* Tradução e adaptação livre das aulas do Professor Rick Trebino em: www.physics.gatech.edu/frog

Unidade 2 - Aula 3

Propriedades da Onda de Matéria*

3.1 Espalhamento de Raio X
3.2 Ondas de De Broglie
3.3 Espalhamento (Difração) de Elétrons
3.4 Movimento Ondulatório
3.5 Ondas ou Partículas?
3.6 Princípio de Incerteza
3.7 Probabilidade, Funções de Onda, e a Interpretação de Copenhague
3.8 Partícula numa caixa

Louis de Broglie
(1892-1987)

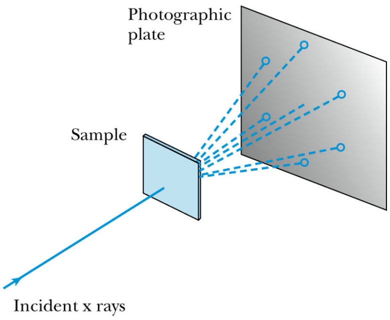
I thus arrived at the overall concept which guided my studies: for both matter and radiations, light in particular, it is necessary to introduce the corpuscle concept and the wave concept at the same time.

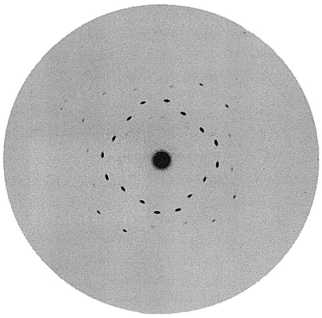
- Louis de Broglie, 1929

3.1: Espalhamento de Raio X

Max von Laue sugeriu que se os raios X fossem uma forma de radiação eletromagnética, efeitos de interferência deveriam ser observados.

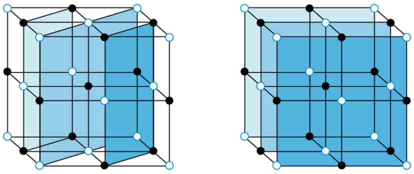
Cristais atuam como redes de difração tri-dimensional, espalhando as ondas e produzindo efeitos de interferência observáveis.





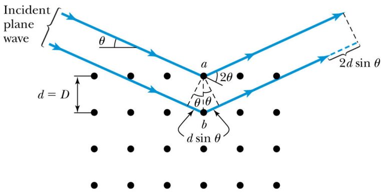
Lei de Bragg

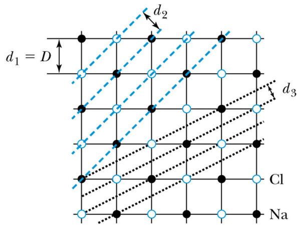
William Lawrence Bragg interpretou o espalhamento de raios X como se fosse uma reflexão do feixe incidente num plano formado pelos átomos de um cristal. Existem duas condições para se ter interferência construtiva dos raios X espalhados:



1) O ângulo de incidência deve ser igual ao ângulo de “reflexão”.
2) A diferença no percurso dos feixes deve ser igual a um número inteiro de comprimentos de onda.

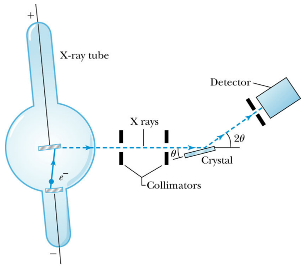
Lei de Bragg : $n\lambda = 2d \sin\theta$ (n = inteiro)



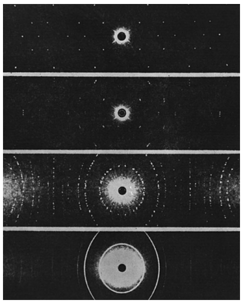


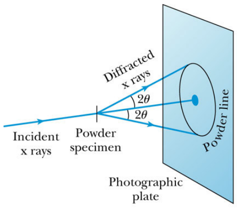
O espectrômetro de Bragg

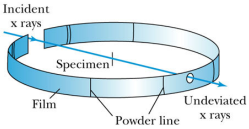
O espectrômetro de Bragg mede o ângulo de espalhamento dos raios X pelo cristal. A intensidade do feixe “refletido” (difratado) é determinada como função do ângulo de espalhamento girando o cristal e o detector.



Quando um feixe de raios X passam por um pó cristalino, os pontos se transformam em anéis.







3.2: Ondas de De Broglie

Na sua tese em 1923, o príncipe Louis V. de Broglie sugeriu que partículas com massa deveriam ter propriedades de onda, semelhantes a radiação eletromagnética.

