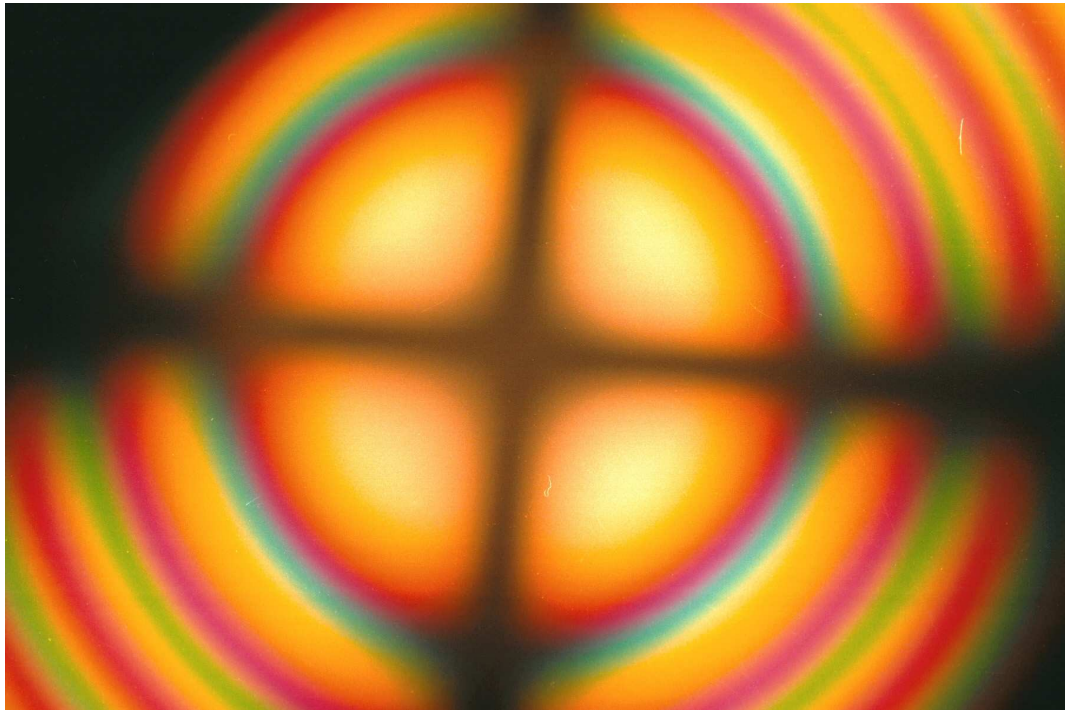


ÓPTICA e FÍSICA MODERNA



Jaime Frejlich
Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física - Laboratório de Óptica
Campinas-SP BRAZIL

Atualizado: Setembro 2006

Sumário

I	Óptica	1
1	Propagação da luz	3
1.1	Ondas harmônicas	3
1.2	Operadores Vetoriais	4
1.3	Velocidade de grupo	5
1.4	Ondas eletromagnéticas	7
2	Natureza vectorial da luz	13
2.1	Equações de Maxwell: relações vectoriais	13
2.2	Polarização	13
2.3	Vector de Poynting	15
2.4	Vetor de Poynting e Intensidade	16
2.5	Ângulo de Brewster	17
3	Interferência e Coerência	19
3.1	Interferência	19
3.2	Coerência e Espectro de Potência	23
4	Difração	31
4.1	Introdução	31
4.2	Formalismo clássico	31
4.3	Problemas	37
4.4	Difração	37
II	Relatividade	39
5	Relatividade Especial[?]	41
5.1	Cinemática clássica	41
5.2	Experimento de Michelson-Morley	42
5.3	Relatividade Especial	43
5.4	Transformação de Lorentz	46
6	Física Quântica: Os primeiros experimentos e o modelo atômico de Bohr	57
6.1	Os primeiros experimentos	57
6.2	Estrutura Atômica: Átomo de Bohr	62

