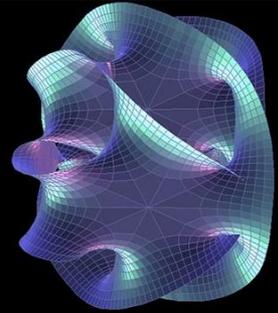




Mecânica Quântica

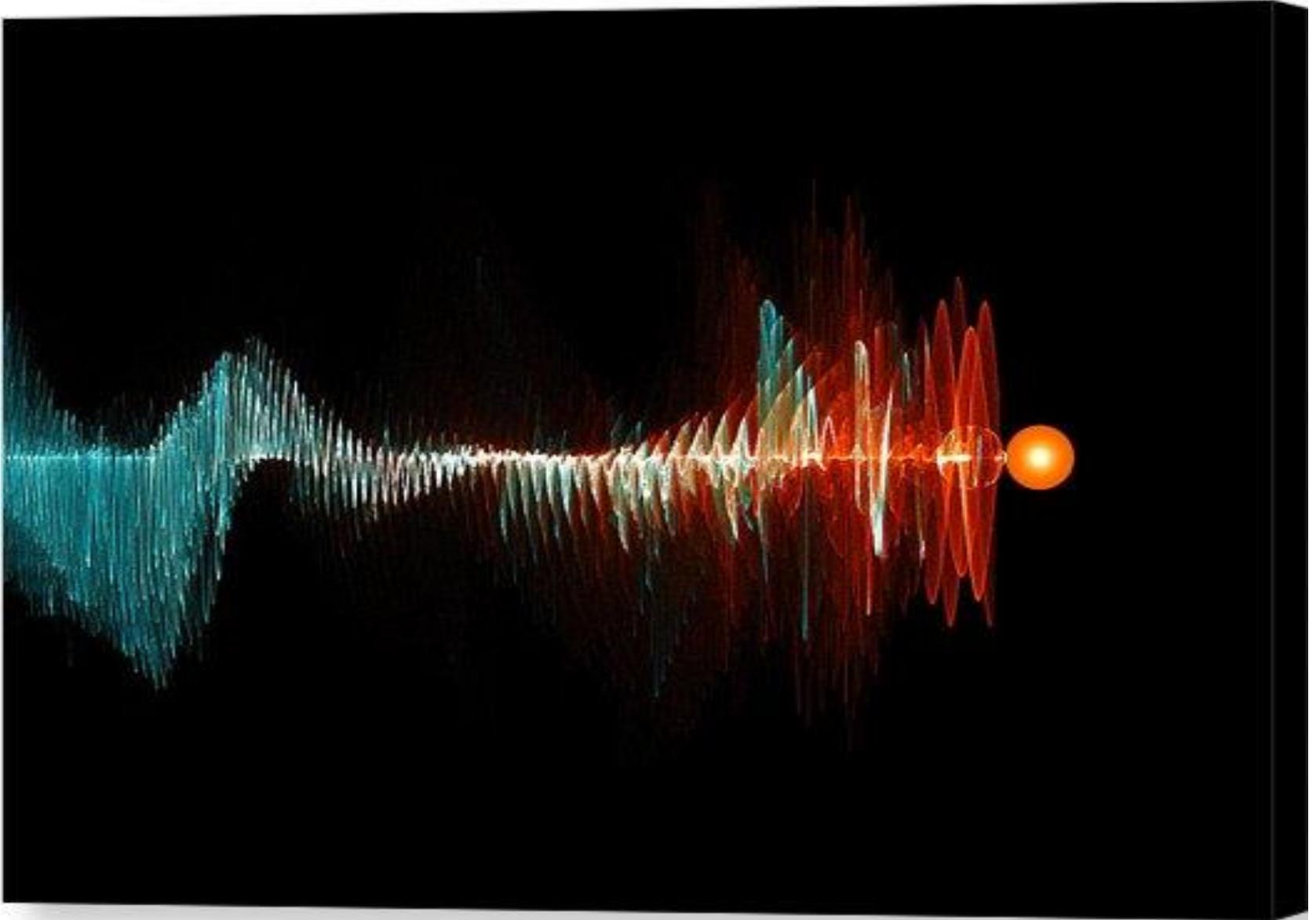
INTRODUÇÃO

O mundo das coisas pequenas é estranho....



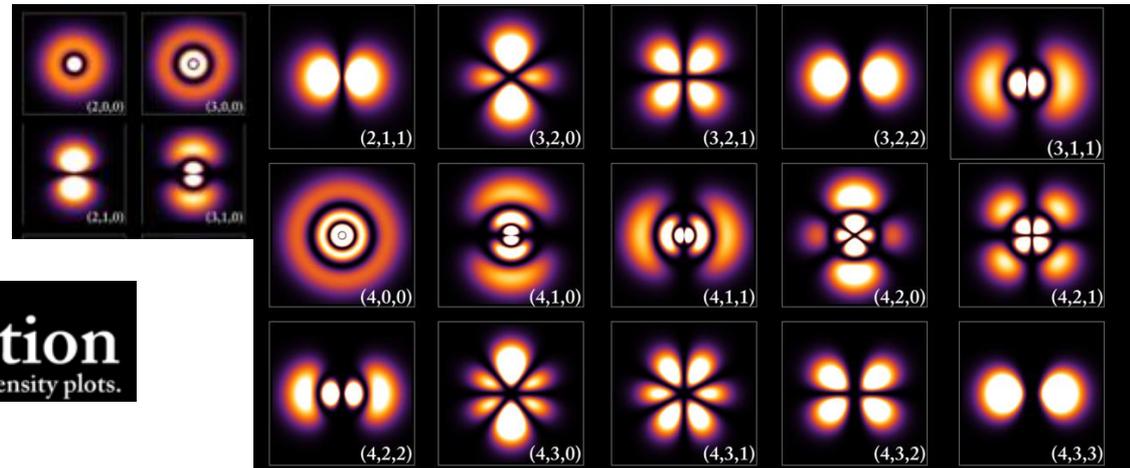
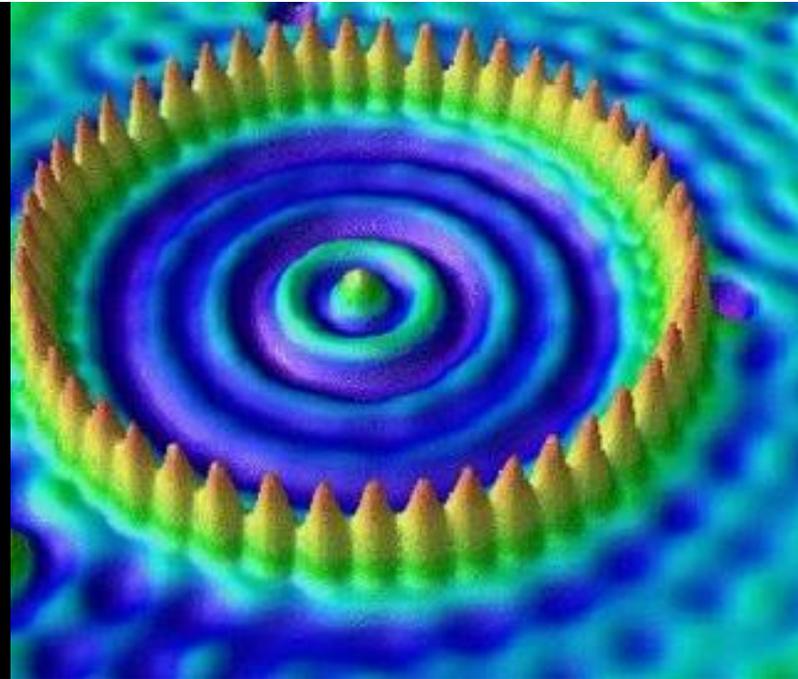
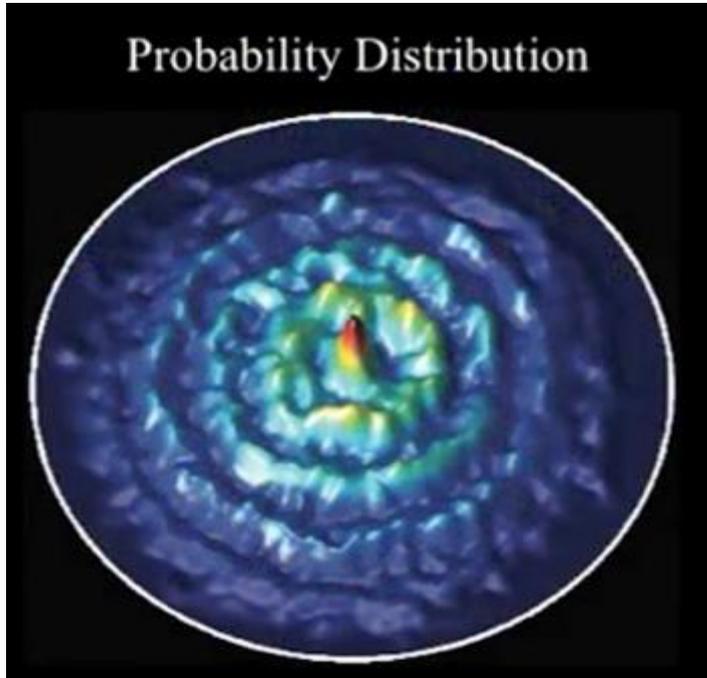
INTRODUÇÃO

As partículas materiais se comportam como ondas...



INTRODUÇÃO

As ondas-partículas são descritas probabilisticamente...

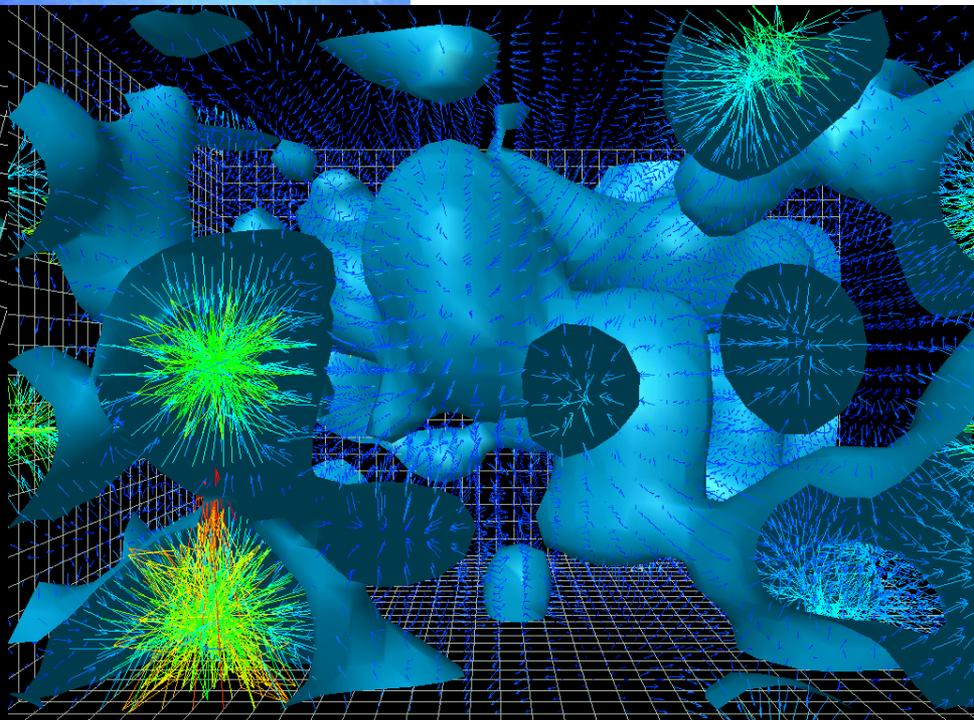
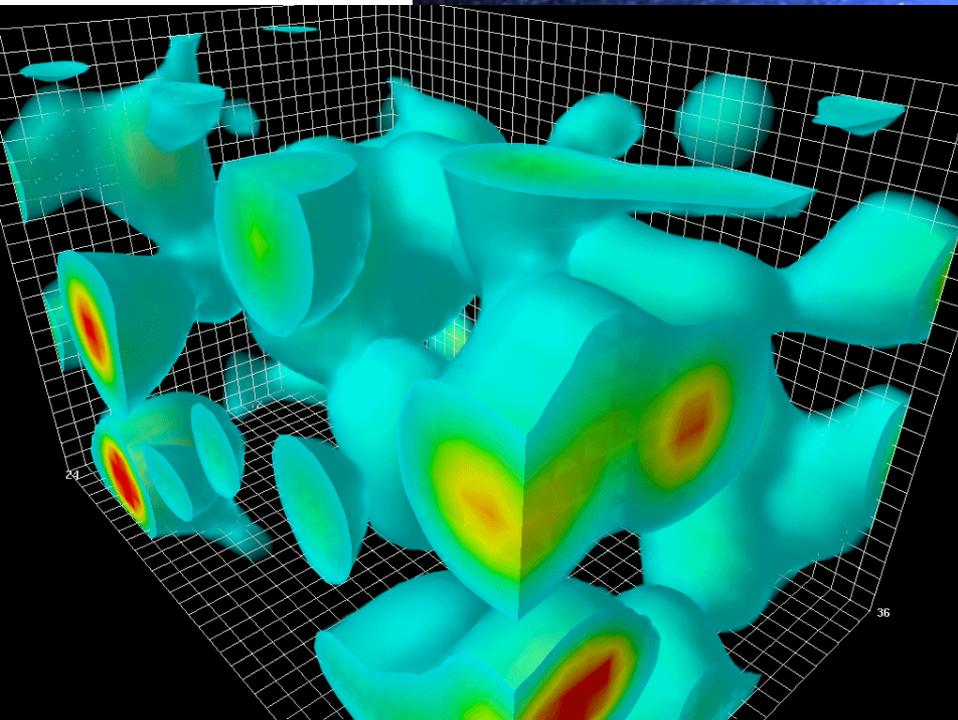


Hydrogen Wave Function
Probability density plots.