A energia podia ser escrita como:

$$h\cancel{\nu} = pc = p\lambda\cancel{\nu}$$

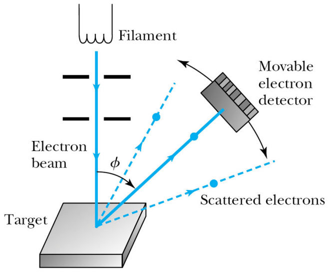
O comprimento de onda da matéria foi chamado então de **comprimento de onda de De Broglie**

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

Se a onda de luz pode se comportar como uma partícula (fóton) porque uma partícula com massa não pode se comportar como onda?

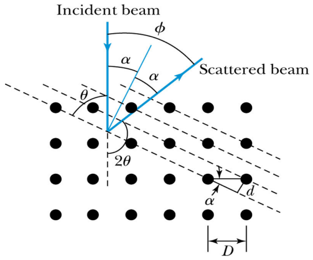
Louis V. de Broglie
(1892-1987)

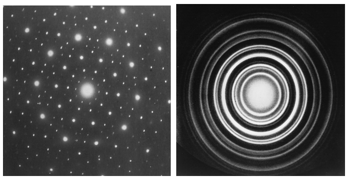
3.3: Espalhamento de elétrons



George P. Thomson (1892–1975), filho de J. J. Thomson, fez experimentos de transmissão onde observou difração de elétrons em diversos materiais, como celulose, ouro, alumínio, e platina. Uma amostra policristalina de SnO_2, aleatoriamente orientada, produziu anéis de interferência.

Em 1925, Davisson e Germer observaram experimentalmente que **elétrons** eram difratados (muito parecido com os raios X) em cristais de níquel





Condição da Quantização de Bohr é revista

Um das suposições de Bohr no seu modelo para o átomo de hidrogênio foi de que o momento angular de elétron em um estado estacionário era $n\hbar$.

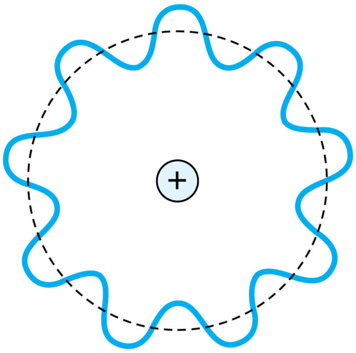
Isto mostrou ser equivalente a dizer que a órbita do elétron podia ser escrita como um número inteiro

de comprimentos de onda de De Broglie:

Comprimento de onda de De Broglie para o elétron

$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{p}$$

Circunferência



Multiplicando por $p/2\pi$, encontramos o momento angular:

$$L = rp = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$

3.4: Movimento ondulatório

Ondas de matéria de De Broglie deveriam ser descritas da mesma maneira que as ondas de luz. A onda de matéria deveria ser a solução da equação de onda assim como as ondas eletromagnéticas eram solução desta equação*:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0$$

* Elas serão na verdade diferentes, mas em alguns casos as soluções são as mesmas.

Com a solução:

$$\Psi(x,t) \;=\; A \exp[i(kx - \omega t - \theta)]$$

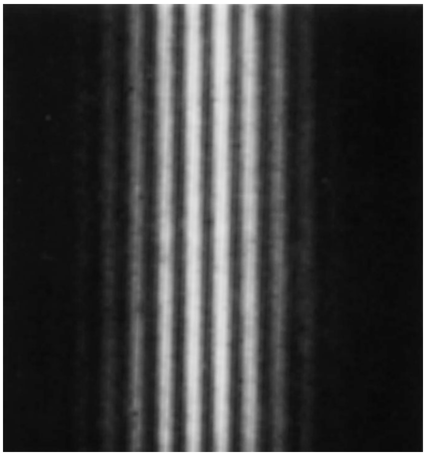
Definindo o número de onda k e a freqüência angular ω como:

$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{e} \quad \omega = \frac{2\pi}{T}$$

Experimento de Fenda Dupla para o Elétron

C. Jönsson em Tübingen, Alemanha, mostrou em 1961 efeitos de interferência num experimento de fenda dupla, para **elétrons**, construindo fendas muito estreitas e usando distâncias relativamente grandes entre estas fendas e a tela de observação.

Este experimento demonstrou que tanto a luz (ondas) como os elétrons (partículas) tem o mesmo comportamento.



Experimento de Fenda Dupla Dr. Quantum:

Solução para a dualidade onda-partícula

É perturbador saber que tudo pode ser descrito como onda e partícula, mas isto pode ser um pouco menos estranho se pensarmos em termos do:

Princípio da Complementaridade de Bohr: Não é possível descrever quantidades físicas observáveis, **simultaneamente,** em termos de partículas e ondas.

