5.1 Postulados de de Broglie

Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (1892-1987) foi um príncipe francês com formação básica em história. Por volta de 1911, incentivado principalmente por discussões com seu irmão Maurice - físico - a respeito das novas idéias emergentes na física, como as de Plank e de Einstein para o fóton, Louis de Broglie iniciou seus estudos em física. Logo o teve que interromper, por causa da I Guerra Mundial, quando serviu, de 1914 a 1918 na divisão de telegrafia do exército francês. Após a guerra reiniciou seus estudos e em 1924 apresentou sua tese para obtenção do título de Doutor, intitulada "Pesquisas sobre a Teoria dos Quanta", onde introduziu idéias ainda mais fantásticas para as propriedades dos sistemas microscópicos. Essas novas idéias foram fundamentais para o desenvolvimento, dois anos depois, de uma teoria mais formal, chamada mecânica ondulatória ou mecânica quântica.

A hipótese básica de de Broglie se relaciona com uma simetria que poderia estar implícita nas propriedades de dualidade introduzidas por Planck e principalmente por Einstein para a radiação eletromagnética. Neste caso, a luz, que apresenta propriedades claras de ondas (produzindo fenômenos como difração e interferência) tinha também propriedades que só poderiam ser interpretadas se ela fosse tratada como um conjunto de corpúsculos, os fótons. As relações entre as propriedades ondulatórias da luz (freqüência, comprimento de onda) com as de corpúsculos (energia, momento linear) são dadas pelas relações bem conhecidas, introduzidas por Einstein:

$$E = h\nu; \ p = \frac{h}{\lambda}$$

Louis de Broglie postulou que por uma questão de simetria, a matéria, que tem características básicas de corpúsculos, deveria também apresentar, em certas circunstâncias, características ondulatórias. As relações que permitem obter a freqüência e o comprimento de onda associados a uma partícula são dadas pelas chamadas relações de de Broglie:

$$\nu = \frac{E}{h}; \ \lambda = \frac{h}{p}$$

De Broglie utilizou, nas aplicações dessas formulas, expressões relativísticas para a energia e o momento da partícula. Aqui entretanto, utilizaremos expressões clássicas, o que

não altera o espírito das conclusões. Embora não existisse, até o momento da apresentação dessas idéias, nenhuma evidência de comportamento ondulatório da matéria, as idéias de de Broglie tiveram rápida divulgação pelos novos e inéditos conceitos introduzidos. Em seu trabalho original, de Broglie, apresentando evidências de suas idéias, aplicou os conceitos acima no modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio. Notou que a condição de Bohr para a quantização do momento angular, utilizada agora com as novas idéias, correspondiam à condição de ondas estacionárias para as órbitas eletrônicas:

$$mvr = n\hbar = \frac{nh}{2\pi}$$
$$2\pi r = \frac{nh}{mv} = \frac{nh}{p}$$

usando $p = h/\lambda$ e $S = 2\pi r$ para o perímetro da órbita, temos a relação:

$$n\lambda=S$$

que é a condição para uma onda estacioária, como visto na figura 5.1.



Utilizando as relações de de Broglie, podemos calcular o comprimento de onda associado a um elétron com energia E. Supondo a energia não muito grande, de modo que não precisamos utilizar as relações relativísticas, temos:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Para E=100 eV, por exemplo, temos $\lambda = 1.2$ Å. Vemos portanto que elétrons de baixa energia têm comprimento de onda parecidos com o de raios-X típicos. Isso sugere que as



5.1 Postulados de de Broglie

3

propriedades ondulatórias dos elétrons possam ser observadas em situações semelhantes àquelas em que os efeitos de difração e interferência foram observados com uso de raios-X, ou seja em cristais. Alguns anos depois, em 1927, essas idéias foram confirmadas em experimentos realizados independentemente por Davisson e Germer nos Estados Unidos e por G. Thomson na Escócia. Fazendo um feixe de elétrons acelerados incidir num mono cristal como visto na figura 5.2, observa-se uma distribuição angular dos elétrons espalhados. Essa distribuição, mostrada na figura 5.2, só pode ser interpretada se pensarmos num processo de difração de Bragg, como a observada para raios-X (ver figura 3.3).



Figura 5.2: Diagrama esquemático do equipamento utilizado por Davisson e Germer para estudo da difração de um feixe de elétrons por um cristal.