INTRODUÇÃO

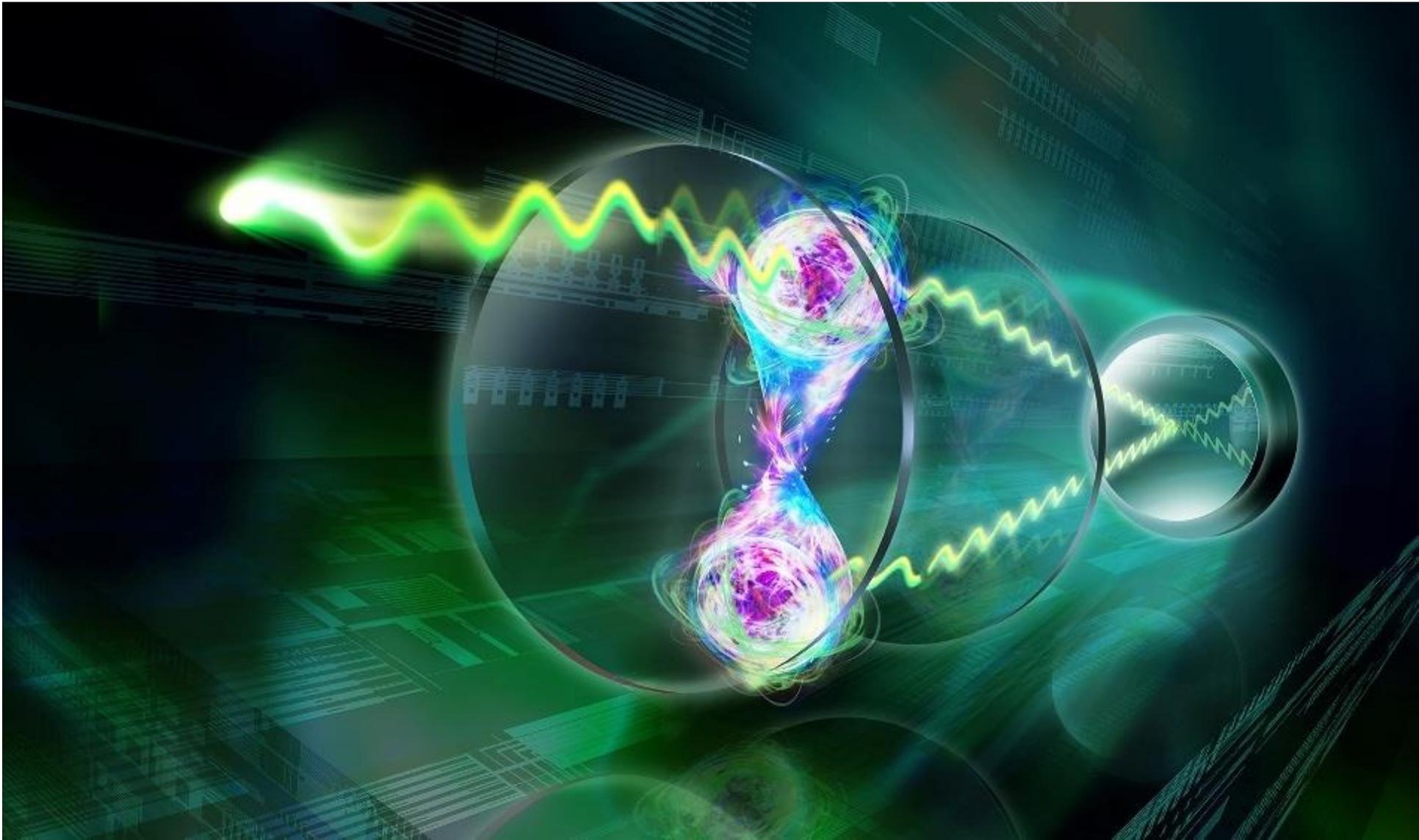
Algumas propriedades se agrupam em pares e não podem ser determinadas simultaneamente.

Por exemplo: energia e tempo; momento e posição; etc.



INTRODUÇÃO

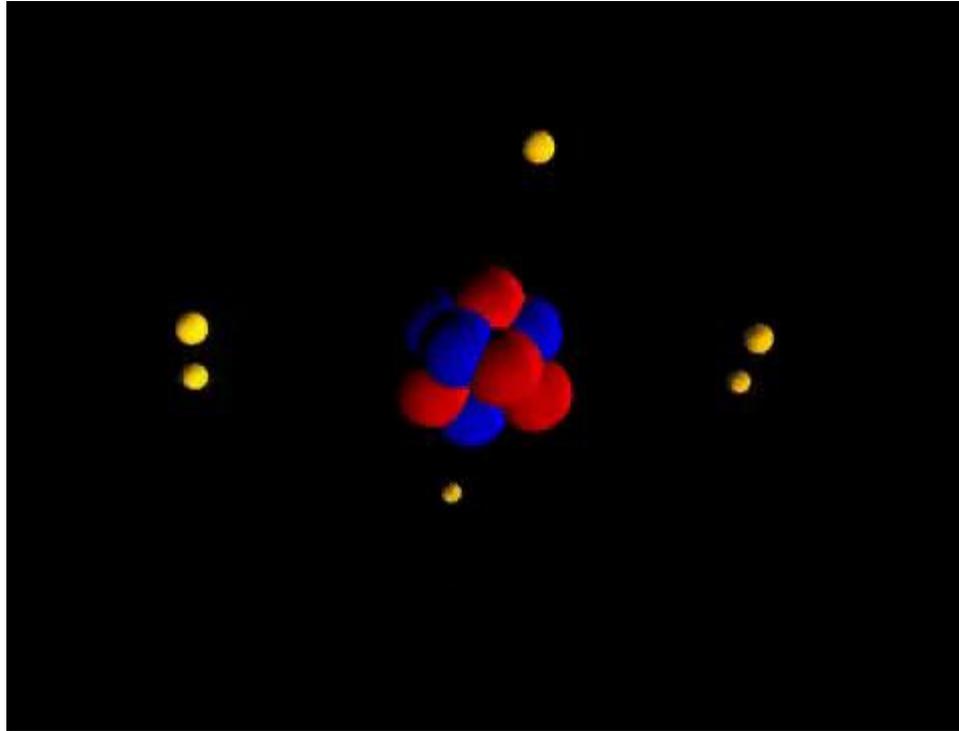
As partículas se comportam de forma não local....



A crise na Física e o surgimento da Mecânica Quântica

O início do problema que levou à mecânica quântica....

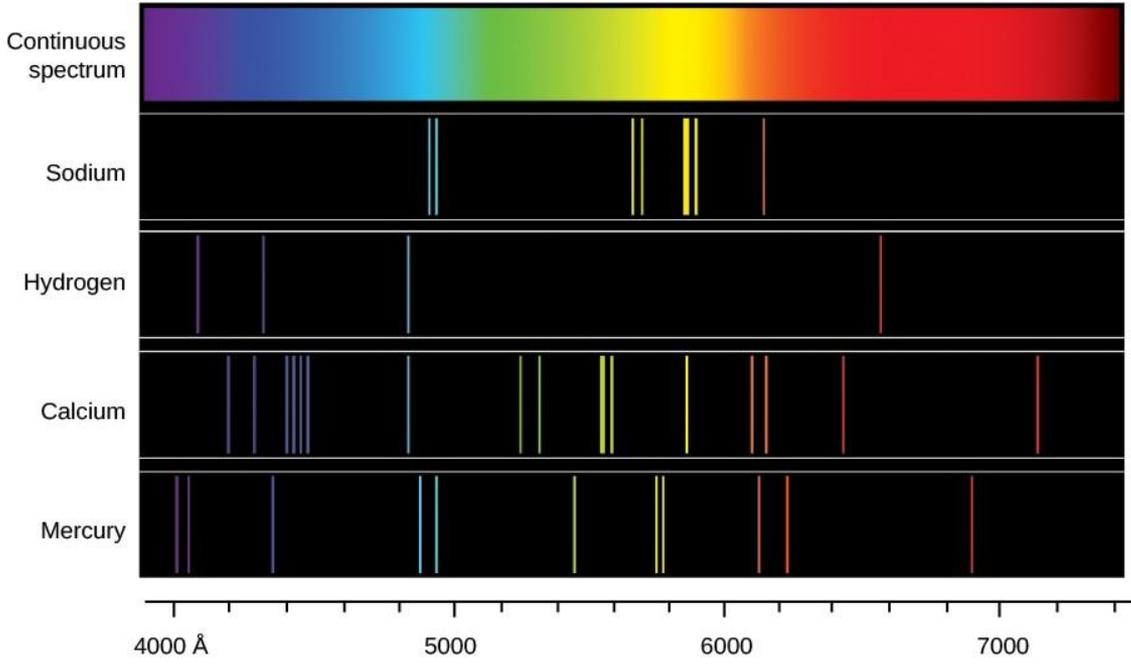
Por que os átomos não se desintegram em nano segundos?



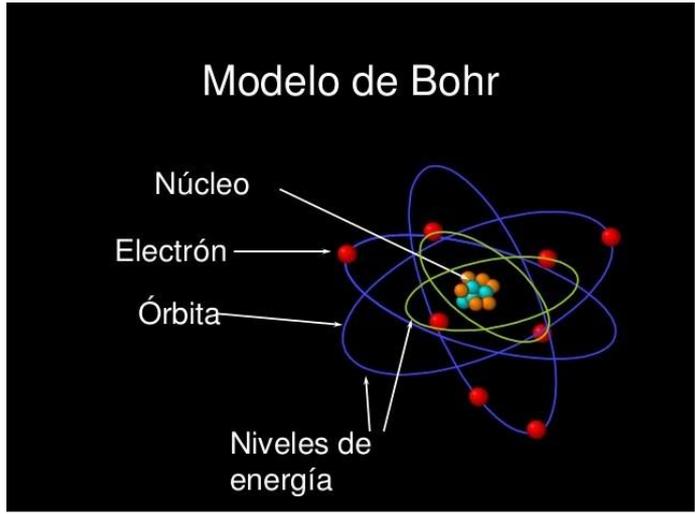
Por que a luz infravermelha é incapaz de arrancar elétrons independentemente da sua intensidade mas a luz azul os arranca facilmente?

A crise na Física e o surgimento da Mecânica Quântica

Por que os espectros contem linhas discretas?



Por que um reduzido número de comprimentos de onda podem ser emitidos ou absorvidos pelos átomos?



O Fóton, o Quantum de Luz

Vimos e entendemos os fenômenos de reflexão, interferência, difração, em termos do comportamento ondulatório da luz (ou seja governada pelas eq. Maxwell).

Em 1905, Einstein propôs que a radiação eletromagnética (ou, simplesmente, a luz) é quantizada; a quantidade elementar de luz hoje é chamada de **fóton**, **...uma partícula!!! ou seja que a luz se comporta como partícula...**

Segundo Einstein, um *quantum* de luz de frequência f tem uma energia dada por

$$E = hf \quad (\text{energia do fóton})$$

onde h é a *constante de Planck*, cujo valor é

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 4,14 \cdot 10^{-15} \text{ eV}$$

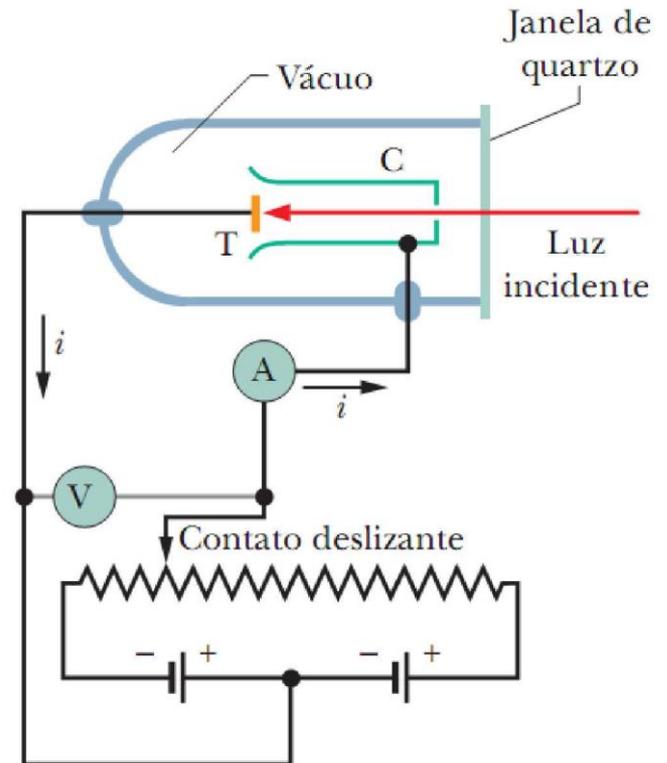
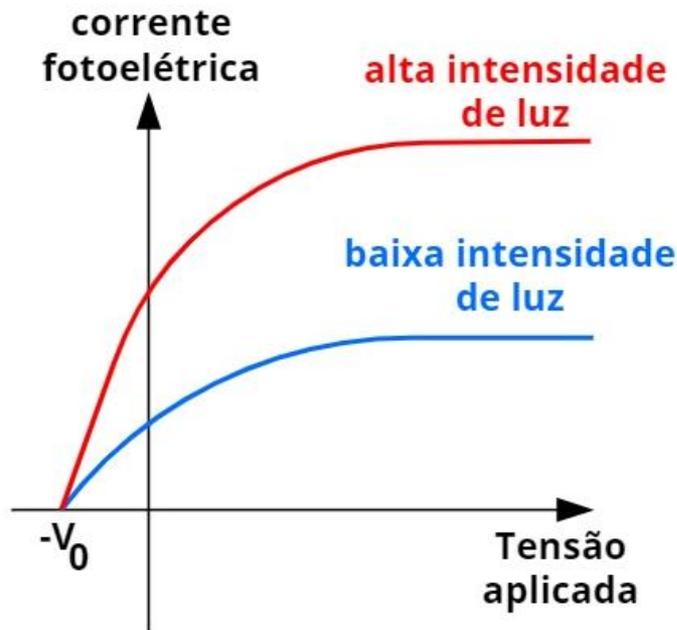
Vejamos como Einstein chegou a esta conclusão....

O efeito fotoelétrico

Montagem experimental usada para estudar o efeito fotoelétrico. A luz incide no alvo T, ejetando elétrons, que são recolhidos pelo coletor C. As baterias e o resistor variável são usados para produzir e ajustar uma diferença de potencial entre T e C.