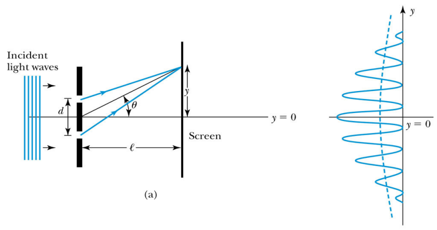
Em outras palavras:

Quando estamos fazendo uma medida, usamos a descrição de partícula, mas quando não estivermos medindo, usamos a descrição de onda!

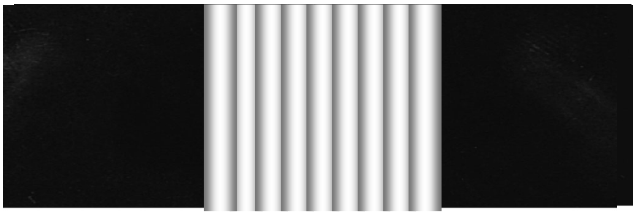
Ou ainda:

Quando estamos olhando, quantidades fundamentais são partículas, quando não estivermos olhando, elas são ondas!!!

3.5: Ondas ou Partículas?



Diminuindo a intensidade da luz no experimento de duas fendas de Young resulta em projetar na tela alguns fótons. Já que fótons são partículas, cada uma pode passar por apenas uma fenda, assim, para intensidades muito baixas, a distribuição dos fótons na tela deveria ser a mesma observada para fenda única.

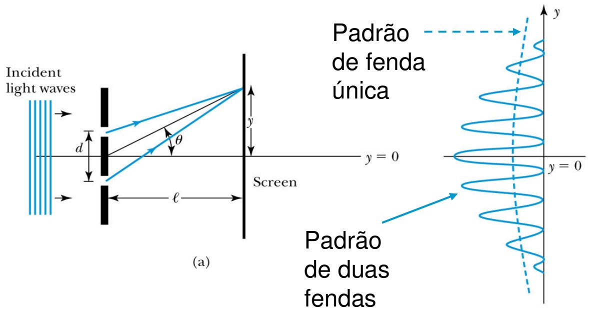


(a) 20 counts

Cada fóton na verdade passa em **ambas** fendas!

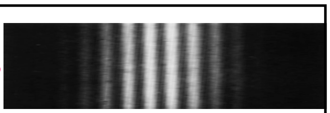
Você pode dizer através de qualç fenda o fóton passou no experimento de fenda dupla de Young?

Quando você bloquear uma fenda, o padrão de fenda única aparece.



Para baixas intensidades, o experimento de Young mostra que a luz se propaga como onda e é detectada como partícula.

Como fica para elétrons?? Através de qual fenda o elétron passa?



Ilumine uma fenda dupla e observe com um microscópio. Depois que o elétron passa através de uma fenda, luz é refletida pela fenda; observando a luz, podemos determinar através de qual fenda o elétron passou!

O momento do fóton é: $$p_{\mathrm{ph}} = \frac{h}{\lambda_{\mathrm{ph}}} > \frac{h}{d} \longleftarrow$$ $\lambda_{ph} < d$ para poder distinguir as fendas.

O momento do elétron é : $$p_{\mathrm{el}} = \frac{h}{\lambda_{\mathrm{el}}} \sim \frac{h}{d} \longleftarrow$$ Difração é significativa somente quando a abertura é ~ do comprimento de onda.

O momento dos fótons usado para determinar através de qual fenda o elétron passou é suficiente para modificar fortemente o momento do próprio elétron — mudando a direção do elétron! A tentativa de identificar através de qual fenda o elétron passou irá modificar o padrão de interferência! Elétrons também se propagam como ondas e são detectados como partículas.

3.6: Princípio de Incerteza: Incerteza na Energia

A incerteza na energia de um pacote de ondas é dado por:

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

E combinando com:

$$\Delta\omega\ \Delta t = \frac{\Delta E}{\hbar}\Delta t = \frac{1}{2}$$

Princípio de incerteza para tempo-energia:

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

Princípio de Incerteza para o Momento

A mesma matemática relaciona x e k: $\boxed{\Delta k\ \Delta x \geq ½}$

Assim é também impossível medir simultaneamente os valores precisos de k e x para uma onda.

Agora vamos escrever o momento em termos de k:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi / k} = (h/2\pi)k \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{p = \hbar k}$$

Deste modo a incerteza no momento é: $\Delta p = \hbar\ \Delta k$

Multiplicando $\Delta k\ \Delta x \geq ½$ por $\hbar$: $\hbar\, \Delta k\ \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$

Temos o **Princípio de Incerteza de Heisenberg** : $\boxed{\Delta p_x\ \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}}$

Como pensar sobre a Incerteza

O ato de fazer uma medida perturba a outra medida!