Outro processo de difração já utilizado na época com raios-X, a chamada difração de Debye-Scherrer, onde um feixe de raios-X incide numa folha fina de um material policristalino. Observa-se então a imagem formada pela difração em um filme fotográfico colocado em ângulos dianteiros, conforme se vê na figura 5.3. A mesma experiência pode ser repetida utilizando-se um feixe de elétrons ao invés de raios-X, observando-se o mesmo tipo de padrão, conforme visto na figura 5.3. Experimento semelhante foi realizado por George P. Thomson, que juntamente com Clinton J. Davisson recebeu o prêmio Nobel de física em 1937, por essas descobertas (interessante notar que o pai de G. Thomson, J.J. Thomson, havia ganho o prêmio Nobel de 1906 por ter descoberto o elétron, caracterizado como uma partícula, enquanto que o filho o ganhou por mostrar que o elétron é uma onda!).

Posteriormente foram realizados outros experimentos, com feixes, de prótons, nêutrons e mesmo átomos, todos apresentando o mesmo fenômeno de difração, mostrando que as relações de de Broglie são universais.



Figura 5.3: Difração de um feixe de elétrons por uma folha fina de Au (direita) comparado com a difração produzida por raios-X (esquerda).

Antes de prosseguir com as conseqüências dos postulados de de Broglie, vamos recordar algumas propriedades gerais das ondas, que serão de grande utilidade no desenvolvimento posterior da teoria quântica.

Ondas são entidades bastante conhecidas de todos. Talvez a imagem mais familiar seja a das ondas produzidas após se lançar uma pedra num lago de águas calmas. A propagação de um pulso em uma corda esticada é um outro exemplo onde podemos visualizar algumas características das ondas. Outros tipos de ondas são menos evidentes do ponto de vista sensorial, como as ondas sonoras e as eletromagnéticas. Uma característica fundamental das ondas é que elas podem transportar energia de um ponto a outro, sem que haja no entanto transporte de matéria. Ondas eletromagnéticas, por exemplo, não necessitam nem de um meio material para sua propagação, como é o caso dos outros tipos de onda mencionados acima. Uma onda (vamos nos limitar a descrever ondas em uma dimensão) é descrita por uma função chamada função de onda, $\Psi(x,t)$, que é solução da equação de onda:

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

onde v é chamada velocidade de fase da onda. A equação acima pode ser obtida aplicandose as leis de Newton a um segmento de corda esticado no qual se produziu um pulso $(v = \sqrt{T/\mu} \text{ onde } T$ é a tensão na corda e μ a densidade linear). Analogamente, utilizandose as leis dos gases juntamente com a segunda lei de Newton, obtém-se equação idêntica para as ondas sonoras (ondas de pressão) em um meio gasoso (com $v = \sqrt{\gamma RT/M}$, onde $\gamma = c_p/c_v$). À partir das equações de Maxwell também se obtém equação como a mostrada acima, com v = c/n onde $c = 1/\sqrt{\mu_o \epsilon_o}$ é a velocidade da luz no vácuo e n o índice de refração do meio.

Pode-se mostrar que qualquer função que dependa de x e t somente pela combinação $x \pm vt$ é sempre uma solução da equação de onda. Consideremos para isso uma função $f(x + vt) = f(\varphi)$. Temos as seguintes relações:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{df}{d\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{df}{d\varphi}; \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{df}{d\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = v \frac{df}{d\varphi}$$

e para as derivadas segundas:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{d}{d\varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{d^2 f}{d\varphi^2}$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{d}{d\varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \frac{\partial \varphi}{\partial t} = v^2 \frac{d^2 f}{d\varphi^2}$$

e portanto,

$$\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{d^2 f}{d\varphi^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$



Figura 5.4: Pulso de onda em uma corda esticada.

A figura 5.4 mostra um pulso em uma corda em dois instantes de tempo consecutivos, t=0s e t=1s. A função de onda descrevendo o pulso e dada por:

$$f(x,t) = Ae^{-k^2(x-vt)^2} = 1.0e^{-(x-5t)^2}$$

Portanto, em t=0 a curva corresponde a uma gaussiana centrada em x=0 e em t=1 a uma outra de mesmas características, mas com centróide em x=5 m. Portanto, vê-se claramente, que uma função de x-vt corresponde a uma onda propagando-se para a direita. Analogamente pode-se verificar que uma função com argumento x + vt corresponde a uma onda se propagando para a esquerda.