7	Física quântica: Partícula ondulatória	65
7.1	Caráter ondulatório do elétron	65
7.2	A função de onda	66
7.3	Equação de Schrödinger (1925)	69
7.4	Princípio de Incerteza	78
7.5	Poço de potencial infinito	78
7.6	Princípio de Incerteza	78
8	Equação de Schrödinger e o novo Modelo Atômico	81
8.1	Momento angular	83
8.2	Regras de seleção para as transições atômica	88
8.3	Funções de onda nos átomos	88
9	Condução em sólidos	93
9.1	Sólidos	93
9.2	Condutividade	93
9.3	Elétron no campo periódico de um cristal: Estado sólido	95
9.4	Equação de Schrödinger	95
9.5	Conclusões	97
9.6	Isolantes, metais e semicondutores	101
9.7	Energia de Fermi	102

Parte I

Óptica

Capítulo 1

Propagação da luz

1.1 Ondas harmônicas

Seja a expressão geral de uma onda harmônica

$$a(x, t) = \cos(kx - \omega t) \quad (1.1)$$

$$\phi(P) = kx - \omega t \quad (1.2)$$

onde $\phi(P)$ representa a fase associada a um ponto "P" da onda que se propaga junto com ela. Para calcular a velocidade de fase dessa onda é só calcular a velocidade desse ponto "P". Considerando que a derivada total da fase desse ponto deve ser zero pois a fase do ponto é invariante temporalmente, podemos calcular

$$\frac{d\phi(P)}{dt} = \frac{\partial\phi(P)}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial\phi(P)}{\partial t} = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{d\phi(P)}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0 \quad (1.4)$$

Definindo a velocidade de fase como

$$v \equiv \frac{dx}{dt} \quad (1.5)$$

concluimos que

$$v = \omega/k \quad k = 2\pi/\lambda \quad \omega = 2\pi/T \quad (1.6)$$

onde λ é o comprimento de onda e T o seu período.

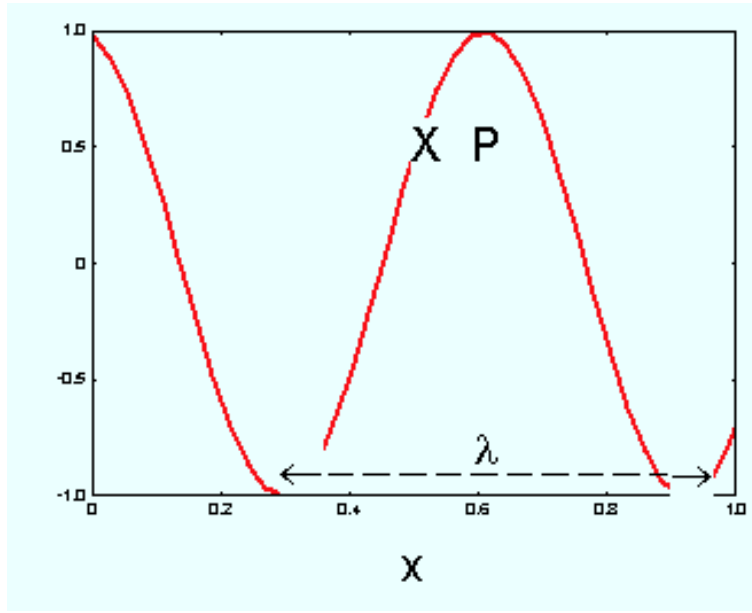
1.1.1 Representação complexa

A onda em Eq.(1.1) pode ser escrita numa formulação complexa assim

$$a(x, t) = \Re\{A(x, t)\} \quad (1.7)$$

$$A(x, t) = \mathcal{A} e^{i(kx - \omega t)} \quad \mathcal{A} = |\mathcal{A}| e^{i\phi_a} \quad (1.8)$$

onde \mathcal{A} é a amplitude complexa que inclui o termo de fase ϕ_a .



