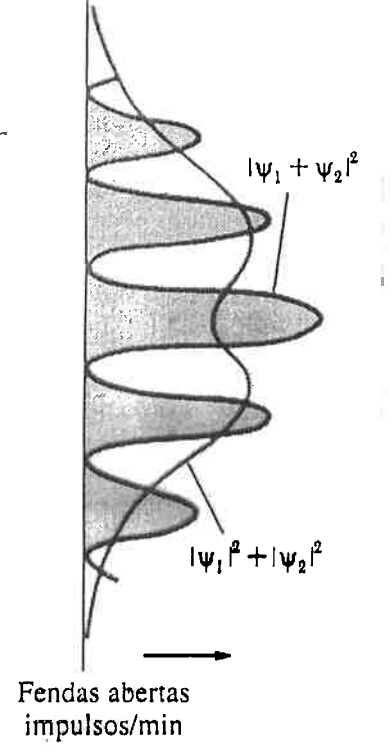
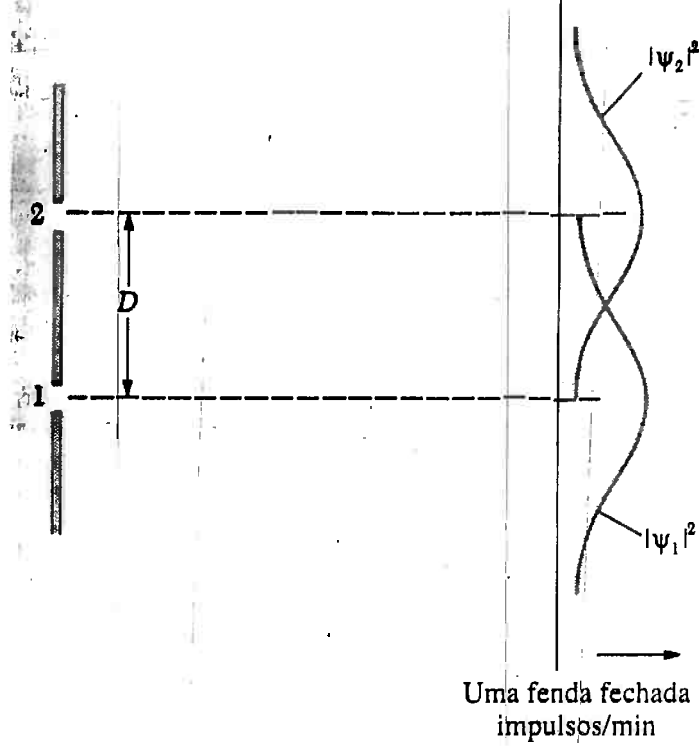
(b) Depois de 1.000 elétrons