Uma solução simples e muito importante para a equação de onda é a chamada onda harmônica:

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

onde $k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda e $kv = \omega$. Expressões equivalentes são:

$$\Psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t) = A\cos 2\pi (\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T})$$

onde $kv = \omega$ é a freqüência angular e $T = 2\pi/\omega = 1/\nu$ é o período da onda. Muitas vezes, por facilidade de cálculo, se descreve uma onda harmônica, também chamada onda plana, pela função exponencial complexa:

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

Embora esta função não possa ser uma solução física para ondas por ser uma função complexa, soluções reais podem ser obtidas tomando-se a parte real ou a parte imaginária da função, bem como combinações lineares, utilizando-se as relações:

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$\cos\theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}; \ \sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$$

Ondas harmônicas são coisas um tanto artificiais, pois se estendem por todo o espaço e todo o tempo. Entretanto, em muitos casos podemos descrever uma onda pela função harmônica em um intervalo finito de espaço e tempo e por outras funções fora desse intervalo. As ondas harmônicas têm ainda grande importância na descrição do movimento ondulatório, uma vez que qualquer tipo de onda pode ser sempre escrita em termos da soma de diferentes ondas harmônicas (o que é conhecido como análise de Fourier).

Uma propriedade muito importante da equação de onda é ser uma equação linear (ou seja todos os termos que contém a função de onda estão elevados à potência 1). Com isso, se $\Psi_1 \in \Psi_2$ são soluções da equação de onda então uma combinação linear $\Psi(x,t) = A\Psi_1(x,t) + B\Psi_2(x,t)$ também é uma solução. Esta característica é também chamada princípio de superposição de ondas e é o que garante que a análise de Fourier seja possível. Um caso interessante corresponde à superposição de duas ondas harmônicas com mesma freqüência, amplitude e fase, mas se propagando em direções opostas:

$$\Psi_1 = A\sin(kx - \omega t)$$

$$\Psi_2 = A\sin(kx + \omega t)$$



Figura 5.5: Ondas estacionárias em uma corda de comprimento L.

Lembrando que $sin(a \pm b) = sin a cos b \pm cos a sin b$, temos:

$$\Psi(x,t) = \Psi_1 + \Psi_2 = A(\sin(kx - \omega t) + \sin(kx + \omega t))$$

e portanto temos para a onda resultante:

$$\Psi(x,t) = 2A\sin kx \cos \omega t$$

O resultado, o produto de uma função somente de x por outra somente de t, não é uma onda que se propaga nem para esquerda nem para a direita, correspondendo a uma onda estacionária. Na figura 5.5 vemos exemplos de ondas estacionárias em uma corda. Como a corda está fixa em ambas as extremidades, a amplitude de onda deve ser sempre nula nesses pontos em qualquer instante de tempo. Portanto, fazendo sin kx = 0 para x=0 e x=L, temos a condição para ondas estacionárias na corda: Δ

$$kL = n\pi \text{ ou } L = n\frac{\lambda}{2}$$

Um outro caso simples de superposição de ondas corresponde à de duas ondas harmônicas de freqüências ligeiramente diferentes, mesma amplitude e fase, e caminhando no mesmo sentido:

$$\Psi_1 = A\cos(k_1 x - \omega_1 t); \ \Psi_2 = A\cos(k_2 x - \omega_2 t)$$

observando-se que temos a seguinte identidade:

$$k_1 = \frac{k_1 + k_2}{2} - \frac{k_2 - k_1}{2} = \overline{k} - \frac{\Delta k}{2}$$

e expressões semelhantes, para $k_2, \omega_1 e \omega_2$. Aplicando estas relações na expressão para a função de onda temos (usando a relação $\cos a + \cos b = 2 \cos \frac{1}{2}(a+b) \cos \frac{1}{2}(a-b)$):

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

A forma de onda resultante é vista na figura 5.6. Uma onda de número de onda e freqüência $\overline{k}, \overline{\omega}$ tem amplitude $2A \cos \frac{1}{2} ((\Delta kx - \Delta \omega t))$, e é vista como um envoltório na figura, correspondendo a uma "amplitude modulada".

O envoltório, ou modulação tem uma velocidade dada por:

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

onde $v_g = \Delta \omega / \Delta k$ é chamada velocidade de grupo. Tomando agora o limite de $k_2 \rightarrow k_1$ e $w_2 \rightarrow w_1$, a superposição agora corresponde a uma onda harmônica e a velocidade de grupo é $v_g = d\omega/dk$. Pode-se mostrar que em qualquer tipo de onda, a energia é transportada com a velocidade de grupo. Em muitos casos, a velocidade de fase, $v_f = \omega/k$ é constante, não dependendo do número de onda. Nesses casos, $d\omega/dk = \omega/k$ e a velocidade de fase é igual à velocidade de grupo. Quando uma onda se propaga em um meio onde a velocidade de fase de fase depende do comprimento de onda da radiação, o meio é chamado dispersivo e a

velocidade de grupo é diferente da de fase. No caso das ondas de matéria de de Broglie, com $E = h\nu = \hbar\omega$ e $p = h/\lambda = \hbar k$ e usando a relação $E = p^2/2m$, temos para a velocidade de fase:

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

Portanto a velocidade de fase não corresponde à velocidade da partícula. Entretanto, a velocidade de grupo é dada por:

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(\frac{\hbar k^2}{2m}) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

o que corresponde, portanto à velocidade da partícula.