$$v = \omega/k$$

$$k = 2\pi/\lambda$$

$$\omega = 2\pi/T$$

Figura 1.1: Onda harmônica

1.1.1.1 Onda harmônica plana em 3 dimensões

A expressão da onda no item anterior refere-se ao espaço unidimensional. Em três dimensões deve-se formular assim

$$e^{\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t} \quad (1.9)$$

onde o vetor propagação \vec{k} está indicando a direção e sentido da onda e \vec{r} e o vetor posição. A fase é

$$\phi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = k_x x + k_y y + k_z z - \omega t \quad (1.10)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{dz}{dt} - \omega = 0 \quad (1.11)$$

$$k_x v_x + k_y v_y + k_z v_z - \omega = 0 \quad (1.12)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{v} = \omega \Rightarrow \boxed{\vec{v} = \frac{\omega \vec{k}}{k^2}} \quad (1.13)$$

1.2 Operadores Vetoriais

Utilizaremos bastante os operadores vetoriais

$$\nabla \equiv \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{operador "nabla"} \quad (1.14)$$

$$\nabla \phi = \mathbf{grad} \phi = \hat{x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad \text{gradiente} \quad (1.15)$$

$$\nabla \cdot \vec{A} = \mathbf{div} \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \quad \text{divergência} \quad (1.16)$$

$$\nabla \times \vec{A} = \mathbf{rot} \vec{A} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} \quad \text{rotacional} \quad (1.17)$$

1.2.0.2 Operações freqüentes

A formulação vetorial da onda pode facilitar a execução de algumas operações como ser:

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial t} = \Re\left\{\frac{\partial A(x, t)}{\partial t}\right\} = \Re\{-i\omega A(x, t)\} \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial x} = \Re\{ikA(x, t)\} \quad (1.19)$$

$$\langle a(x, t)b(x, t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T a(x, t)b(x, t)dt \neq \Re\{\langle A(x, t)B(x, t) \rangle\} \quad (1.20)$$

A última desigualdade resulta do fato que o operador "média temporal" é linear mas o produto não o é. Para realizar a média temporal de um produto temos então que voltar às definições

$$\begin{aligned} \langle ab \rangle &= \langle \Re\{A\}\Re\{B\} \rangle = \left\langle \frac{|A||B|}{2} [\cos(2kx - 2\omega t + \phi_a + \phi_b) + \cos(\phi_a - \phi_b)] \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{|A||B|}{2} \cos(\phi_a - \phi_b) \right\rangle \end{aligned} \quad (1.21)$$

onde

$$a(x, t) = \Re\{\mathcal{A}e^{i(kx - \omega t)}\} \quad \mathcal{A} = |\mathcal{A}|e^{i\phi_a} \quad (1.22)$$

$$b(x, t) = \Re\{\mathcal{B}e^{i(kx - \omega t)}\} \quad \mathcal{B} = |\mathcal{B}|e^{i\phi_b} \quad (1.23)$$

Em resumo podemos então escrever

$$\boxed{\langle a(x, t)b(x, t) \rangle = \frac{1}{2}\Re\{\mathcal{A}\mathcal{B}^*\}} \quad (1.24)$$

1.3 Velocidade de grupo

1.3.1 Batimento

Sejam duas ondas harmônicas de igual amplitude mas com freqüência e comprimento de onda levemente diferentes assim

$$\begin{aligned} A(x, t) &= a e^{i[(\bar{k} + \delta k/2)x - (\bar{\omega} + \delta\omega/2)t]} + a e^{i[(\bar{k} - \delta k/2)x - (\bar{\omega} - \delta\omega/2)t]} \\ &= a [e^{i(\delta k/2x - \delta\omega/2t)} + e^{-i(\delta k/2x - \delta\omega/2t)}] e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega}t)} \\ &= [2a \cos(\delta kx - \delta\omega t)] e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega}t)} \end{aligned} \quad (1.25)$$