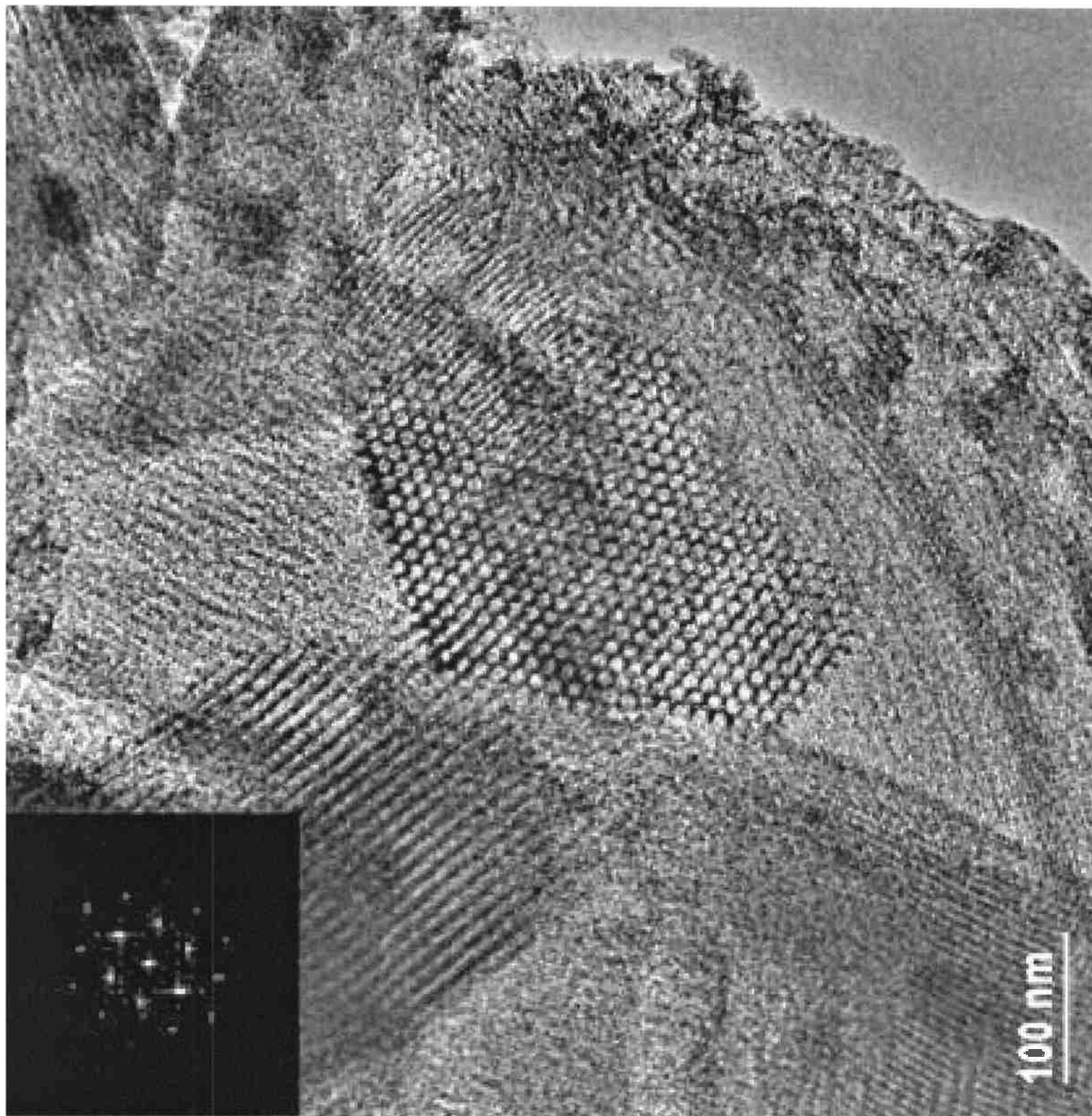


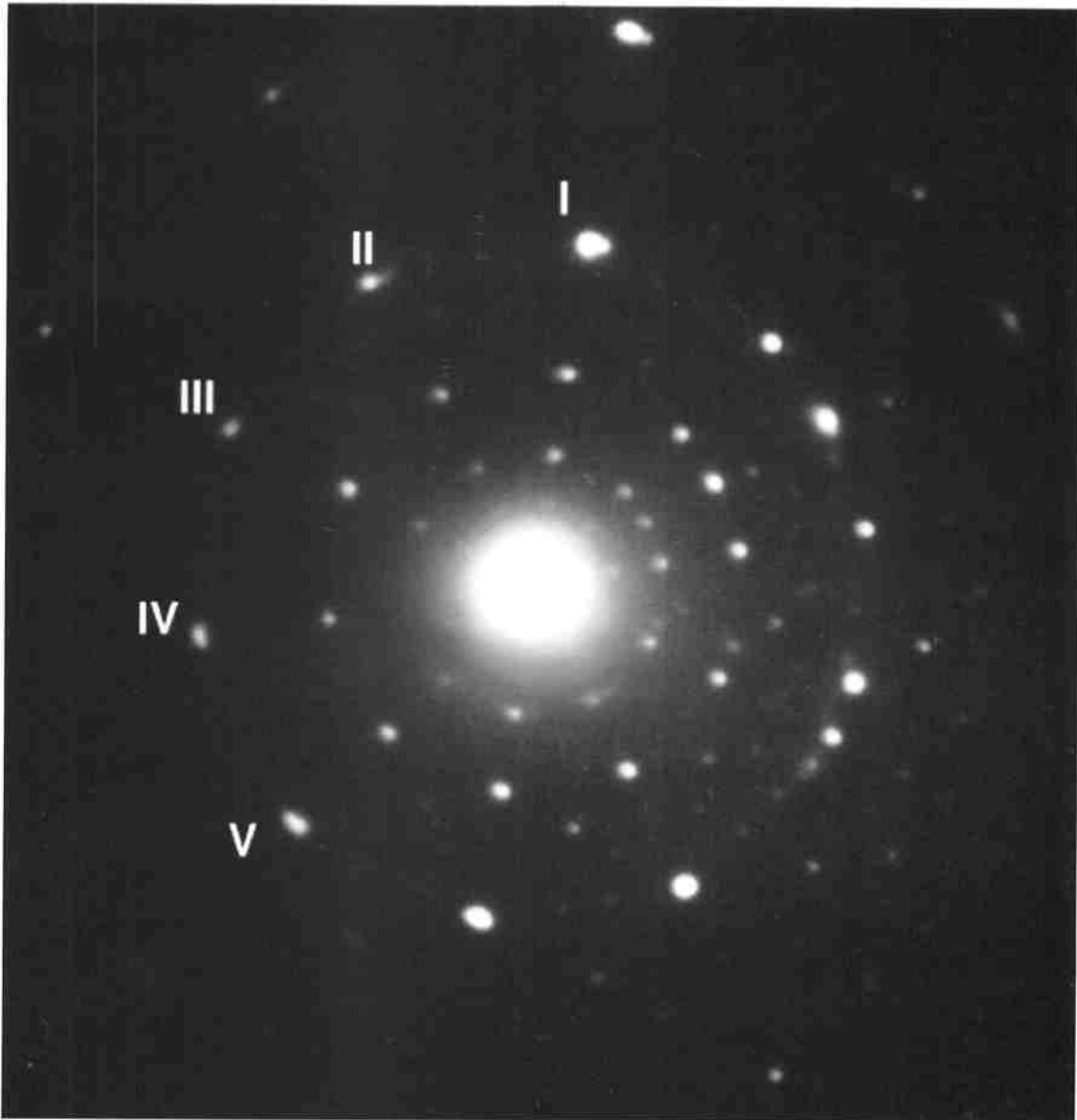
(c) Depois de 10.000 elétrons



(d) Difração de elétrons em dupla fenda







TEM diffraction pattern of the Al-Cu-Fe coating showing five or ten-fold symmetry, 200 kV, camera length 1.92 m, small selection aperture (diffraction from a few grains, one of them dominating).