Figura 5.6: Superposição de duas ondas harmônicas, com comprimento de onda e freqüências ligeiramente diferentes

Para descrever uma partícula localizada no espaço, devemos construir, por superposição, um "pacote" de ondas, cuja amplitude seja não nula apenas numa pequena região do espaço, como no caso de um pulso em uma corda. O exemplo anterior, com a superposição de apenas duas ondas, está longe de satisfazer às condições acima, mas mostra que se obteve *alguma* localização. Podemos dizer que temos algo localizado a cada meio comprimento de onda da envoltória. A incerteza Δx nesta localização corresponde à distância entre dois nulos consecutivos do envoltório. Para um dado instante de tempo, a distância entre dois nulos consecutivos será:

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

ou

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

105

Livro» Estrutura da Matéria (Universitário) Autor: Roberto V. Ribas

5 Propriedades Ondulatórias da Matéria

De maneira análoga, podemos pensar na localização temporal como o intervalo de tempo entre dois nulos consecutivos do envoltório, para um dado valor de x, obtendo-se:

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

Essas relações mostram que quanto mais conseguirmos localizar a partícula no espaço (menor o Δx), maior será o intervalo de números de onda (ou comprimentos de onda) utilizados para a construção do pacote. De maneira análoga, a relação entre as freqüências e o tempo. Para construir um pacote de ondas realmente localizado, como o pulso gaussiano da figura 5.3, devemos somar um número infinito de ondas, com números de onda variando continuamente. O procedimento matemático utilizado para isso é chamado transformada de Fourier, ou análise de Fourier. Por exemplo, se a função que descreve o pulso é (para um dado instante de tempo):

$$f(x) = F_o e^{-(x-x_o)^2/2\sigma_x^2} = \int A(k) e^{-ikx} dk$$

pode-se mostrar que na superposição deve ser usado um conjunto de ondas harmônicas cujos números de onda variam continuamente e cada uma tem amplitude (A(k)) também dada por uma função gaussiana:

$$A(k) = A_o e^{-(k-k_o)^2/2\sigma_k^2}$$

Quanto mais localizado for o pacote (menor o valor de σ_x), mais ampla será a distribuição de k utilizada (σ_k será grande), conforme visto na figura 5.7. Da análise de Fourier, pode-se obter a seguinte relação entre os sigmas:

$$\sigma_x \sigma_k = \frac{1}{2}$$

(note que esta relação é análoga à que encontramos entre Δx e Δk para o caso simples que estudamos).

Utilizando ainda a análise de Fourier, pode-se mostrar que para qualquer outra forma do pacote (triangular, retangular, trapezoidal, etc.), o produto da largura espacial do pacote pela largura da distribuição de números de onda utilizada é sempre maior que aquela obtida para o pacote gaussiano. Chamando de Δx e Δk as larguras do pacote e da distribuição de k utilizada temos então, de uma maneira geral:

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

e analogamente para ω e t:

$$\Delta \omega \Delta t \ge \frac{1}{2}$$

Na óptica, essas relações são chamadas relações de dispersão.



Figura 5.7: Relação entre a largura Δx de um pacote de ondas e a correspondente largura da distribuição de números de onda Δk utilizado na construção do pacote.

5.3 O Princípio de Incerteza

Vimos na seção anterior que, das propriedades usuais das ondas, tentar localizar uma onda no espaço ou no tempo, implica em termos uma distribuição larga em valores de número de onda e de freqüências, respectivamente (relações de dispersão). Com a teoria de de Broglie vemos uma característica muito interessante do comportamento das partículas. Multiplicando as relações acima por \hbar , temos:

$$\Delta x \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}$$
$$\Delta E \Delta t \ge \frac{\hbar}{2}$$

Essas relações são conhecidas na mecânica quântica como o *princípio de incerteza* e foram enunciados pela primeira vez em 1927 pelo físico alemão Werner Heisenberg. Elas representam uma limitação teórica à precisão com que podemos determinar simultaneamente a posição e o momento de uma partícula, ou a energia e o tempo. Quanto mais precisamente determinamos a posição, por exemplo, mais incerto será o momento da partícula. Como vimos acima, este princípio se origina do comportamento ondulatório das partículas. Vista de uma outra maneira, essas relações estão ligadas ao fato de que não podemos observar uma partícula sem interferir na mesma. Por exemplo, quando olhamos um pequeno objeto no microscópio, devemos iluminá-lo. A colisão dos fótons com o objeto altera portanto o momento do objeto (espalhamento Compton). Sabemos ainda que se quisermos observar um objeto muito pequeno, devemos utilizar luz de comprimento de onda muito menor que as dimensões do objeto, caso contrário a difração será apreciável e a imagem não terá uma boa definição. Portanto, quanto menor o objeto, maior a interferência ao se determinar a posição, e não há como diminuir arbitrariamente essa interferência.