Aumentamos o valor negativo de V até que atinja o valor V_0 , chamado **potencial de corte**, para o qual a corrente medida pelo amperímetro A é nula. Para $V = V_0$, os elétrons de maior energia ejetados pelo alvo são detidos pouco antes de chegarem ao coletor. Assim, K_{\max} , a energia cinética desses elétrons, é dada por:

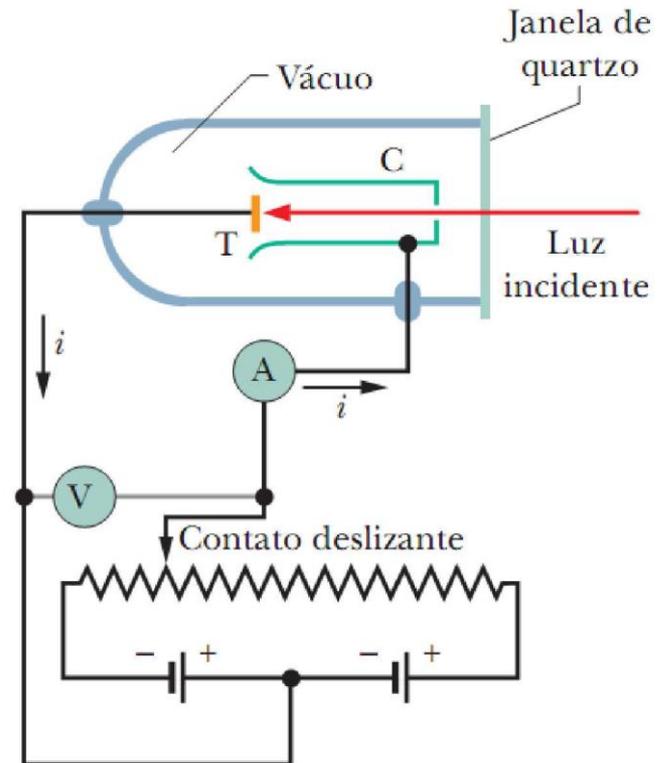
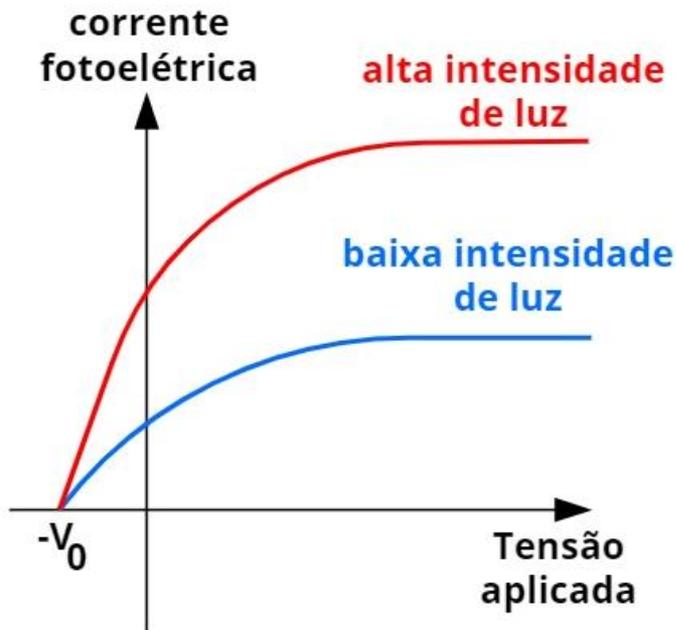
$$K_{\max} = eV_0$$



O problema do efeito fotoelétrico...

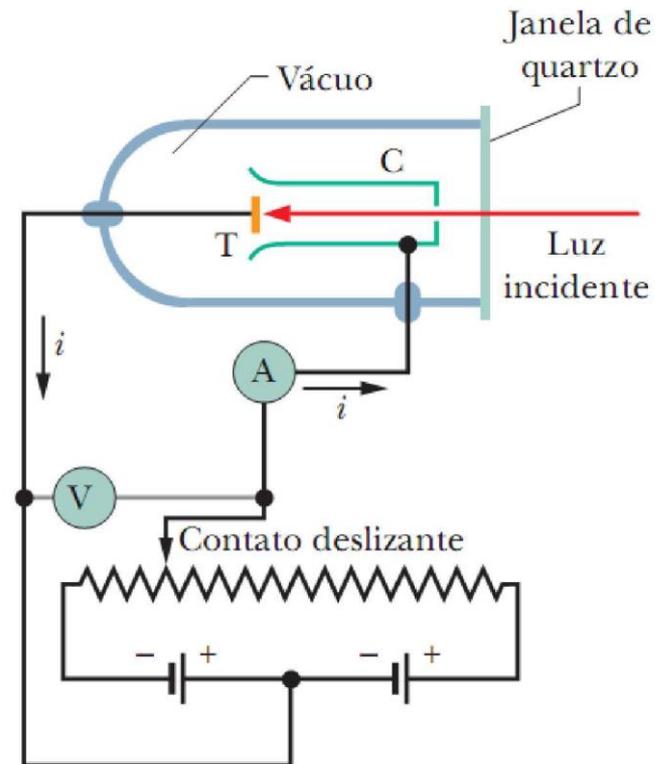
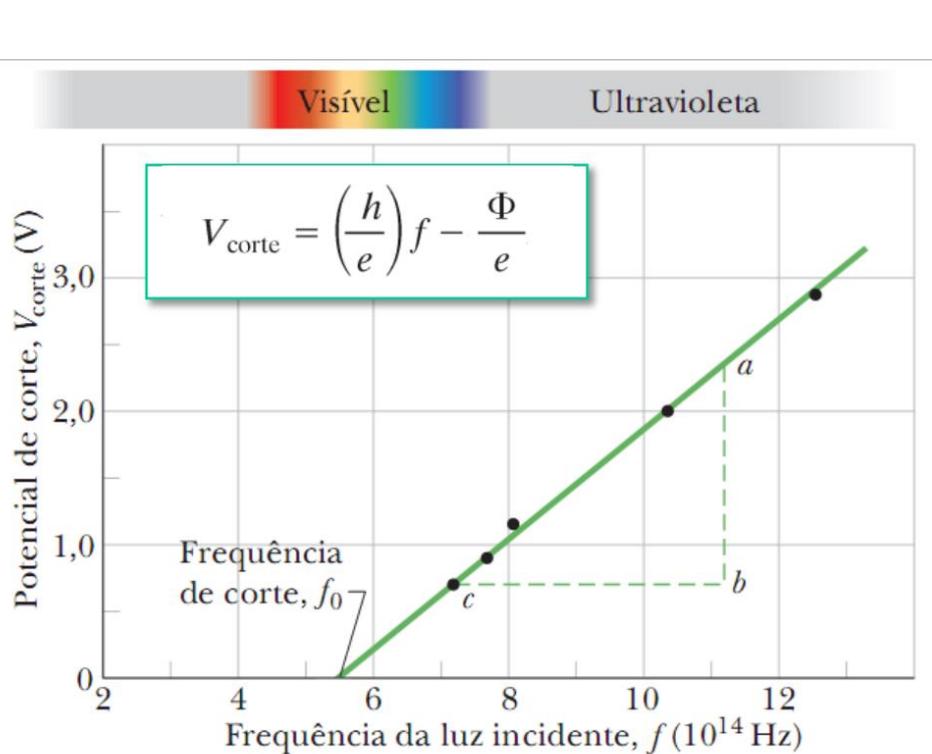
Estes resultados **não podem ser explicados** pela física clássica.

1º) O problema da intensidade: Quando a intensidade da onda aumenta (o que significa sua energia média por unidade de tempo e por unidade de área), ou seja, quando se aumenta o módulo do vetor campo elétrico E , a intensidade $I \approx E^2$, os elétrons deveriam ganhar mais energia (pois a força que os elétrons recebem é $F = q \cdot E$) e portanto deveria ser necessário um potencial V_0 mais negativo para deter os elétrons, mas na figura o V_0 não depende da intensidade!!!



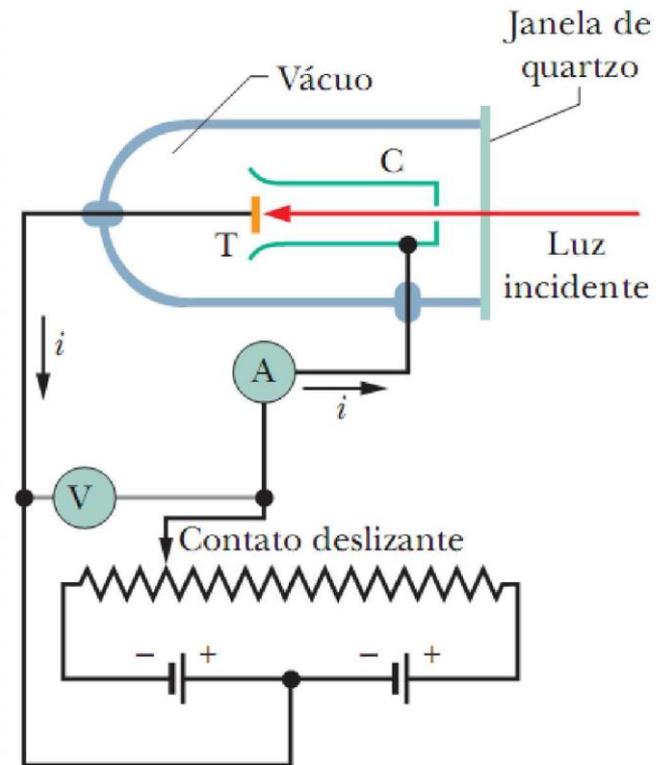
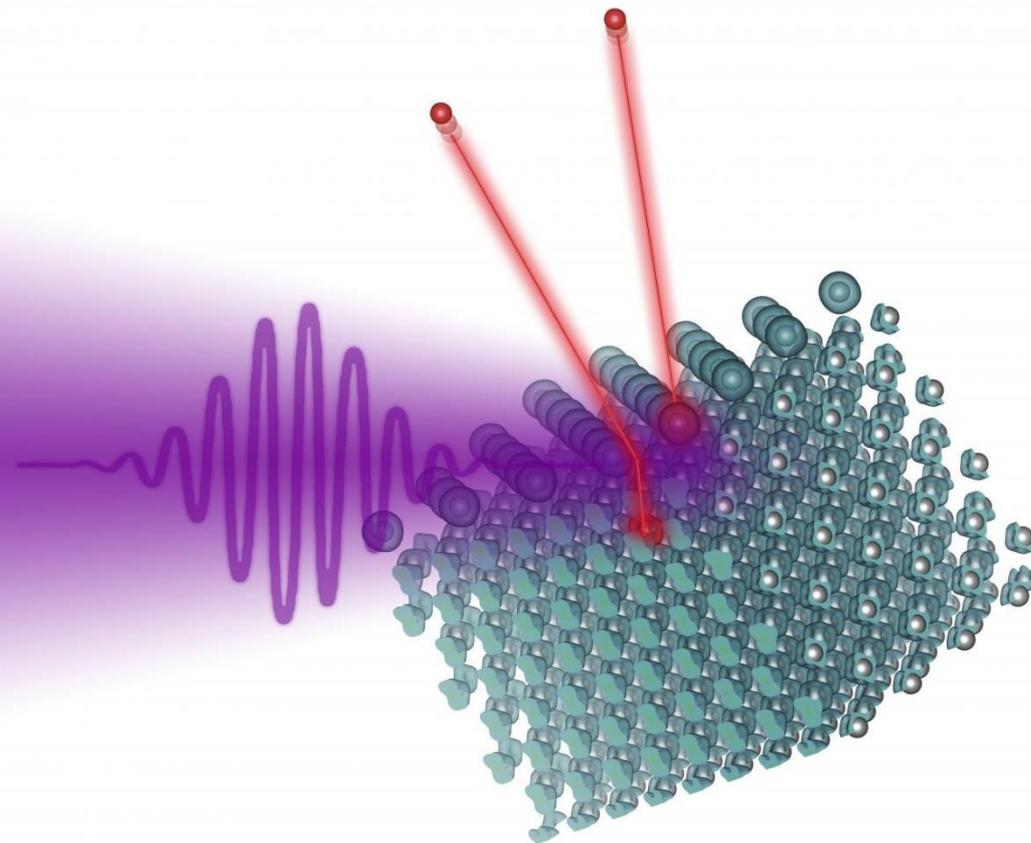
O problema do efeito fotoelétrico...

2º) O problema da frequência: segundo a teoria ondulatória, o efeito fotoelétrico deveria acontecer com qualquer frequência, pois para qualquer frequência deveria ser possível arrancar elétrons a partir de uma determinada intensidade de luz... mas o **efeito fotoelétrico não é observado** se a frequência da luz for menor que uma certa **frequência de corte** f_0 , ou seja, se o comprimento de onda for maior que um certo **comprimento de onda de corte** $\lambda_0 = c/f_0$ sem importar a intensidade da luz incidente!



O problema do efeito fotoelétrico...

3º) O problema do retardo temporal: pela teoria ondulatória, a energia do fotoelétron ejetado deve ser absorvida da onda incidente. A área efetiva, por onde o elétron recebe energia, não pode ser muito maior que do que a área (seção reta) de um átomo. Então se a luz for pouco intensa, haverá um retardo de tempo mensurável até o elétron absorver suficiente energia para ser ejetado. Este retardo nunca foi observado.