O primeiro fator à direita na Eq.(1.2) representa a amplitude enquanto que o segundo representa a fase da onda resultante. Ambos termos representam formalmente ondas propagantes, o que significa que tanto a fase quanto a amplitude desse batimento se propagam. Suas respectivas velocidades calculam-se na forma usual

$$v = \bar{\omega}/\bar{k} \quad (1.26)$$

$$v_g = \delta\omega/\delta k \quad (1.27)$$

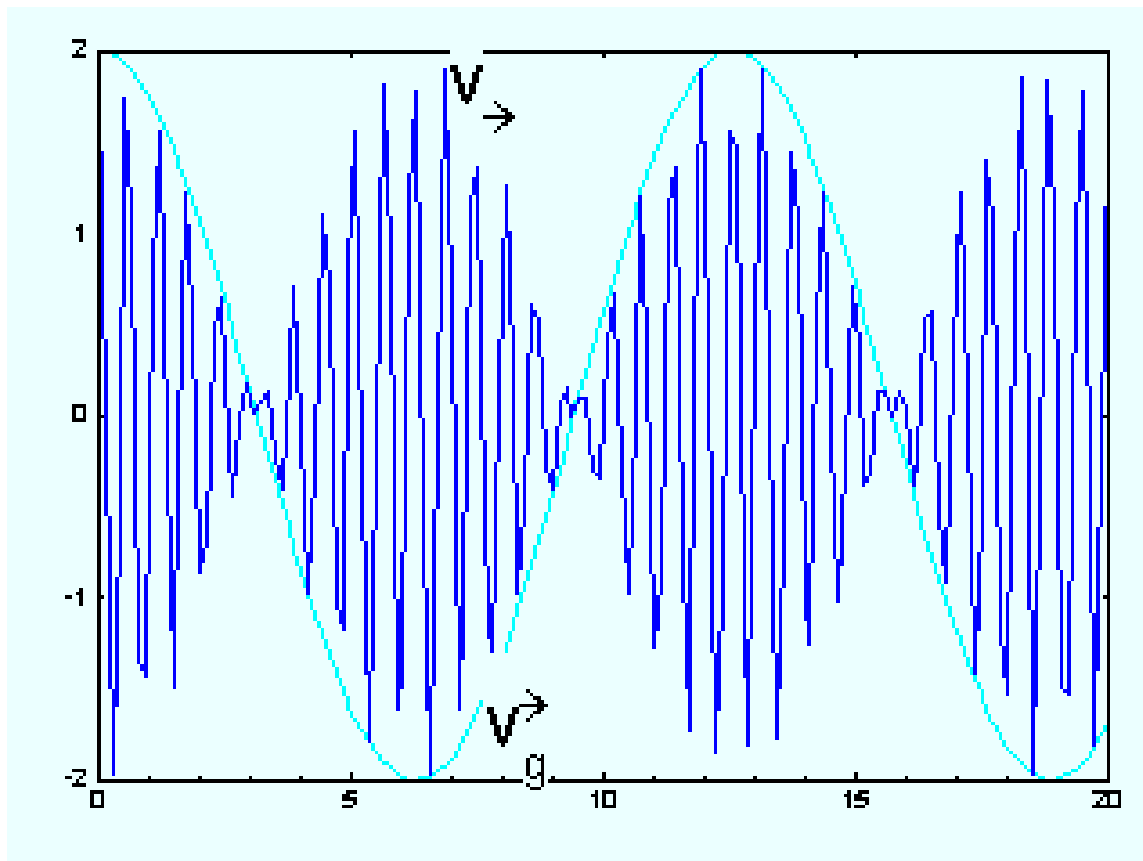


Figura 1.2: Batimento resultante da soma de duas ondas com frequências e comprimentos de ondas pouco diferentes. A velocidade de fase está indicada como v e a de grupo como v_g

Podemos induzir então que a velocidade da amplitude, que é chamada de "velocidade de grupo" calcula-se assim:

$$v_g = \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{\bar{\omega}} \quad (1.28)$$

1.3.2 Pulso

Vamos generalizar o resultado acima, para o caso de uma distribuição contínua de ondas descrita pela integral

$$\begin{aligned} A(x, t) &= \int_{\bar{\omega}-\Delta\omega_o}^{\bar{\omega}+\Delta\omega_o} \mathcal{A}(\omega) e^{i(kx - \omega t)} d\omega \\ &= e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega}t)} \left[\int_{\bar{\omega}-\Delta\omega_o}^{\bar{\omega}+\Delta\omega_o} \mathcal{A}(\omega) e^{i\Delta\omega[(dk/d\omega)\bar{x} - t]} d\Delta\omega \right] \end{aligned} \quad (1.29)$$