Vamos tentar observar (hipoteticamente) um elétron num microscópio, iluminando-o com um único fóton. Num microscópio em que a abertura angular da objetiva é θ e a luz utilizada tem comprimento de onda λ , pode-se mostrar que devido a difração, a menor distância que pode ser determinada é

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

Podemos considerar este Δx como sendo a incerteza na determinação da posição do elétron. Suponha o fóton incidindo na horizontal, como mostra o diagrama da figura 5.8. Após o espalhamento Compton, iremos observar o fóton se ele for espalhado em *qualquer* ângulo, dentro do campo de visão θ do microscópio (na ocular, o fóton chegará no ponto focal e não saberemos que direção tomou). Sendo p o momento do fóton espalhado (e aproximadamente igual ao do fóton incidente, se a energia do fóton não for muito grande), o componente horizontal de p poderá ter qualquer valor entre $\theta e p \sin \theta$. Assim, o componente x do momento transferido ao elétron terá uma incerteza da mesma ordem (a incerteza pode ser maior, se o momento do elétron antes de interagir com o fóton, já tiver alguma incerteza). Portanto: 5.4 Interferência Em um Sistema de Duas Fendas



Figura 5.8: Diagrama esquemático de um microscópico onde tenta-se observar um elétron iluminado por um único fóton.

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

Esta análise mostra que o princípio de incerteza é uma imposição intrínseca da natureza e não uma limitação imposta pela nossa incapacidade de medir coisas como a posição do elétron.

5.4 Interferência Em um Sistema de Duas Fendas

O sistema de duas fendas é muito bem conhecido da física ondulatória tradicional. Vamos considerar um sistema simples, com ondas em um tanque de água. Um pequeno objeto (fonte de ondas) é balançado periodicamente para cima e para baixo, produzindo ondas circulares na superfície do tanque. A uma certa distância da fonte, temos na água uma parede com duas fendas verticais (duas portas). A seguir, as ondas que passam pelas duas fendas (produzindo por difração duas novas fontes de ondas circulares) são absorvidas num anteparo, evitando a produção de outras ondas por reflexões. Próximo ao anteparo absorvedor temos um medidor de intensidade de onda, cuja indicação é proporcional ao quadrado da amplitude das oscilações em uma dada posição. O detector pode ser deslocado ao longo da posição vertical da figura, de modo que podemos medir a intensidade das ondas como função da posição x. Deslocando-se então o detector, percebemos que a intensidade varia continuamente com a posição, tendo vários pontos de máximo e de mínimo, conforme visto na curva I_{12} da parte c) da figura 5.9. Essa é a figura típica para a interferência

Livro» Estrutura da Matéria (Universitário) Autor: Roberto V. Ribas

5 Propriedades Ondulatórias da Matéria

das ondas originadas das fendas 1 e 2 da parede no tanque. Se obstruirmos uma das fendas e medirmos a nova distribuição de intensidades, vamos observar um padrão diferente, representado pelas curvas I_1 ou I_2 na parte b) da figura, correspondentes ao fechamento das fendas 2 e 1 respectivamente. O padrão de interferência I_{12} claramente não corresponde à soma dos padrões I_1 e I_2 , sendo característico de um fenômeno ondulatório. Ondas originadas nas fendas 1 e 2 que chegam em fase numa dada posição do medidor se somam (interferência construtiva) produzindo um máximo e nas posições em que chegam com oposição de fase interferem destrutivamente, produzindo um mínimo de intensidade.



Figura 5.9: Interferêcia: ondas de água em um tanque.

Agora vamos imaginar um experimento semelhante, onde elétrons produzidos em um canhão eletrônico são acelerados em direção a uma placa metálica com duas fendas, como mostrado na figura 5.10. Após as fendas, como no caso do tanque com água, temos aqui um detector de elétrons, podendo ser, por exemplo, um contador Geiger. Esse detector pode estar conectado a um sistema ligado a um alto-falante, produzindo um som (um clique), cada vez que um elétron é detectado. Suponhamos que a intensidade do feixe de elétrons produzido seja pequena o suficiente para que haja, em média, um intervalo de tempo relativamente grande entre um elétron e o consecutivo no feixe (maior que ~1 s).