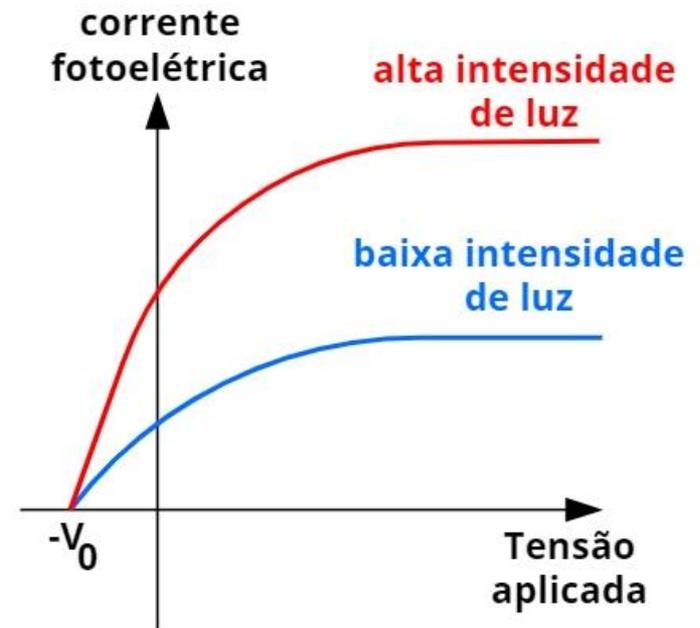
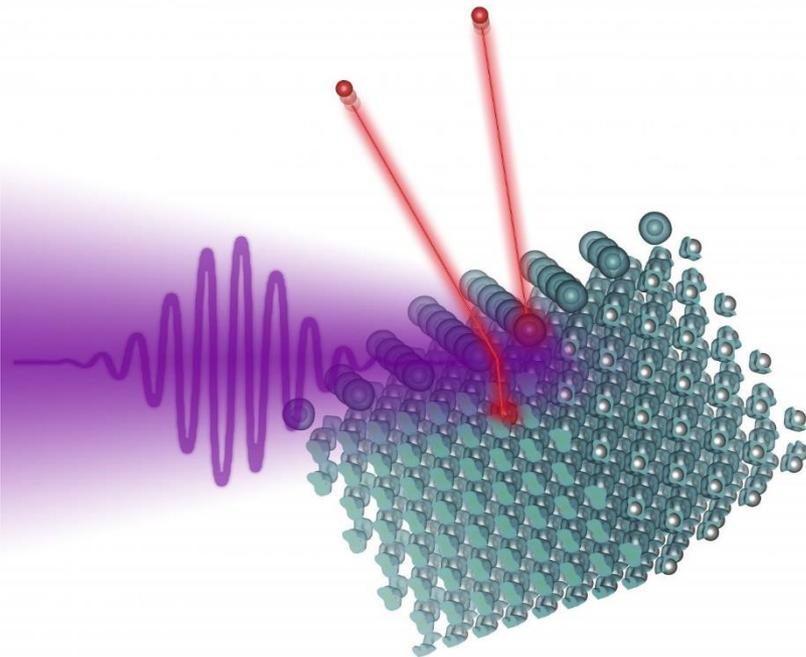
A proposta de Einstein

Todo se resolve se a luz for composta de pequenos pacotes de energia (e não uma onda) e onde a energia destes pacotes (fótons) é:

$$E = hf \quad (\text{energia do fóton})$$

Desta forma, **não há mais problema da intensidade** pois ao duplicar a intensidade duplicamos o número de fótons mas não aumentamos a energia individual de cada um e portanto o K_{\max} não muda!

$$K_{\max} = eV_0$$



A proposta de Einstein

Todo se resolve se a luz for composta de pequenos pacotes de energia (e não uma onda) e onde a energia destes pacotes (fótons) é:

$$E = hf \quad (\text{energia do fóton})$$

Desta forma, **não há mais problema da frequência** pois se os elétrons se mantêm no metal em função do campo elétrico E , para ser ejetado precisa de uma energia mínima Φ , que é dada pela energia do fóton $E = hf$ se $hf > \Phi$ ejeta elétrons senão não ejeta.

Também **não há mais problema da retardo temporal** pois a transferência de energia é feita num evento de colisão único (não é um fenômeno cumulativo)

Φ é chamada de **função trabalho**.

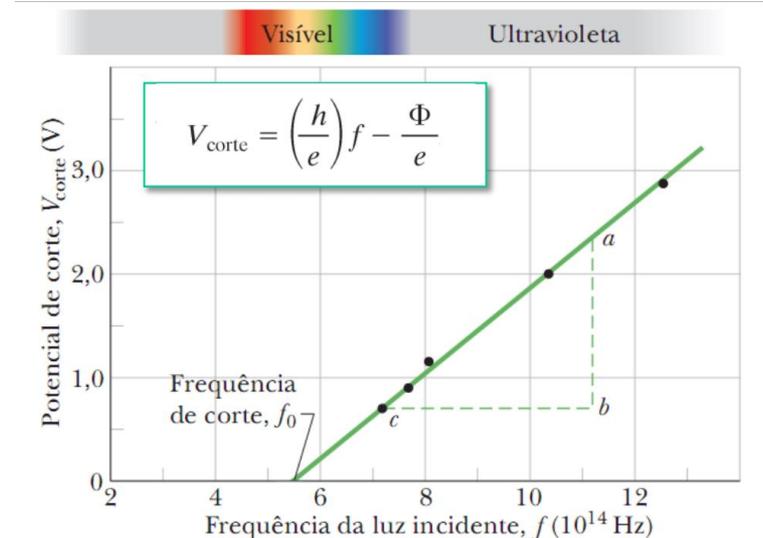
Se a energia hf cedida por um fóton a um elétron é maior que a função trabalho do material (ou seja, se $hf > \Phi$), o elétron pode escapar do alvo. Einstein escreveu:

$$hf = \Phi + K_m$$

$$K_m = eV_0$$

$$V_0 = \frac{h}{e}f - \frac{\Phi}{e}$$

Relação linear da figura



Exemplo: Emissão e Absorção de Luz na Forma de Fótons

Uma lâmpada de vapor de sódio é colocada no centro de uma casca esférica que absorve toda a energia que chega até ela. A lâmpada tem uma potência de 100 W; suponha que toda a luz é emitida com um comprimento de onda de 590 nm. Quantos fótons são absorvidos pela casca esférica por segundo?

A luz é emitida e absorvida na forma de fótons. De acordo com o enunciado, toda a luz emitida pela lâmpada é absorvida pela casca esférica. Assim, o número de fótons por unidade de tempo que a casca esférica absorve, N , é igual ao número de fótons por unidade de tempo que a lâmpada emite, N_{emit} .

Cálculos: O número de fótons emitidos por unidade de tempo N_{emit} é dado por:

$$N_{\text{emit}} = \frac{\text{Potência emitida}}{\text{Energia do fóton}} = \frac{P_{\text{emit}}}{E}$$

Considerando que a energia do fóton é $E = hf$ temos:

$$N = N_{\text{emit}} = \frac{P_{\text{emit}}}{hf}$$

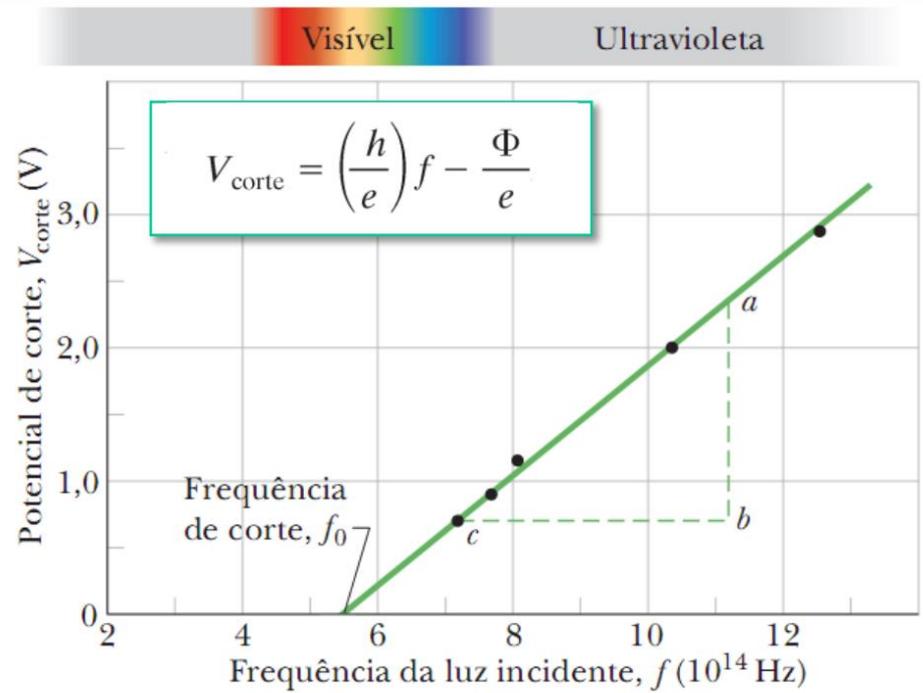
Como $f = c/\lambda$ temos:

$$N = \frac{P_{\text{emit}}\lambda}{hc} = \frac{(100 \text{ W})(590 \cdot 10^{-9} \text{ m})}{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s})(2,998 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}})} = 2,97 \cdot 10^{20} \text{ fótons/s}$$

Exemplo: O Efeito Fotelétrico e a Função Trabalho

Determine o valor da função trabalho Φ do sódio a partir da figura

É possível determinar a função trabalho Φ a partir da frequência de corte f_0 , (que pode ser extraída do gráfico). O raciocínio é o seguinte: na frequência de corte, a energia cinética K_{max} é nula. Assim, toda a energia hf transferida de um fóton para um elétron é usada para ejetar o elétron (sem excedente de energia cinética), esta é a energia Φ .



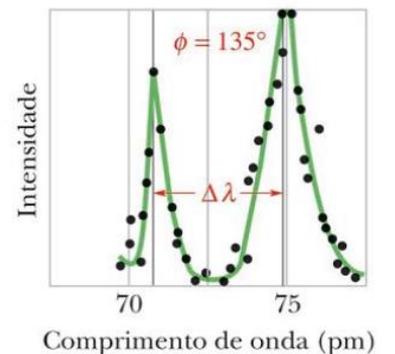
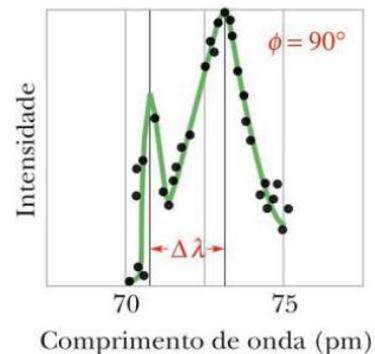
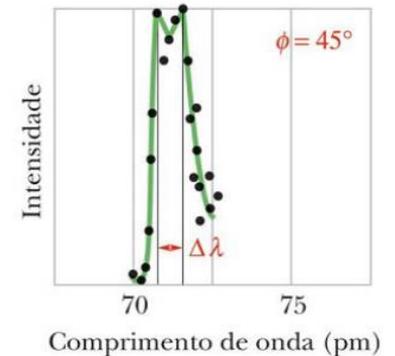
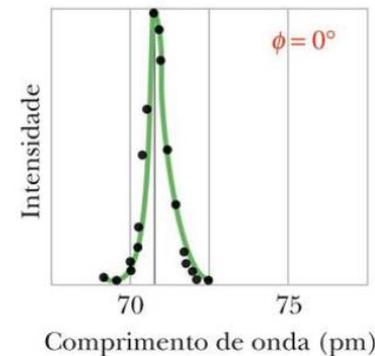
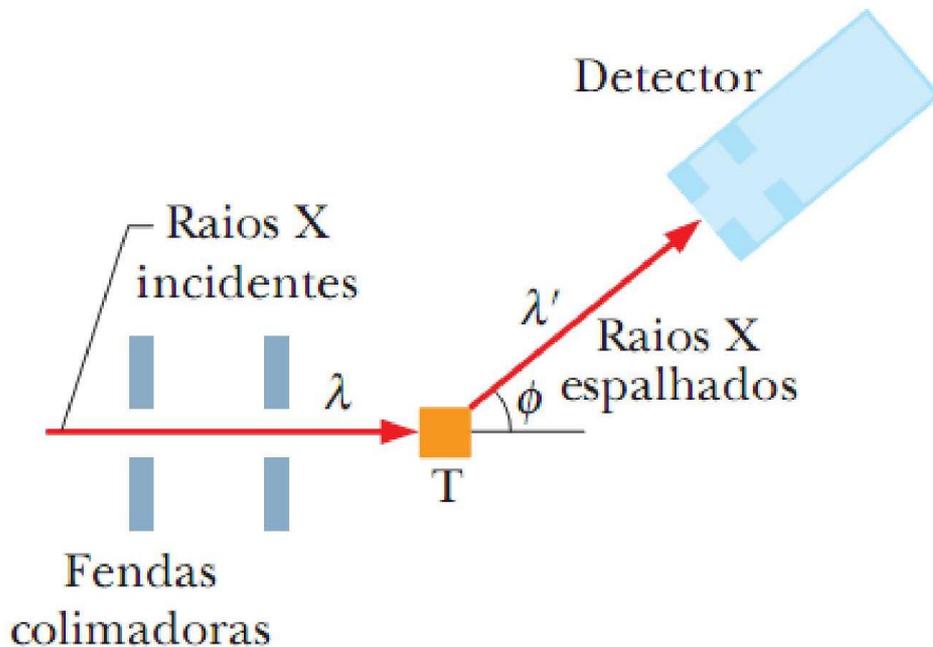
A **frequência de corte** f_0 para o sódio é a frequência na qual a reta correspondente ao sódio intercepta o eixo horizontal, neste caso $5,5 \times 10^{14}$ Hz. Assim, temos:

$$\Phi = hf_0 = (6,63 \times 10^{-34} \text{ J s})(5,5 \times 10^{14} \text{ Hz}) = 3,6 \times 10^{-19} \text{ J} = 2,3 \text{ eV}$$