para $\Delta\omega_o/\bar{\omega} \ll 1$

O fator entre parenteses retos representa a amplitude desse conjunto de ondas (pulso) e, como no caso anterior, representa uma onda que se propaga com a chamada velocidade de grupo que esta formalmente indicada na exponencial dentro do termo de amplitude e vale

$$v_g = (d\omega/dk)_{\bar{\omega}} \quad (1.30)$$

1.4 Ondas eletromagnéticas

1.4.1 Da formulação integral à formulação diferencial das equações do eletromagnetismo

As leis básicas do eletromagnetismo na formulação integral como aparecem nos textos básicos de Física são:

- Lei de Gauss

$$\varepsilon_0 \oint_S \vec{E} \cdot d\vec{s} = q \quad \text{carga contida} \quad (1.31)$$

- Lei de Gauss para campo magnético

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{s} = 0 \quad \text{"carga" magnética contida} \quad (1.32)$$

- Lei de Ampère

$$\oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 \left(i + \varepsilon_0 \frac{d\phi_E}{dt} \right) \quad (1.33)$$

- Lei de Faraday

$$\oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{d\phi_B}{dt} \quad (1.34)$$

junto com as leis complementares

- Lei de Ohm

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (1.35)$$

- Conservação da carga elétrica

$$\oint_S \vec{j} \cdot d\vec{s} + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \, dv = 0 \quad (1.36)$$

- Definições

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (1.37)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M} \quad (1.38)$$

Para chegar às Equações de Maxwell que necessitamos para formular a equação de onda para a luz, podemos partir das leis de Eletromagnetismo na formulação integral

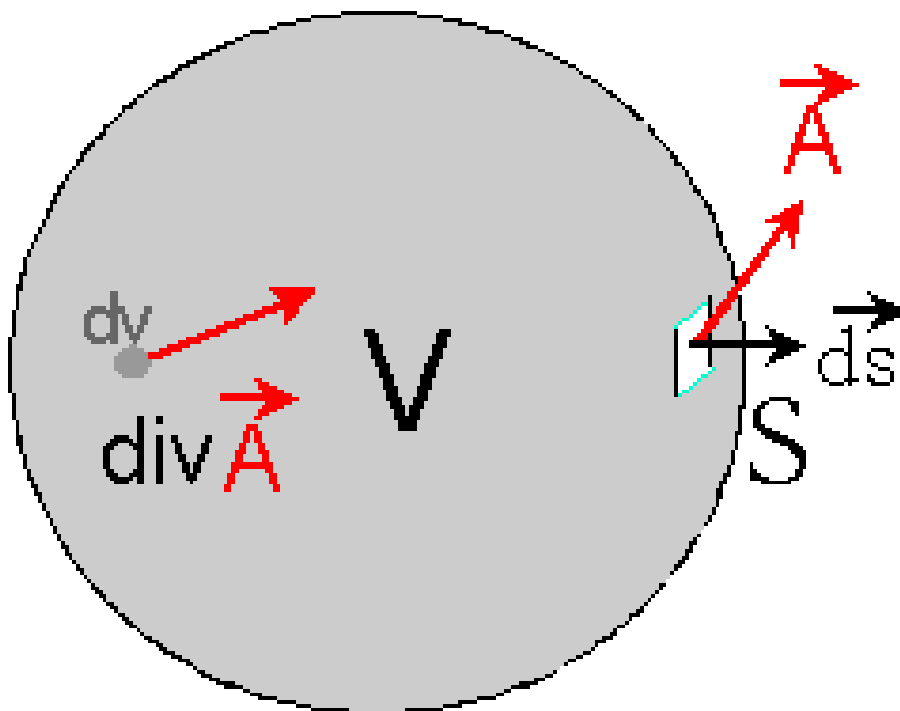


Figura 1.3: Teorema de Gauss

1.4.1.1 Lei de Gauss

Pelo Teorema de Gauss

$$\oint_S \vec{A} \cdot d\vec{s} = \int_V \nabla \cdot \vec{A} \, dv \quad (1.39)$$