- Medidas precisas de tempo perturbam medidas de energia.
- Medidas precisas de posição perturbam as medidas de momento.

<u>O automóvel de Heisenberg</u>: Quando se olha para o medidor de velocidade (velocidade precisa), ficamos perdidos (incerteza na posição é infinita) !!!

Δv = *zero* $\rightarrow$ *valor preciso de v*

$\Delta p\ \Delta x \geq \hbar/2 \rightarrow m\Delta v \Delta x \geq \hbar/2$

$\downarrow$

$\Delta x \geq \hbar/(2m\Delta v) \longrightarrow \Delta x \geq \infty$

Energia Cinética Mínima

Já que nós estamos sempre incertos quanto a posição exata, $\Delta x = \ell$, de uma partícula, por exemplo, um elétron em algum lugar no átomo, então esta partícula não pode ter energia cinética zero:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{\ell}$$

O valor médio de uma quantidade positiva deve sempre exceder a sua incerteza:

$$p_{ave} \geq \Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{\ell}$$

assim:

$$K_{ave} = \frac{p_{ave}^2}{2m} \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m\ell}$$

3.7: Probabilidade, Função de Onda, e a interpretação de Copenhague

Ok, se partículas são também ondas, o que é a ondulação? Probabilidade

A função de onda determina a probabilidade de encontrar a partícula numa determinada posição no espaço num dado tempo:

$$P(x) = |\Psi(x)|^2$$

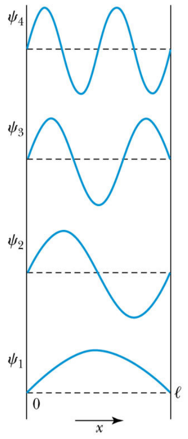
A probabilidade de uma partícula estar entre duas posições x_1 and x_2 é dada por:

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 \, dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 \, dx = 1$$

A probabilidade total de encontrar a partícula em qualquer lugar entre -∞ e ∞ é 1. Esta condição aplicada na função de onda é chamada de normalização.

3.8: Partícula numa Caixa



Uma partícula (onda) de massa m está numa caixa unidimensional de largura ℓ.

A caixa estabelece condições de contorno para a onda:

- a função de onda deve ser zero nas paredes da caixa e fora da caixa.

Para que a probabilidade seja zero nas paredes da caixa, devemos ter um número inteiro de metade de comprimentos de onda dentro da caixa:

$$\frac{n\lambda}{2} = \ell \quad \text{or} \quad \lambda_n = \frac{2\ell}{n} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

A energia: $$E = K.E. = \tfrac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

Os possíveis comprimentos de onda são quantizados e portanto, as energias também:

$$E_n = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{n}{2\ell}\right)^2 = n^2\frac{h^2}{8m\ell^2} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

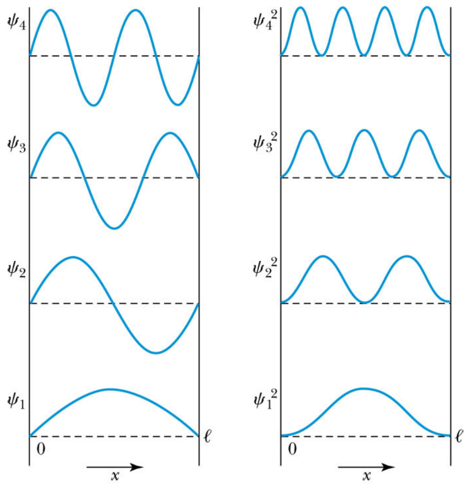
Probabilidade da partícula vs. posição

Note que $E_0 = 0$ **não** é um possível nível de energia!

O conceito de níveis de energia, discutido pela primeira vez por Bohr, no seu modelo, surgiu naturalmente tratando as partículas como onda!

A probabilidade de observar a partícula entre x e $x + dx$ em cada estado é

$$P_n\, dx \propto \left|\Psi_n(x)\right|^2 dx$$



Interpretação de Copenhague

Niels Bohr e Werner Heisenberg, quando colaboravam em Copenhague, por volta de 1927, formularam uma interpretação da Mecânica Quântica. Eles estenderam a interpretação probabilística da função de onda, proposta por Max Born. Esta interpretação tentou responder algumas questões como a dualidade onda-partícula e o problema da medida.

- **Princípio de incerteza de Heisenberg**
- **Princípio de complementaridade de Bohr**
- **Interpretação estatística de Born, baseada em probabilidades determinadas pela função de onda**

Juntos estes três conceitos formam uma interpretação lógica do significado físico da teoria quântica. Na interpretação de Copenhague **a física descreve somente os resultados das medidas !!!**