Os Fótons Possuem Momento

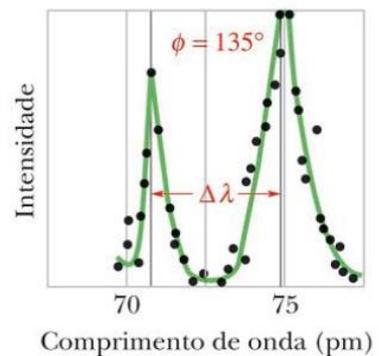
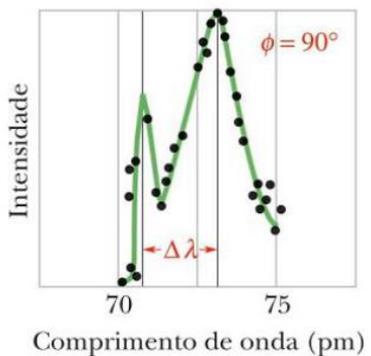
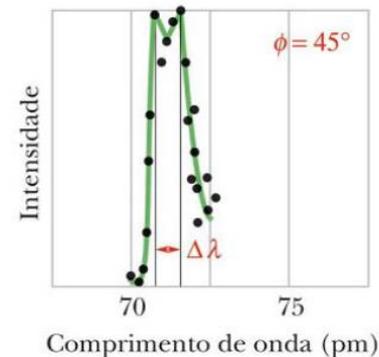
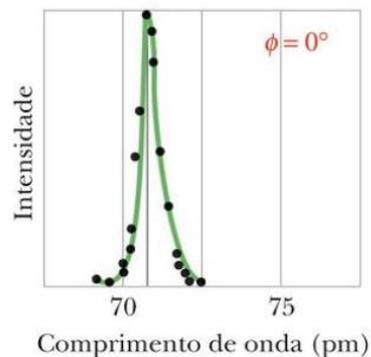
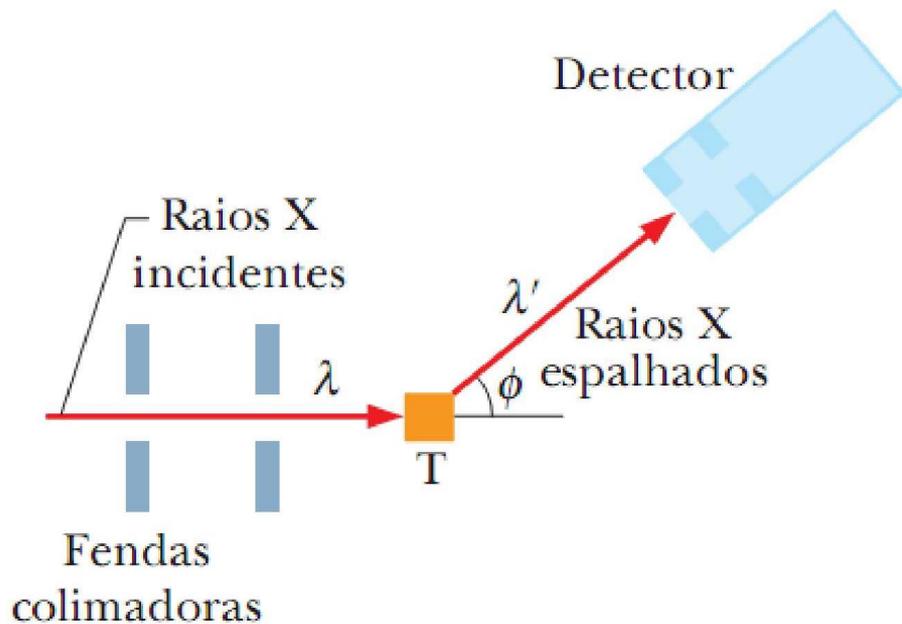
Uma outra **experiência convincente** que aponta para a interpretação corpuscular das ondas eletromagnéticas foi a questão do momento linear (não só foram as questões de energia como no caso do efeito fotoelétrico). Pois o momento linear é uma característica exclusiva de partículas com massa! e não de ondas...vamos à experiência:

Compton em 1923 fez a seguinte experiência: Um feixe de raios X de comprimento de onda $\lambda = 71,1$ pm incide em um alvo de carbono T. Os raios X espalhados pelo alvo são observados em vários ângulos ϕ em relação à direção do feixe incidente. O detector mede a intensidade e o comprimento de onda dos raios X espalhados. O feixe espalhado apresentou **dois comprimentos de onda!**



Os Fótons Possuem Momento

O segundo comprimento de onda observado (e que depende do ângulo de observação) é **totalmente incompreensível** do ponto de vista ondulatório pois nesse modelo, a onda incidente, com frequência f provoca uma oscilação nos elétrons do alvo com a mesma frequência f . Logo esses elétrons oscilantes emitem ondas na mesma frequência f sem mudanças!!! (Nos vimos este fenômeno quando corrigimos a Lei de Coulomb, ou seja, como os elétrons acelerados emitem ondas).



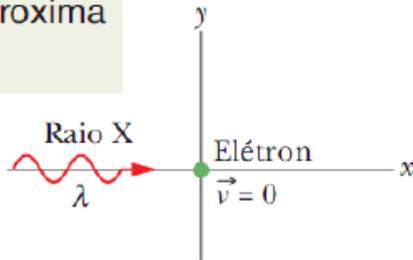
O segundo comprimento de onda observado foi explicado por Compton propondo que o fóton teria um momento

Vejamos como ...

$$p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{momento do fóton})$$

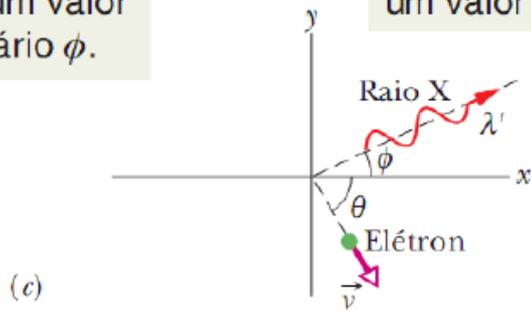
Os Fótons Possuem Momento

Um raio X se aproxima de um elétron.



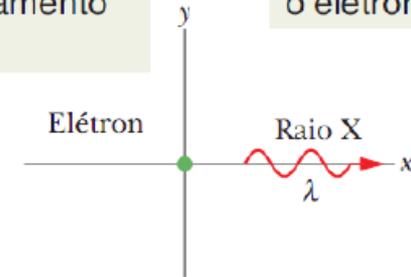
O ângulo de espalhamento pode ter um valor intermediário ϕ .

A energia transferida para o elétron tem um valor intermediário.



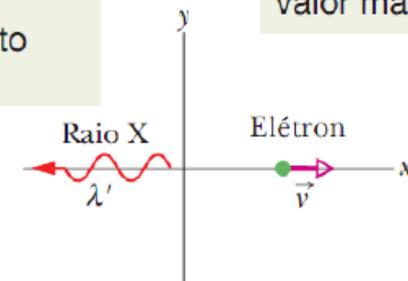
(c)

O raio X pode passar pelo elétron sem ser afetado; o ângulo de espalhamento é $\phi = 0$.



(b)

O raio X pode ser retroespalhado; o ângulo de espalhamento é $\phi = 180^\circ$.



(d)

Nenhuma energia é transferida para o elétron.

A energia transferida para o elétron tem o valor máximo.

(a) Um raio X incide em um elétron estacionário.

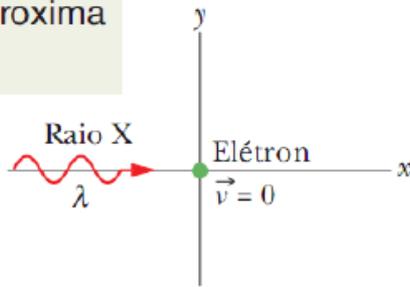
(b) pode passar sem que haja transferência de energia e momento (não interage)

(c) pode ser espalhado em uma direção intermediária com uma transferência intermediária de energia e momento

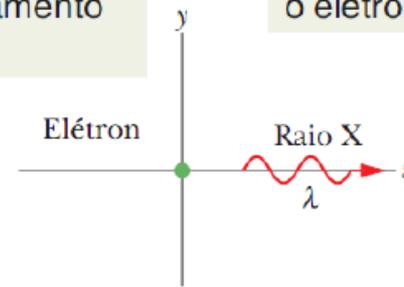
(d) pode se propagar no sentido oposto (retroespalhado), neste caso a transferência de energia e momento é a maior possível

Os Fótons Possuem Momento

Um raio X se aproxima de um elétron.

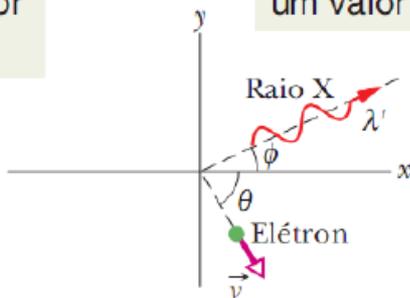


O raio X pode passar pelo elétron sem ser afetado; o ângulo de espalhamento é $\phi = 0$.



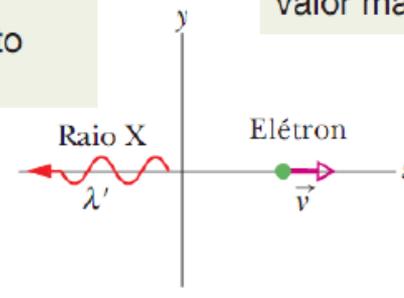
Nenhuma energia é transferida para o elétron.

O ângulo de espalhamento pode ter um valor intermediário ϕ .



A energia transferida para o elétron tem um valor intermediário.

O raio X pode ser retroespalhado; o ângulo de espalhamento é $\phi = 180^\circ$.



A energia transferida para o elétron tem o valor máximo.

Compton sugeriu interpretar o fenômeno como uma **colisão** entre o fóton (de Einstein) com momento h/λ e o elétron com momento $m\mathbf{v}$. Utilizando o princípio da conservação da energia (colisão elástica, sem deformações evidentemente) e para o caso relativístico temos:

$$\mathbf{E}_{\text{incidente}} = \mathbf{E}_{\text{espalhado}} + \mathbf{K}_{\text{rel}} \text{ (do elétron ejetado)}$$

Os Fótons Possuem Momento

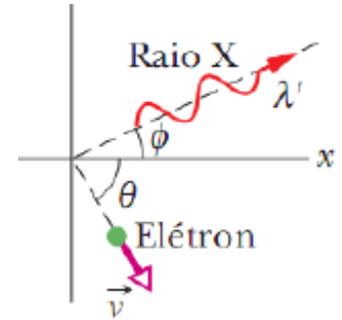
$$\mathbf{E}_{\text{incidente}} = \mathbf{E}_{\text{espalhado}} + \mathbf{K}_{\text{rel}} \text{ (do elétron ejetado)}$$

A energia cinética relativística do elétron K_{rel} sai de:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \Rightarrow \text{Quando } F \text{ e } v \text{ são ao longo}$$

de uma mesma linha

$$F = \frac{m_0}{\left(1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} a$$



Um parêntesis: por esta equação acima, uma força constante não produz uma aceleração constante (como estamos acostumados da mecânica clássica) vejamos, deixando em evidência a aceleração temos:

$$a = \frac{F}{m_0} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

A medida que $v \rightarrow c$ a aceleração produzida pela mesma força diminui! Sem importar qual o valor da força aplicada a aceleração tende a zero para $v \rightarrow c$...**como ultrapassar a velocidade c ?** por isso é limite!!!

Os Fótons Possuem Momento

Lembrando o Princípio Trabalho-Energia, segundo o qual:

$$W = K = \int_{x_1}^{x_2} F dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{m_0 a}{\left(1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} dx =$$

Vamos transformar numa integral em v (e não em x)

$$a dx = \frac{dv}{dt} dx = \frac{dv}{dx} \frac{dx}{dt} dx = \frac{dx}{dt} \frac{dv}{dx} dx = v dv$$

substituímos as variáveis...

$$K = W = \int_{x_1}^{x_2} F dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{m_0 a}{\left(1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} dx = \int_0^v \frac{m_0 v}{\left(1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} dv$$

Calculamos esta integral...

Os Fótons Possuem Momento

Calculamos esta integral...

$$K = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} - m_0 c^2 \quad K_{rel} = m c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} - 1 \right) = m c^2 (\gamma - 1)$$

Lembrando nosso problema original que era explicar o efeito Compton que é o aparecimento do segundo comprimento de onda no espalhamento em diferentes ângulos...

Desta forma a Lei da Conservação da Energia exige que:

$$hf = hf' + m c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} - 1 \right) \quad \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} + \gamma m c (\gamma - 1) \quad \text{conservação da energia}$$

$$K_{rel} = m c^2 (\gamma - 1)$$

em que hf é a energia do fóton incidente, hf' é a energia do fóton espalhado, e o último termo é a energia cinética relativística do elétron após a interação. Como, após a interação, o elétron pode estar se movendo com uma velocidade próxima da velocidade da luz, utilizamos as expressões relativísticas.

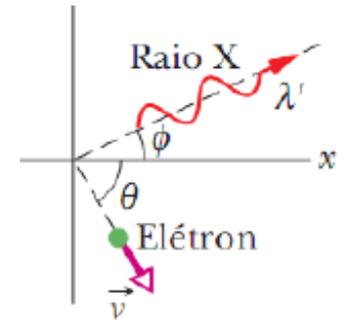
Os Fótons Possuem Momento

Veamos agora a Lei da conservação do momento linear

Se o fóton tem momento h/λ (vetor!), como proposto por Compton, então numa colisão elástica teríamos que deveriam se cumprir duas equações (em 2D) devido á Lei da Conservação do Momento Linear:

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos\phi + \gamma m v \cos\theta \quad \text{eixo } x$$

$$0 = \frac{h}{\lambda} \sin\phi + \gamma m v \sin\theta \quad \text{eixo } y$$



A partir das equações acima elimine v e θ (relacionadas ao recuo do elétron) e obtenha a dependência do comprimento de onda do fóton com o ângulo ϕ ..