aplicado à Lei de Gauss na formulação integral em Eq.(1.31) resulta

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 \oint_S \vec{E} \cdot d\vec{s} &= q \\ &\Downarrow \\ \varepsilon_0 \int_V \nabla \cdot \vec{E} \, dv &= \int_V \rho \, dv \end{aligned}$$

resultando a formulação diferencial da Lei de Gauss:

$$\boxed{\varepsilon_0 \nabla \cdot \vec{E} = \rho} \quad (1.40)$$

$$(1.41)$$

onde ρ é a densidade volumétrica de carga elétrica. Similarmente pode-se chegar à formulação

$$\boxed{\nabla \cdot \vec{B} = 0} \quad (1.42)$$

para a indução magnética.

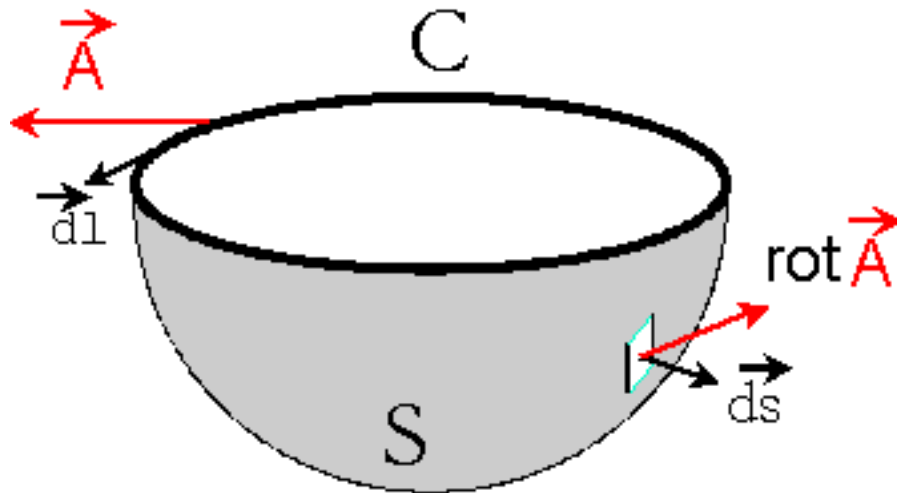


Figura 1.4: Teorema de Stokes

1.4.1.2 Lei de Ampère

Aplicando o Teorema de Stokes

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_S (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{s} \quad (1.43)$$

à formulação integral da lei de Ampère na Eq.(1.44)

$$\begin{aligned} \oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l} &= \mu_0 i + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \phi_E}{\partial t} \\ &\Downarrow \\ \int_S (\nabla \times \vec{B}) \cdot d\vec{s} &= \mu_0 \int_S \vec{j} \cdot d\vec{s} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{s} \\ &\Downarrow \\ \int_S (\nabla \times \vec{B}) \cdot d\vec{s} &= \int_S [\mu_0 \vec{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}] \cdot d\vec{s} \end{aligned}$$

resulta a formulação diferencial:

$$\boxed{\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}} \quad (1.44)$$

1.4.1.3 Lei de Faraday

Seguindo o mesmo procedimento com a formulação integral da lei de Faraday na Eq.(1.45)

$$\begin{aligned} \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} &= -\frac{\partial \phi_B}{\partial t} \\ &\Downarrow \\ \int_S (\nabla \times \vec{E}) \cdot d\vec{s} &= -\frac{\partial}{\partial t} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{s} \\ &\Downarrow \\ \int_S (\nabla \times \vec{E}) \cdot d\vec{s} &= -\int_S \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{s} \end{aligned}$$

resulta a formulação diferencial

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.45)$$

1.4.2 Equações de Maxwell

As equações de Maxwell propriamente ditas são

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.46)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.47)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.48)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (1.49)$$

que se complementam com as chamadas equações materiais

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0(1 + \chi) \vec{E} \quad (1.50)$$