A primeira coisa que observamos é que numa dada posição do detector, ouve-se uma sucessão de cliques mais ou menos aleatoreamente distribuidos no tempo. Entretanto, se contarmos o número de cliques num intervalo de tempo relativamente longo (dezenas de minutos), o número médio de cliques por unidade de tempo será constante. Também, se colocarmos dois detectores em duas posições diferentes, nunca se ouvirá dois cliques simultâneos (exceto, cliques que chegam muito próximos em tempo e que nosso sistema auditivo não consegue separar, mas que poderiam ser separados com um sistema eletrônico mais sensível). Verificamos ainda que os sinais nos detectores ocorrem em "grãos". Todos os cliques são exatamente idênticos, de mesmo tamanho.

Como no experimento com ondas no tanque d'agua, podemos perguntar agora - qual a distribuição de intensidade (número/unidade de tempo) de elétrons como função da posição

5.4 Interferência Em um Sistema de Duas Fendas

ao longo do eixo x? O resultado é a curva P_{12} mostrado na parte c) da figura 5.10. Um padrão completamente análogo àquele produzido no experimento com ondas na água!



Figura 5.10: Experimento da figura 5.9 é repedido com feixe de elétrons.

Ora, se o elétron é uma partícula, ele passa ou pela fenda 1 ou pela 2. como vimos, sempre chega um elétron *inteiro* no Geiger, e não uma fração de elétron. Para verificar por qual fenda passou o elétron, podemos, por exemplo, colocar uma fonte de luz atrás das fendas, de modo que ao passar por uma das fendas, o elétron espalha luz e verificamos então um clarão luminoso próximo à fenda 1 ou à fenda 2, dependendo da fenda por qual passou o elétron. Poderiamos agora contar os cliques no detector como função de x em duas tabelas: uma quando o clarão indicar que o elétron passou pela fenda 1 e a outra, quando vier da fenda 2. Esta experiência permite ainda verificar que o clarão vem sempre apenas de uma das fendas, nunca das duas simultaneamente. Os resultados dessas medidas correspondem às curvas $P'_1 e P'_2$ da figura 5.11, correpondentes a elétrons que passaram pela fenda 1 e 2 respectivamente. A curva $P'_{12} = P'_1 + P'_2$ corresponde à condição do elétron passando pela fenda 1 *ou* pela fenda 2.

Concluimos então que quando observamos os elétrons, o resultado (a distribuição de posições ao longo de x) é *diferente* daquele obtido quando não observamos os elétrons nas proximidades das fendas. A observação *perturba* o movimento dos elétrons. De um modo diferente, esses resultados indicam que quando não observamos, os elétrons se propagam como uma onda, desde o canhão de elétrons até o detector, produzindo o padrão típico de interferência. Quando observamos, vemos um comportamento de partícula, com o elétron passando por uma dada fenda, mas nesse caso, o fenômeno de interferência não é observado. Os elétrons são ainda observados no detetor Geiger como partículas. Esta característica, vista também com os fótons, indica uma característica dualistica onda/partícula para os elétrons bem como para todas as partículas e corpos. Em sistemas macroscópicos, as propriedades ondulatórias não são observadas pois os comprimentos de onda correspondentes são muito menores que o tamanho de uma partícula como o próton e os fenômenos de difração e interferência não podem ser observados.



Figura 5.11: Identificação da fenda pela qual passou o elétron.

5.5 Aplicações do Princípio de Incerteza

Vejamos alguns casos simples onde podemos utilizar o princípio de incerteza para obter algumas propriedades básicas de sistemas físicos. Tomemos por exemplo um oscilador harmônico onde uma partícula de massa m se move sob a ação de uma força F = -kx. A freqüência de oscilação será $\omega = \sqrt{k/m}$. Planck já havia postulado que a energia do oscilador deve ser um múltiplo de uma quantidade fixa, $h\nu$: $E = nh\nu = n\hbar\omega$, n = 0,1,2,...A energia mínima que o oscilador pode ter é portanto 0. Vejamos entretanto o que diz o princípio de incerteza. A energia total do oscilador é:

$$E = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

A energia total do oscilador é constante e portanto temos que $E = \langle E \rangle$. Aplicando o valor médio na expressão acima, temos:

$$< E > = \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{1}{2}k < x^2 >$$

Tanto o valor médio da posição quanto o do momento são nulos para o movimento harmônico, pois a partícula executa um movimento em que a posição e a velocidade assumem valores simétricos em relação ao ponto central de valor zero. Portanto,

$$\Delta p^2 = <(p - \langle p \rangle)^2 > = -2 \langle p \rangle + \langle p \rangle^2 = - 0 > -$$

substituindo esta igualdade na equação para a energia do oscilador, temos:

$$E = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2}k\Delta x^2$$

112

5.5 Aplicações do Princípio de Incerteza

utilizando agora o princípio de incerteza, temos $\Delta p \ge \hbar/2\Delta x$. Substituindo na equação acima temos:

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{1}{2}k\Delta x^2$$

Nota-se que nesta expressão E cresce quando Δx atinge valores muito pequenos (devido à contribuição do primeiro termo e cresce também quando Δx atinge valores muito grandes, devido ao segundo termo da expressão. Portanto deve haver um valor de Δx para o qual a energia é mínima. Este valor pode ser obtido derivando-se a expressão acima e igualando-a a zero. Fazendo a substituição $z = \Delta x^2$, temos:

$$\frac{dE}{dz} = \frac{d}{dz} \left(\frac{\hbar^2}{8mz} + \frac{1}{2}kz \right) = -\frac{\hbar^2}{8mz^2} + \frac{1}{2}k = 0$$

Portanto:

$$z^2 = \frac{\hbar^2}{4mk} = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

Substituindo o valor de z na expressão para E, temos:

$$E_{min} = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2}\hbar w$$

Portanto a expressão correta para a energia do oscilador deve ser:

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

Esta é a expressão correta para e energia do oscilador harmônico de acordo com a mecânica quântica. A quantidade $\frac{1}{2}\hbar\omega$ é chamada energia de ponto zero do oscilador. O oscilador não pode ter energia mínima zero, pois se tivesse, a posição e o momento do oscilador seriam conhecidos com precisão simultaneamente, contrariando o princípio de incerteza.

Num átomo, podemos considerar que a incerteza na posição do elétron é da ordem de grandeza do raio atômico (sabemos que o elétrom está em algum lugar no volume atômico). A energia do elétron a uma distância r do núcleo é dada por:

$$E = \frac{p^2}{2m} - k\frac{e^2}{r}$$

onde $k = 1/4\pi\epsilon_o$. Utilizando o princípio de incerteza e novamente como $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle$, e com $\Delta x = r, p^2 \ge \hbar^2/r^2$ e portanto:

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2mr^2} - k\frac{e^2}{r}$$

A energia mínima pode ser obtida derivando-se a expressão acima com respeito a r e igualando o resultado a zero:

$$\frac{dE}{dr}=-\frac{\hbar^2}{mr^3}+k\frac{e^2}{r^2}=0$$

de onde se obtém:

$$r = \frac{\hbar^2}{kme^2} = a_o = 0.52A$$

portanto reproduzindo corretamente o raio de Bohr. Substituindo este valor na expressão para a energia, temos:

$$E_{min} = -\frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^2} = -13.6 eV$$

novamente o valor correto da energia total do elétron na primeira órbita de Bohr.

Note que embora os resultados estejam corretos, o conceito de órbita bem definida perde sentido. O elétron está localizado em qualquer ponto dentro de um volume de raio igual ao raio de Bohr, mas sua posição correta não pode ser conhecida.

Um terceiro caso interessante corresponde ao movimento de uma partícula livre. Suponha que no instante t=0 determinamos a posição de uma partícula com uma incerteza Δx_o . Com isso, a incerteza no momento da partícula após esta medida será

$$\Delta p = m\Delta v \ge \frac{\hbar}{\Delta x_o}$$

Num instante posterior t, a posição da partícula não poderá ser conhecida com precisão melhor que:

$$\Delta x = \Delta x_o + \Delta vt \ge \Delta x_o + \frac{\hbar}{m\Delta x_o}t$$

portanto, quanto mais precisa for a determinação da posição da partícula em t=0, menos precisa será o conhecimento da posição em tempos futuros!

5.6 Exercícios

1.- Calcule o comprimento de onda de de Broglie para: a) elétron com energia cinética de 50eV. b) elétron relativístico com energia total de 20 MeV. c) nêutron em equilíbrio térmico com o meio a T = 500K (nêutron térmico) d) partícula alfa com energia cinética de 60 MeV e) Grão de poeira de $1 \cdot 10^{-6}g$ em equilíbrio térmico à temperatura ambiente (300K). f) bolinha de 1g com velocidade 1mm/s. Para cada uma dessas situações, diga com que sistemas as partículas devem interagir para mostrar seu caráter ondulatório.

2.- Um microscópio eletrônico usa ondas de de Broglie para "ver" objetos muito pequenos (dimensões da ordem de ângstrons). Qual a diferença de potencial acelerador que deve ser utilizada para acelerar elétrons, à partir do repouso, de modo a obter um comprimento de onda de 0,5A?

5.6 Exercícios

3.- Um próton tem seu movimento confinado em uma caixa unidimensional de largura $0.2 \cdot 10^{-9}m$ (0.2 nm). a) Encontre a energia mais baixa possível para o próton. b) qual a energia mais baixa para um elétron na mesma caixa? c) como você explica a diferença entre os resultados encontrados em a) e b)?