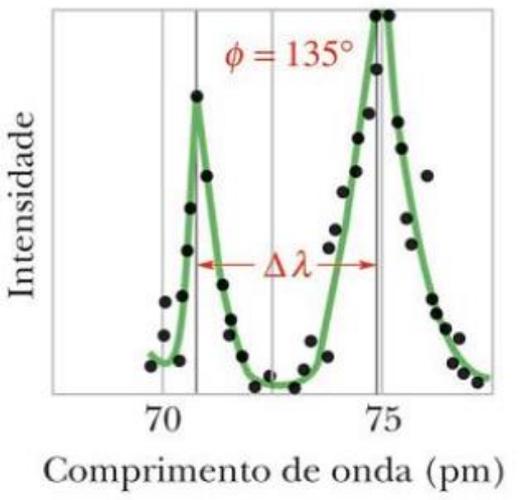
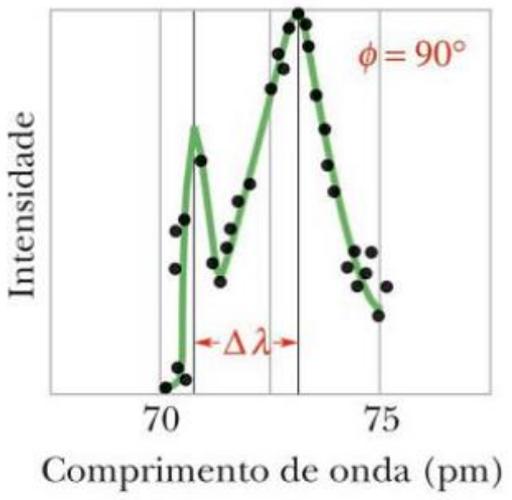
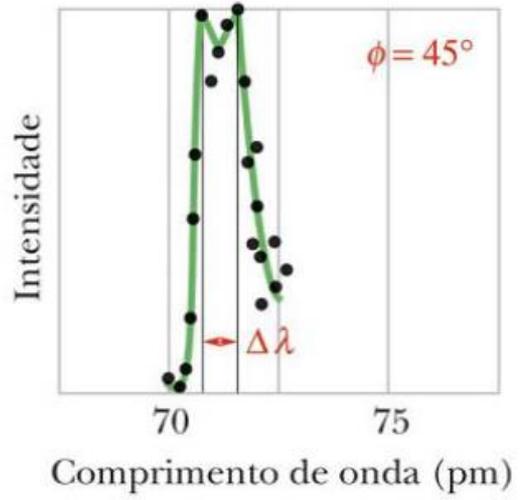
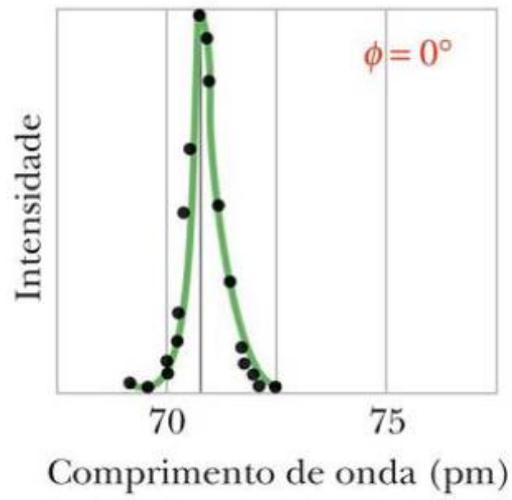
➡
$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos\phi) \quad (\text{deslocamento de Compton})$$

Nesta expressão, a grandeza h/mc é um comprimento de onda, chamado Compton que tem valor $2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$

A medida experimental apresenta uma concordância total com estas equações....

Os Fótons Possuem Momento

Comparação experimental (pontos) com a teoria (linha)



Resolver: Espalhamento de Compton de Raios X por Elétrons

Um feixe de raios X de comprimento de onda $\lambda = 22 \text{ pm}$ (energia dos fótons — 56 keV) é espalhado por um alvo de carbono e o feixe espalhado é detectado a 85° respeito do feixe incidente. (a) Qual é o deslocamento de Compton do feixe espalhado?

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos\phi) \quad \Delta\lambda = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}} (1 - \cos 85^\circ) = 2,21 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

(b) Que porcentagem da energia dos fótons incidentes é transferida para os elétrons espalhados a 85° ?

$$\text{porcentagem} = \frac{\text{perda de energia}}{\text{energia inicial}} = \frac{E - E'}{E}$$

$$\% = \frac{hf - hf'}{hf} = \frac{\frac{c}{\lambda} - \frac{c}{\lambda'}}{\frac{c}{\lambda}} = \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda'} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda + \Delta\lambda}$$

$$\% = \frac{2,21 \text{ pm}}{22 \text{ pm} + 2,21 \text{ pm}} = 0,091 = 9,1\%$$

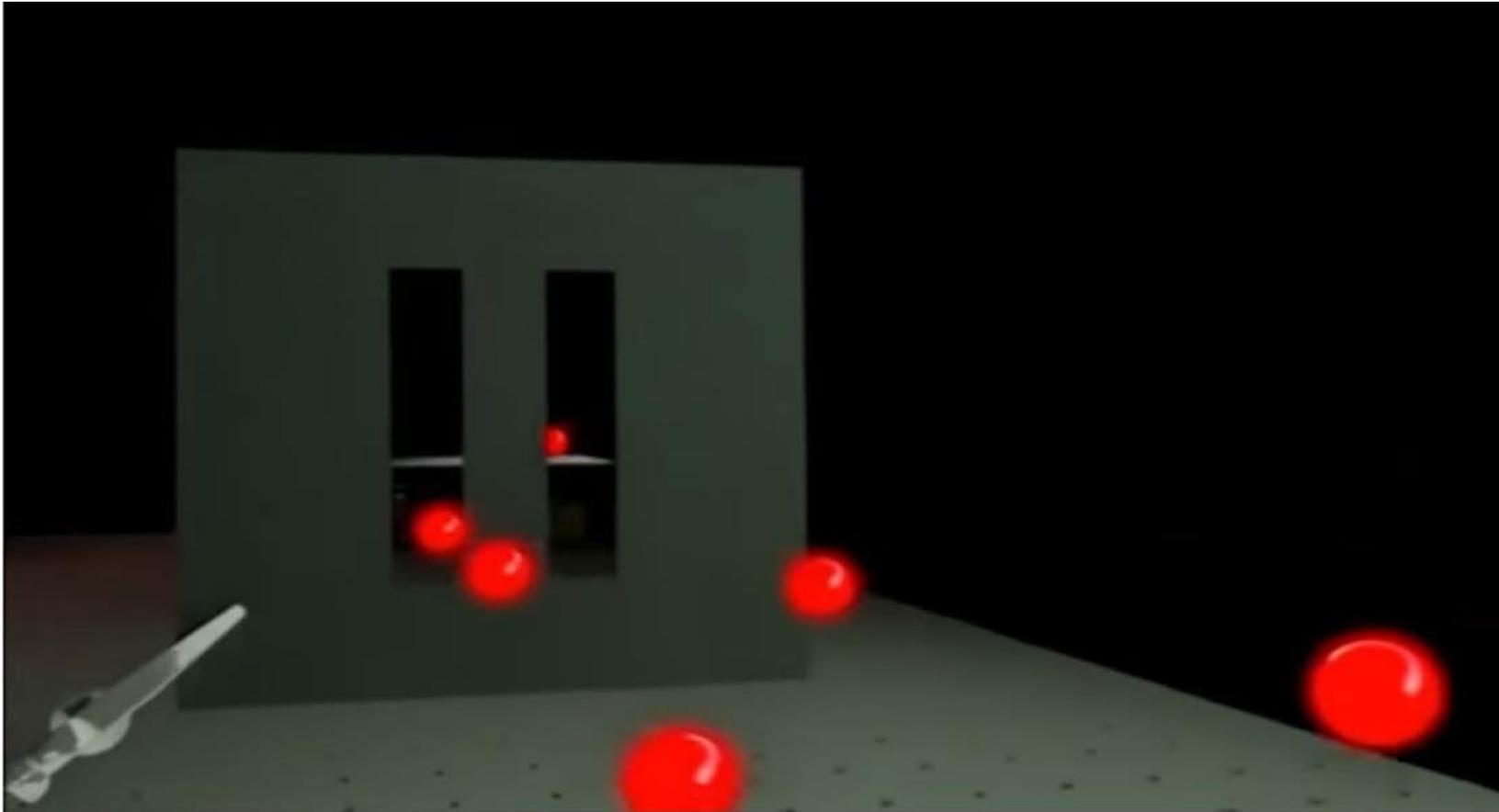
A perda de energia depende de λ (diferentemente do deslocamento Compton que não depende de λ)...quanto menor for λ maior a perda de energia

Comportamento quântico

Vamos analisar agora um fenômeno que é **absolutamente impossível de ser explicado por qualquer meio clássico** e que é o ponto central da mecânica quântica.

Nos não podemos explicar este mistério no sentido de explicar o mecanismo pelo qual ele acontece. Só podemos descrever ele e assim constatar as peculiaridades fundamentais da mecânica quântica.

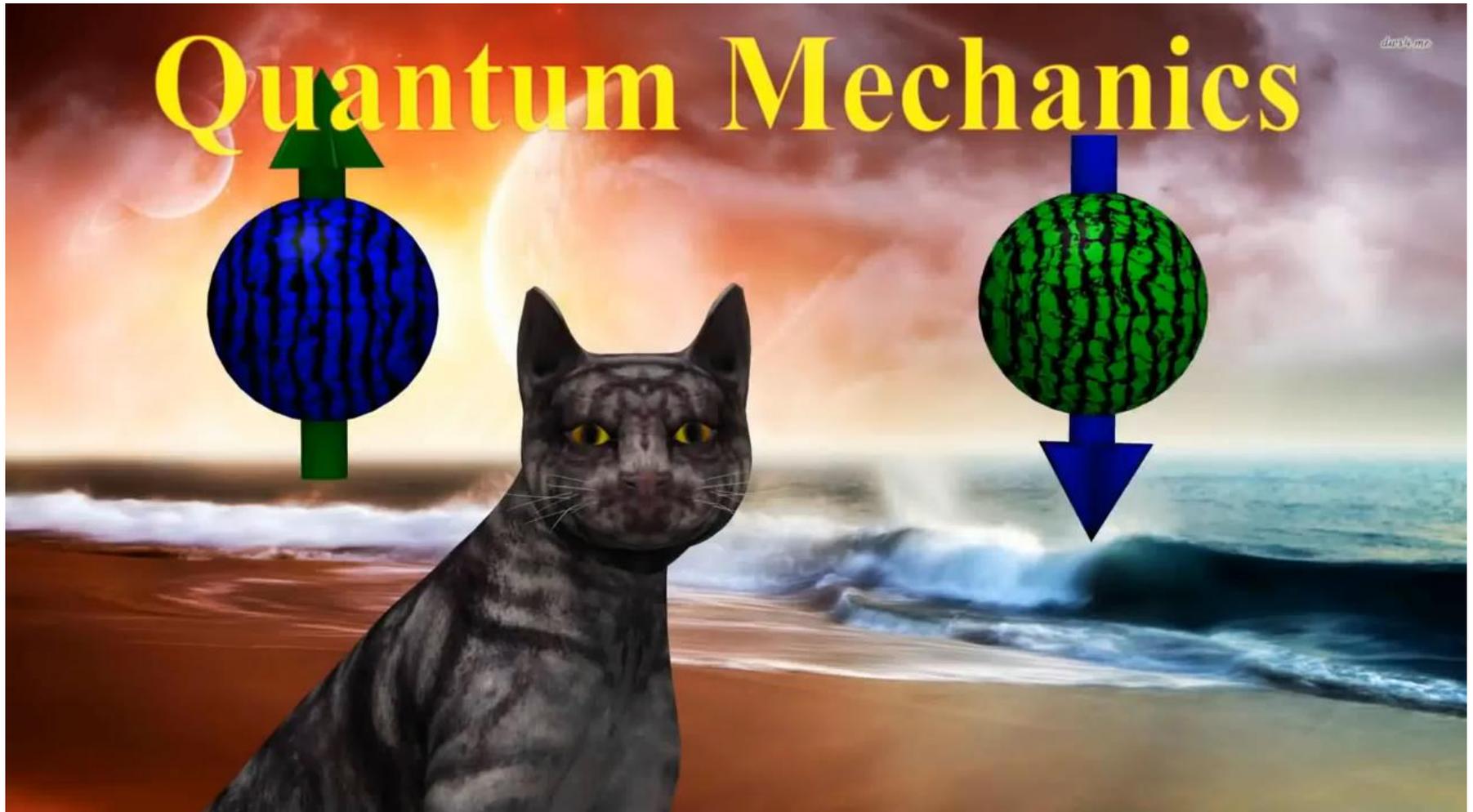
Vamos ver a experiência de interferência com bolas de gude numa fenda dupla.



Comportamento quântico



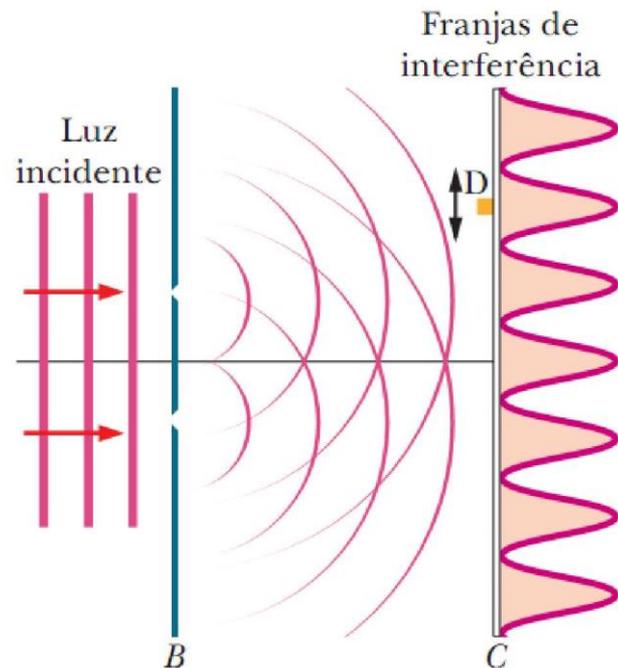
Comportamento quântico



Dualidade onda-partícula da luz

A probabilidade (por unidade de tempo) de que um fóton seja detectado em um pequeno volume com o centro em um dado ponto de uma onda luminosa é proporcional ao quadrado da amplitude do campo elétrico associado à onda no mesmo ponto.

A descrição probabilística de uma onda luminosa é outra forma de encarar a luz. De acordo com essa nova interpretação, a luz pode ser vista não só como uma onda eletromagnética, mas também como uma **onda de probabilidade**. Em outras palavras, a cada ponto de uma onda luminosa é possível atribuir uma probabilidade numérica (por unidade de tempo) de que um fóton seja detectado em um pequeno volume com o centro nesse ponto.