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E} \quad (1.51)$$

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (1.52)$$

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (1.53)$$

Vamos nos restringir ao caso em que

$$\rho = 0 \quad \vec{M} = 0 \quad (1.54)$$

supondo também que o meio seja isotrópico, isto é, σ e χ independente da direção de propagação. Lembrando a propriedade

$$\nabla \times \nabla \times \vec{A} = -\nabla^2 \vec{A} + \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) \quad (1.55)$$

e aplicando-a à Eq.(1.46) resulta

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}\right) \quad (1.56)$$

$$-\nabla^2 \vec{E} + \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}\right) \quad (1.57)$$

$$(1.58)$$

lembrando que $\nabla \cdot (\varepsilon_0(1 + \chi)\vec{E}) = \rho = 0$ então a equação acima se reduz à expressão de uma onda amortecida

$$\mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \nabla^2 \vec{E} = 0 \quad (1.59)$$

Começando a partir da Eq.(1.47) uma equação de onda formalmente idêntica pode ser obtida para \vec{H} .

$$\mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} + \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} - \nabla^2 \vec{H} = 0 \quad (1.60)$$

É interessante comparar as expressões nas Eqs.(1.59) e (1.60) com a de uma oscilação mecânica amortecida

$$m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial x}{\partial t} + kx = 0 \quad (1.61)$$

Comparando as Eqs.(1.61) com as (1.59) e (1.60) concluímos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \text{termo de inércia:} & \quad \mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \Rightarrow m \\ \text{termo de amortecimento:} & \quad \mu_0 \sigma \Rightarrow \gamma \\ \text{termo de restituição:} & \quad -\nabla^2 \Rightarrow k \end{aligned} \quad (1.62)$$

1.4.3 Equação da onda eletromagnética

Para o caso de uma onda harmônica plana em três dimensões representada na formulação complexa como em Eq.(1.9) encontramos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} & \Rightarrow -i\omega \\ \nabla^2 & \Rightarrow -k^2 \end{aligned} \quad (1.63)$$

qua aplicadas à Eq.(1.59) resulta em

$$\left(k^2 - \mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \omega^2 - i\omega \mu_0 \sigma \right) \vec{E} = 0 \quad (1.64)$$

que é a chamada formulação de Helmholtz para a equação da onda para o caso de uma onda harmônica. Como a expressão dentro do parentesis deve se anular para qualquer \vec{E} , então podemos, a partir dela, achar a expressão para a constante da onda e para o índice de refração

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left[1 + \chi + i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon_0} \right] \quad (1.65)$$

$$n^2 = \frac{c^2}{v^2} = 1 + \chi + i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon_0} \quad (1.66)$$

Das equações acima fica claro que o vetor de onda e o índice de refração são quantidades complexas que podemos, em geral, escrever assim:

$$\vec{k} = \vec{\beta} + i\vec{\alpha} \quad (1.67)$$

$$n = n + i\kappa \quad (1.68)$$

A expressão da onda do campo elétrico fica então de seguinte forma

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.69)$$

$$\text{ou seja } \vec{E} = \vec{E}_0 e^{-\vec{\alpha} \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{\beta} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.70)$$

Se os vetores $\vec{\alpha}$ e $\vec{\beta}$ são paralelos, isso significa que o amortecimento da amplitude ocorre ao longo da direção de propagação da onda e essa onda chama-se "homogênea". Caso contrário, é uma onda inhomogênea.

Capítulo 2

Natureza vectorial da luz

2.1 Equações de Maxwell: relações vectoriais

Correspondências numa onda harmônica:

$$\nabla \Rightarrow i\vec{k} \quad \frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow -i\omega$$

E as equações de Maxwell ficam assim:

$$\begin{array}{lcl} \varepsilon \nabla \cdot \vec{E} = \rho = 0 & \Rightarrow & i\vec{k} \cdot \vec{E} = 0 \\ \mu \nabla \cdot \vec{H} = 0 & & i\vec{k} \cdot \vec{H} = 0 \\ \nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} & & i\vec{k} \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H} \\ \nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & & i\vec{k} \times \vec{H} = \vec{j} - i\omega\varepsilon\vec{E} \end{array}$$