4.- Calcule o comprimento de onda de um elétron com energia cinética de 13,6 eV. Qual a razão entre este comprimento de onda e o raio da primeira órbita de Bohr para o átomo de hidrogênio?

5.- O elétron de um átomo de hidrogênio move-se do estado fundamental (n=1) para o estado n=2 e aí permanece por $10^{-8}s$ antes de decair de volta para o estado fundamental. Calcule a largura natural do estado n=2 (ou seja a incerteza na energia desse estado). Compare seu resultado com o valor da energia desse estado, calculada com o modelo de Bohr (-3,39 eV).

6.-Mostre que o comprimento de onda de de Broglie de uma partícula de carga e, massa de repouso m_o , acelerada a partir do repouso e adquirindo velocidades relativísiticas é dada como uma função do potencial acelerador V como:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_o eV}} \left(1 + \frac{eV}{2m_o c^2}\right)^{-1/2}$$

7.- A distância entre planos no cristal de cloreto de potássio é de 3,1 A. Compare o ângulo de reflexão de Bragg de primeira ordem, por esses planos, de elétrons com energia cinética de 40 keV com o de fótons com energia 40 keV.

8.- A vida média de um estado excitado em um núcleo é normalmente de cerca de $10^{-12}s$. Qual a incerteza na energia do fóton emitido na de-excitação desse estado?

9.- Um garoto, do alto de uma escada de altura H está jogando bolas de gude de massa m em uma fenda existente no solo. Para atingi-la ele utiliza um equipamento que tem a maior precisão possível. a) Mostre que todas as bolas de gude vão deixar de atingir a fenda por uma distância em média da ordem de $(2\hbar/m)^{1/2}(2H/g)^{1/4}$ onde g é a aceleração da gravidade. b) Usando valores rezoáveis para H e m, calcule esta distância.

10.- Determine o comprimento de onda de de Broglie para uma partícula de massa m e energia cinética T. Faça o calculo para a) uma partícula não relativística e b) para uma partícula relativística.

a) $h/\sqrt{2mE_c}$ b) $hc/\sqrt{E_c^2 + 2E_cmc^2}$

11.- O Acelerador Linear de Stanford pode acelerar elétrons até uma energia de 50 GeV. Qual o comprimento de onda de de Broglie para esses elétrons? A que fração do diâmetro do próton (d ~ $2 \cdot 10^{-15}$ m) isso corresponde?

12.- Em um experimento de espalhamento de elétrons, um máximo de reflexão é encontrado para $\phi=32^{\circ}$ para um cristal com distância interatômica de 0.23 nm. Qual o espaçamento entre os planos cristalinos responsável pelo espalhamento? Supondo que essa seja a difração em primeira ordem, qual o comprimento de onda, momentum, energia cinética e energia total dos elétrons incidentes?

d = 0,063 nm; $\lambda = 0,122$ nm; p = 10,2 keV/c; E = 511 keV; $E_c = 102$ eV

13.- Um feixe de nêutrons térmicos (EC = 0.025 eV) é espalhado por um cristal com

espaçamento entre planos atômicos de 0.45 nm. Qual o ângulo para o pico de Bragg de primeira ordem?

14.- Qual a razão $\Delta v/v$, onde Δv é a incerteza na velocidade a) de um elétron e b) um próton confinado em uma caixa unidimensional de largura 2 nm?

15.- Mostre que o princípio de incerteza pode ser expresso na forma $\Delta L \Delta \theta \geq \frac{\hbar}{2}$ onde θ é a posição angular e L o momento angular da partícula. Para que incerteza no momento angular a posição da partícula será totalmente indeterminada?

 $\hbar/4\pi$

16.- Qual a largura de banda $\Delta \omega$ de um amplificador para radar, que amplifica um pulso de largura 2 μ s?

 $2,5x10^5 \mathrm{rd/s}$

17.- Encontre a incerteza mínima na velocidade de uma bactéria de massa 3×10^{-15} kg, supondo que conhecemos sua posição com incerteza de 1 μ m, ou seja, seu próprio tamanho.

18.- Um átomo em um estado excitado de 4,7 eV emite um fóton e termina no estado fundamental. A vida média do estado excitado é de 10^{-13} s. a) Qual é a largura espectral da linha correspondente (em unidades do comprimento de onda)?

a) $3,3x10^{-3}$ eV b) 0,18 nm

19.- Calcule o comprimento de onda de de Broglie de uma partícula α emitida por um núcleo de ²⁴¹Am. Poderia essa partícula existir dentro do núcleo de amerício (diâmetro $\approx 1.6 \times 10^{-14}$ m)?