Um pequeno detector de fótons D colocado em um ponto da tela C produz um estalido cada vez que absorve um fóton (O padrão de interferência não é alterado pelo detector).

Dualidade onda-partícula da luz

Considere novamente o experimento de dupla fenda.

Como uma figura de interferência aparece na tela, podemos especular que cada fóton viaja da fonte até a tela como uma onda que ocupa todo o espaço entre a fonte e a tela....

...e desaparece quando o fóton é absorvido em um ponto qualquer da tela, transferindo toda a sua energia e momento para esse ponto da tela.

É impossível prever onde ocorrerá a absorção (onde será detectado o fóton) para um certo fóton emitido pela fonte,....

...mas **é possível** calcular a probabilidade de que a detecção ocorra em um determinado ponto da tela.

Como as detecções são mais prováveis nas franjas claras que aparecem na tela e menos prováveis nas franjas escuras, podemos interpretar que a onda que se propaga da fonte até a tela é uma **onda de probabilidade**, que produz na tela uma figura formada por **franjas de probabilidade**.

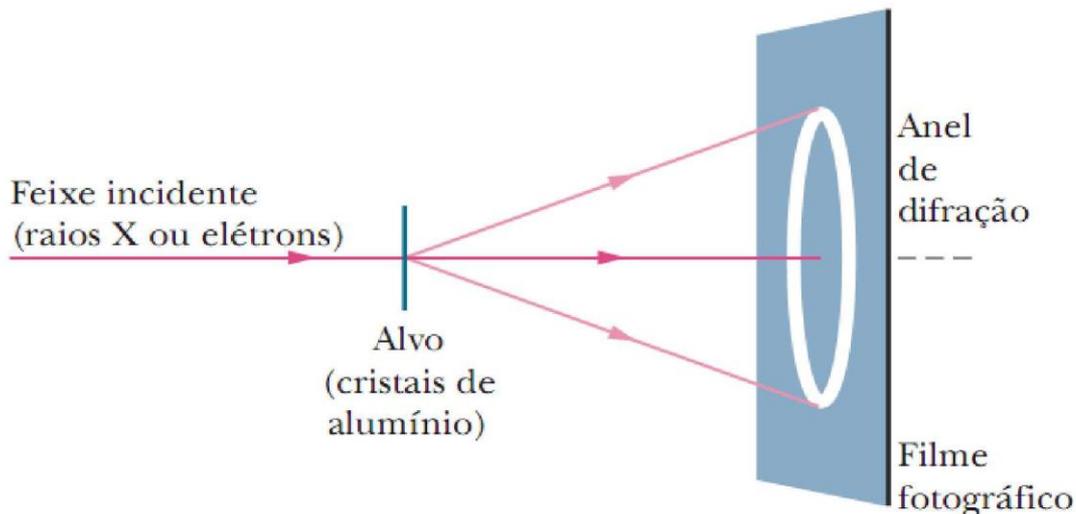
A análise de diferentes experimentos de dupla fenda levam à necessidade de concluir que: (1) a luz é gerada na forma de fótons; (2) que a luz é detectada na forma de fótons; (3) que a luz se propaga na forma de uma onda de probabilidade.

Ondas de matéria

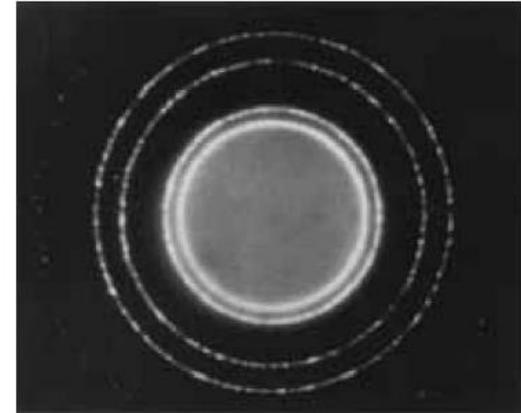
O físico francês *Luís de Broglie* teve a ideia de aplicar aos elétrons a relação $p = h/\lambda$, que até então era usada apenas para fótons.

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{comprimento de onda de de Broglie})$$

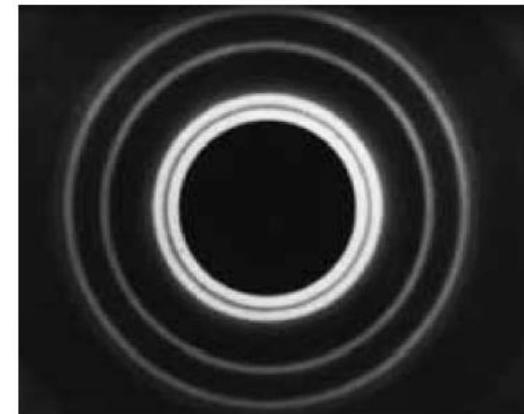
Para verificar se de fato alguma coisa é uma onda o que se faz é medir seu comprimento de onda numa experiência eminentemente ondulatória!!, por exemplo interferência ou difração, como já vimos no exemplo de elétrons numa fenda dupla! (abaixo outro exemplo no caso de difração numa fenda circular)



Raios X



Elétrons



Exemplo: Comprimento de Onda de de Broglie de um Elétron

Qual é o comprimento de onda de de Broglie de um elétron com uma energia cinética de 120 eV?

Podemos determinar o comprimento de onda de de Broglie λ do elétron usando a Eq. $p = h/\lambda$ se calcularmos primeiro o momento p do elétron.

Podemos calcular p a partir da energia cinética K do elétron.

Como a energia cinética é muito menor que a energia de repouso do elétron (511.000 eV, de acordo com $E=mc^2$), podemos usar as aproximações clássicas para o momento p (ou seja, $p=mv$) e para a energia cinética K ($K=mv^2/2$).

Para usar a relação de de Broglie, explicitamos v na equação da energia cinética e substituímos v pelo seu valor na equação do momento, obtendo

$$p = \sqrt{2mK} = \sqrt{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{kg} \cdot 120 \text{eV} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \frac{\text{J}}{\text{eV}}} = 5,91 \cdot 10^{-24} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{J s}}{5,91 \cdot 10^{-24} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}} = 1,12 \cdot 10^{-10} \text{m} = 112 \text{pm}$$

Este comprimento de onda é do tamanho de um átomo. Quanto mais energia menor o comprimento de onda.

Exemplo: Interferência entre bolas de beisebol

É possível ter interferência quando arremessamos uma bola de beisebol de 150 g a 30 m/s?

A questão é: os objetos macroscópicos podem interferir?

Segundo de Broglie sim!

Mas para ver o caráter ondulatório precisamos de um obstáculo da ordem do seu comprimento de onda...qual o comprimento de onda desta bola?

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}}{mv} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}}{0,150 \text{ kg } 35 \text{ m/s}} = 1,26 \cdot 10^{-34} \text{ m}$$

O tamanho de um átomo (com sua nuvem de elétrons) é da ordem de 10^{-10} m

O tamanho do núcleo de um átomo é da ordem de 10^{-15} m

Por isso não como perceber o comportamento ondulatório dos objetos macroscópicos...pela equação acima teriam que ter muita massa ou muita velocidade e ainda estar concentrados num espaço muito pequeno.

Vamos agora ver a que se refere essa onda associada a um objeto...a pergunta é onda de que?

Em 1801 quando Young mediou o comprimento de onda dos raios que vinham do sol não tinha a menor ideia da natureza dessas ondas, até que Maxwell (50 anos depois) identificou essas ondas como sendo E/M. **Portanto podemos sim! medir comprimentos de onda e não saber do que se trata...como é nosso caso agora...por enquanto...**

A equação de Schrödinger

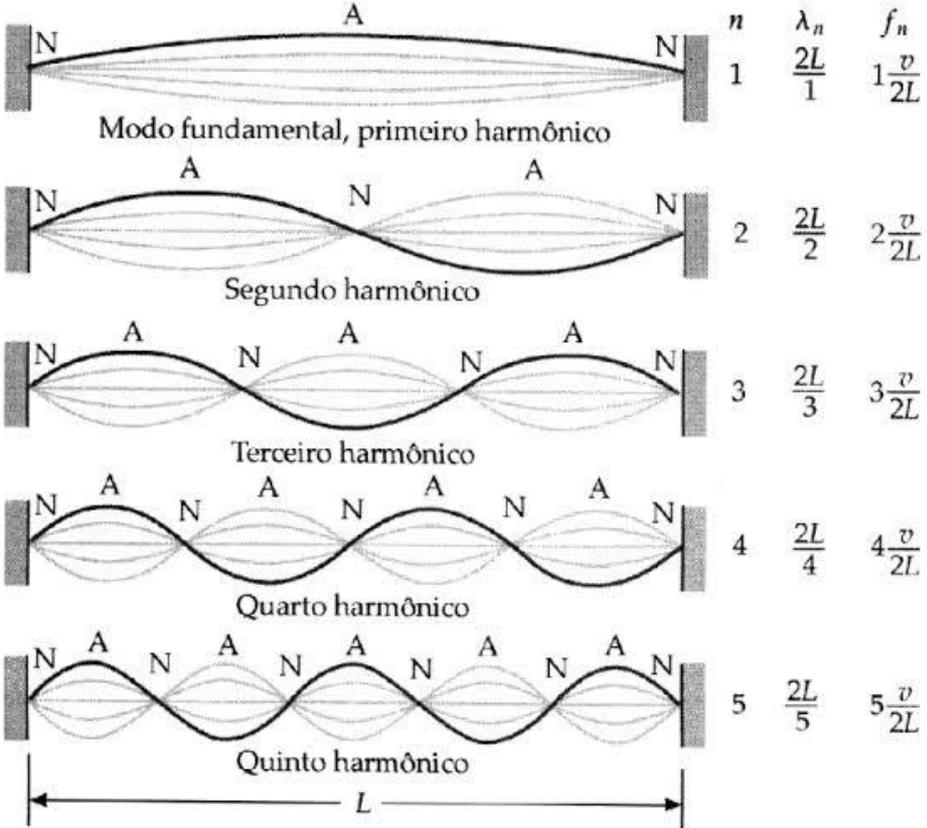
No caso das ondas E/M sabemos que o que “ondula” é o campo elétrico e o magnético, mas no caso das “ondas de matéria” de um elétron ou próton o que estaria “ondulando”?

De aqui em diante vamos chamar “**função de onda**” a essa grandeza que “ondula” no espaço e no tempo (como é sempre com as ondas!). Vamos identificar esta grandeza com a letra Ψ . Mesmo sem saber (por enquanto) o que Ψ é de fato, vamos atribuir a ela a analogia seguinte:

Ela é para uma partícula de matéria o mesmo que é a onda é para um fóton.

Como sabemos da disciplina de oscilações e ondas, as ondas podem ser confinadas em cordas fixas nos seus extremos (por exemplo) e a condição para sua existência (ondas estacionárias) era: $\lambda = 2L/n$ com $n=1,2,3,\dots$

O mesmo se aplica a fótons (e suas ondas) confinados, por exemplo entre dois espelhos para $n=1$ teremos uma distribuição do campo elétrico semelhante ao da amplitude do deslocamento para a corda



Portanto como a densidade de energia é $u = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2$...teremos que há mais fótons no centro do que nas laterais...e portanto a probabilidade de encontrar um fóton é proporcional a E^2 ...maior no centro...

E se temos um só fóton?

A equação de Schrödinger

Essa pergunta leva à conclusão de que a amplitude da onda a ela atrelada dá a probabilidade de encontrar a partícula nessa posição.

Um fato importante aqui é que: ao aceitar esta descrição, a posição do fóton é uma questão estatística...esta questão está nas raízes da mecânica quântica...é uma propriedade de todas as partículas da natureza

Evidentemente que toda esta discussão se estende às ondas de matéria, a sua função de onda Ψ .

Elétrons são confinados em átomos, nos seus orbitais, que são exatamente os locais que permitem a existência de uma partícula estacionária (que não desapareça por interferência!) Por isso os átomos tem níveis de energia discretos!

Como a função de onda dá a probabilidade de encontrar a partícula numa determinado lugar teremos que:

$$\int_0^{2\pi} \Psi^2(\theta) d\theta = 1$$

A função de onda Ψ é função do espaço e do tempo portanto é $\Psi(x,y,z,t)$... e sua dependência espacial e temporal pode ser separada da seguinte forma:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t}$$

onde ω é a frequência angular da onda de matéria

A equação de Schrödinger

Assim se uma onda de matéria chega num detector de partículas a probabilidade de que a partícula seja detectada num determinado intervalo de tempo é proporcional ao módulo da dependência espacial ao quadrado, na posição do detector:

$$|\psi|^2$$

Por isso a grandeza $|\psi|^2$ é chamada de densidade de probabilidade que é a probabilidade por unidade de tempo de que uma partícula seja encontrada num pequeno volume com centro em um dado ponto (exatamente no ponto onde foi calculado o valor de $|\psi|^2$)

As ondas de matéria são descritas pela **equação de Schrödinger**.

Suponha que uma partícula esteja se propagando na direção x (unidimensional) numa região na qual a energia potencial (associada às forças que agem sobre a partícula) seja dada por uma função $U(x)$. Neste caso especial, a equação de Schrödinger pode ser escrita na forma:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x)]\psi = 0$$

Se $U(x)=0$ (partícula livre) :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} \left[\frac{mv^2}{2} \right] \psi = 0 \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(2\pi \frac{p}{h} \right)^2 \psi = 0$$

Introduzindo o conceito de comprimento de onda de de Broglie e a definição de número de onda k teremos que esta equação se transforma em:

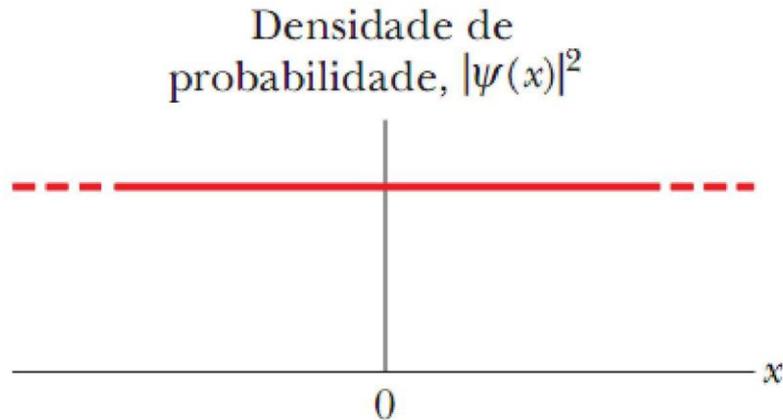
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad \psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Vamos aplicar esta equação a uma partícula livre que se desloca no sentido positivo de x

A equação de Schrödinger

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Como se move para a direita fazemos $B=0$ e chamamos a constante A de ψ_0



$$\psi = \psi_0 e^{ikx}$$

Calculamos a densidade de probabilidade...

$$|\psi|^2 = |\psi_0 e^{ikx}|^2 = \psi_0^2 |e^{ikx}|^2$$

Lembrando: $|e^{ikx}|^2 = (e^{ikx})(e^{ikx})^* = e^{ikx} e^{-ikx} = e^{ikx-ikx} = e^0 = 1$

O resultado é: $|\psi|^2 = \psi_0^2$ Que é uma constante!, o que quer dizer?

Que a probabilidade de encontrar esta partícula livre em qualquer lugar do universo é a mesma (ao longo de toda sua trajetória).

Princípio de Indeterminação de Heisenberg

De acordo com o *Princípio de Indeterminação de Heisenberg*, não é possível medir simultaneamente a posição e o momento de uma partícula com precisão ilimitada.

Nas equações abaixo, Δx e Δp_x representam as indeterminações nas medidas das componentes x de r e p ; as interpretações das outras duas equações são análogas. Mesmo com os melhores instrumentos de medida que a tecnologia é capaz de fornecer, o produto da indeterminação da posição pela indeterminação do momento de uma partícula qualquer jamais será menor que h .

$$\Delta z \Delta P_z \approx \hbar$$

$$\Delta x \Delta P_x \approx \hbar$$

$$\Delta y \Delta P_y \approx \hbar$$

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar$$

Exemplo: O Princípio de Incerteza — Posição e Momento

Um elétron está se movendo ao longo do eixo x com uma velocidade de $2,05 \times 10^6$ m/s, medida com uma precisão de 0,50%. Qual é a menor indeterminação (de acordo com o princípio da indeterminação da teoria quântica) com a qual pode ser medida simultaneamente a posição do elétron no eixo x ?

A menor incerteza permitida pela teoria quântica é dada pelo princípio de indeterminação de Heisenberg.

Como a partícula está se movendo ao longo do eixo x , precisamos considerar apenas as componentes do momento e da posição em relação a esse eixo.

Como estamos interessados na menor indeterminação possível, substituímos o sinal de desigualdade pelo sinal de igualdade e escrevemos $\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar$.

Para calcular a indeterminação Δp_x do momento, precisamos determinar a componente do momento ao longo do eixo x , que é p_x .

Como a velocidade v do elétron é muito menor que a velocidade da luz, podemos calcular p_x usando a expressão clássica para o momento em vez da expressão relativística. O resultado é o seguinte:

$$p_x = mv_x = (9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(2,05 \times 10^6 \text{ m/s}) = 1,87 \times 10^{-24} \text{ kg m/s}.$$

Exemplo: O Princípio de Incerteza — Posição e Momento

De acordo com o enunciado, a indeterminação na velocidade é 0,50% da velocidade medida. Como p_x é diretamente proporcional a velocidade, a indeterminação Δp_x do momento é igual a 0,50% do valor do momento:

$$\Delta p_x = (0,0050) p_x = (0,0050) (1,87 \times 10^{-24} \text{ kg m/s}) = 9,35 \times 10^{-27} \text{ kg m/s}.$$

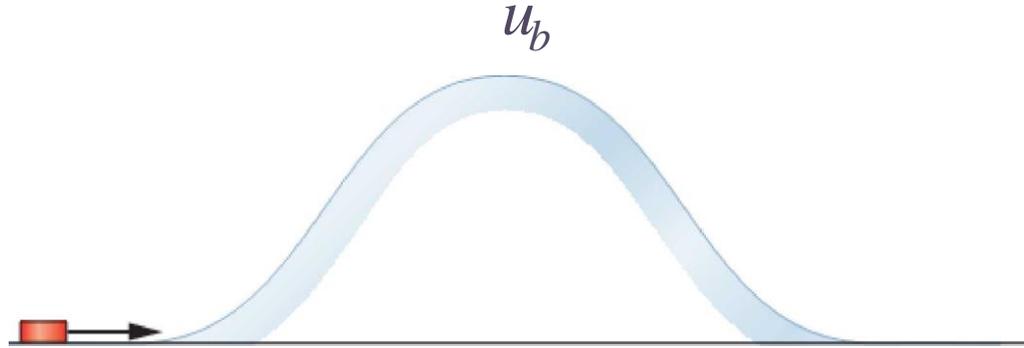
Assim, de acordo com o princípio da indeterminação,

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p_x} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J s} / 2\pi}{9,35 \times 10^{-27} \text{ kg m/s}} = 1,13 \times 10^{-8} \text{ m} \approx 11 \text{ nm}$$

O que corresponde a cerca de 100 diâmetros atômicos.

Dada a precisão com a qual a velocidade do elétron foi medida, não faz sentido tentar medir a posição do elétron com uma precisão maior que esse valor.

Efeito Túnel



Analogia do trenó

Quando o trenó começa a subir a colina, parte da energia cinética K se transforma em energia potencial gravitacional U .

Quando o trenó chega ao alto da colina, a energia potencial é U_b .

Isso significa que o trenó só conseguira chegar ao outro lado da colina se a energia mecânica inicial for maior que U_b .

Se $E < U_b$, o trenó para de subir antes de chegar ao alto da colina. Dizemos que a colina se comporta como uma **barreira de energia potencial** ou, simplesmente, como uma **barreira de potencial**.

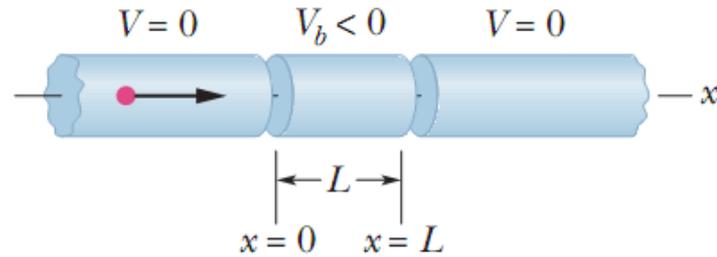
Efeito Túnel

A figura ao lado mostra uma barreira de potencial para um elétron não relativístico que se move no interior de um fio ideal, de espessura desprezível.

O elétron, cuja energia mecânica é E , se aproxima de uma região (a barreira) na qual o potencial elétrico V_b é negativo. Como o elétron possui carga negativa, o elétron tem uma energia potencial positiva $U_b (= qV_b)$ nessa região (Figura abaixo).

Se $E > U_b$, esperamos que o elétron consiga passar pela região da barreira, caso contrario seria repellido.

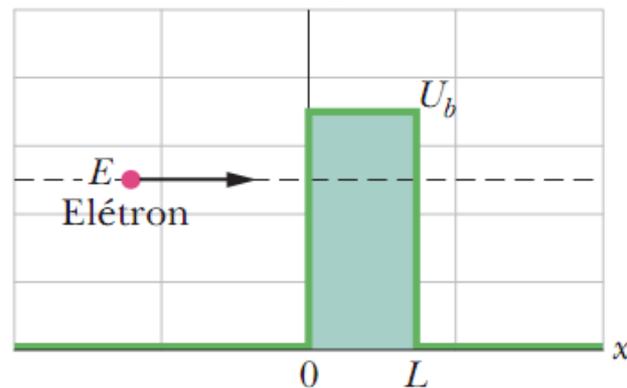
Será que o elétron pode passar pela região de potencial negativo?



Classicamente, o elétron não tem energia suficiente para ultrapassar a barreira.

A linha tracejada representa a energia mecânica E do elétron, que é a mesma para qualquer valor de $x < 0$. A linha cheia representa a energia potencial elétrica U do elétron em função de x , supondo que o elétron pode estar em qualquer ponto do eixo x . A parte diferente de zero da linha que representa a energia potencial (barreira de potencial) tem altura U_b e largura L .

Energia



Efeito Túnel

Quando $E < U_b$, algo surpreendente acontece com o elétron.

Como o elétron é uma onda de matéria, existe uma probabilidade finita de que atravesse a barreira e apareça do outro lado, movendo-se para a direita com energia E , como se nada tivesse acontecido na região onde $0 \leq x \leq L$.

É o chamado **efeito túnel**.

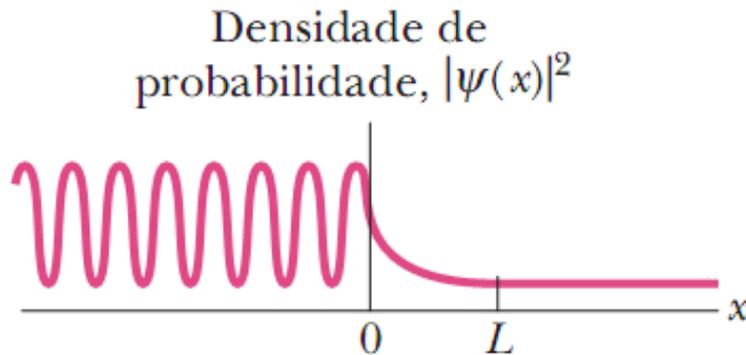


Gráfico da densidade de probabilidade da onda de matéria associada ao elétron na situação do slide anterior.; A densidade de probabilidade é diferente de zero à direita da barreira de potencial

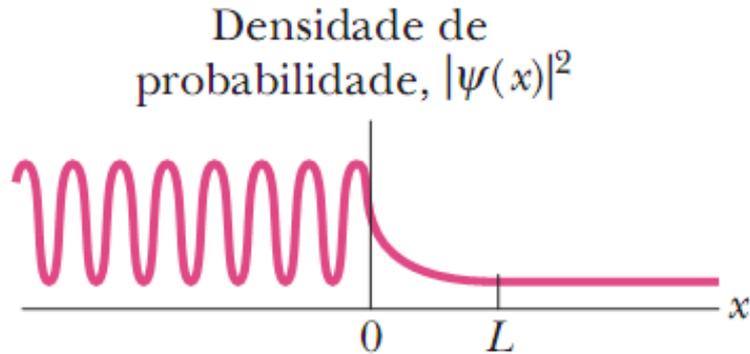
A função de onda $\Psi(x)$ que descreve o movimento do elétron, pode ser obtida resolvendo separadamente a equação de Schroedinger em três regiões:

- (1) à esquerda da barreira
- (2) no interior da barreira
- (3) à direita da barreira.

As constantes que aparecem nas soluções devem ser escolhidas de tal forma que a função $\Psi(x)$ e sua derivada primeira em relação a x sejam contínuas em $x = 0$ e $x = L$.

A densidade de probabilidade pode ser obtida calculando o quadrado do valor absoluto de $\Psi(x)$

Efeito Túnel



□ No interior da barreira, a densidade de probabilidade diminui exponencialmente com x .

□ À direita da barreira, a densidade de probabilidade tem um valor pequeno, que permanece constante para qualquer valor de $x > L$.

□ O coeficiente de transmissão T de uma barreira de potencial é definido como a fração de elétrons que conseguem atravessá-la.

O coeficiente de transmissão é dado aproximadamente por

$$T = e^{-2bL}$$

na qual

$$b = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(U_b - E)}{h^2}}$$

Efeito Túnel

Exercício

Um elétron, como o do caso anterior, com energia E de 5,1 eV incide em uma barreira de potencial elétrico de altura $U_b = 6,8$ eV e largura 750 pm.

(a) Qual a probabilidade aproximada de que o elétron atravesse a barreira?

O coeficiente de transmissão é dado aproximadamente por

$$T = e^{-2bL}$$
$$b = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(U_b - E)}{h^2}}$$

Cálculos O numerador da fração é

$$(8\pi^2)(9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(6,8 \text{ eV} - 5,1 \text{ eV})$$
$$\times (1,60 \times 10^{-19} \text{ J/eV}) = 1,956 \times 10^{-47} \text{ J} \cdot \text{kg}.$$

$$\text{Assim, } b = \sqrt{\frac{1,956 \times 10^{-47} \text{ J} \cdot \text{kg}}{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}} = 6,67 \times 10^9 \text{ m}^{-1}.$$

A grandeza (adimensional) $2bL$ é, portanto,

$$2bL = (2)(6,67 \times 10^9 \text{ m}^{-1})(750 \times 10^{-12} \text{ m}) = 10,0$$

O coeficiente T de transmissão será:

Efeito Túnel

$$T \approx e^{-2bL} = e^{-10,0} = 45 \times 10^{-6}. \quad (\text{Resposta})$$

Assim, para cada milhão de elétrons que incidem na barreira, 45, em média, conseguem atravessá-la, aparecendo do outro lado da barreira com a energia inicial de 5,1 eV. (A transmissão através da barreira não altera a energia dos elétrons.)

(b) Qual é a probabilidade aproximada de que um próton com a mesma energia de 5,1 eV consiga atravessar a barreira?

Raciocínio O coeficiente de transmissão T (e, portanto, a probabilidade de transmissão) depende da massa da partícula. Na verdade, como a massa m é um dos fatores do expoente de e na equação de T , a probabilidade de transmissão é muito sensível à massa da partícula. Desta vez, a massa é a massa de um próton ($1,67 \times 10^{-27}$ kg), que é muito maior que a massa do elétron do item (a). Refazendo os cálculos do item (a) com a massa do elétron substituída pela massa do próton, encontramos $T \approx 10^{-186}$. Embora este valor não seja exatamente zero, é tão pequeno que podemos considerá-lo nulo para todos os efeitos práticos. No caso de partículas com massa maior que a do próton e a mesma energia de 5,1 eV, a probabilidade de transmissão é ainda menor.