2.2 Polarização

2.2.1 Polarização linear

$$\begin{array}{lcl} i\vec{k} \cdot \vec{E} & = & 0 \\ i\vec{k} \cdot \vec{H} & = & 0 \\ i\vec{k} \times \vec{E} & = & i\omega\mu\vec{H} \\ i\vec{k} \times \vec{H} & = & \vec{j} - i\omega\varepsilon\vec{E} \end{array}$$

$$kE = \omega\mu H$$

$$kH = -(\omega\varepsilon - i\sigma)E$$

↓

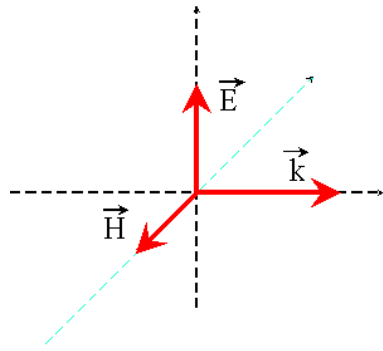
$$E^2(\omega\varepsilon - i\sigma) = \omega\mu H^2$$

↓

$$\left| \frac{E}{H} \right|^2 = \left| \frac{\omega\mu}{\omega\varepsilon - i\sigma} \right|^2$$

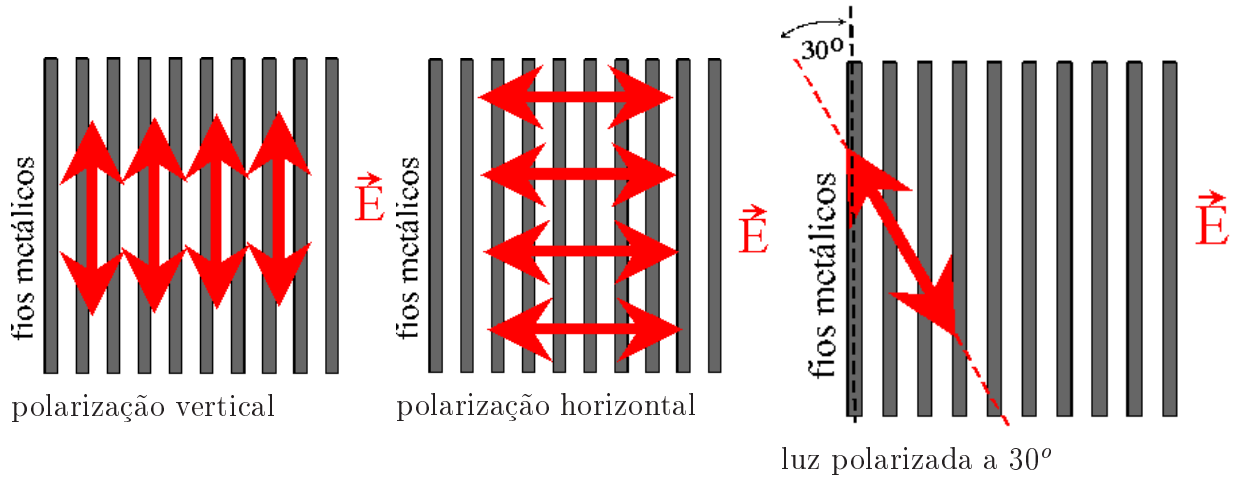
meio não condutor: $\left| \frac{E}{H} \right| = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} = \frac{1}{\varepsilon v}$

vácuo: $\left| \frac{E}{H} \right| = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} = 377\Omega$



$$\begin{aligned} i\vec{k} \cdot \vec{E} &= 0 \\ i\vec{k} \cdot \vec{H} &= 0 \\ i\vec{k} \times \vec{E} &= i\omega\mu\vec{H} \\ i\vec{k} \times \vec{H} &= \vec{j} - i\omega\epsilon\vec{E} \end{aligned}$$

A luz está polarizada



Qual das polarizações acima passa (por esse polarizador) e qual não? Por que?

2.2.2 Polarização elíptica

Suponhamos que os eixos principais de uma lâmina de retardo estejam alinhados com os eixos x - e y de um sistema de coordenadas. Suponhamos também que uma luz linearmente polarizada, com amplitude A , incide normalmente sobre a lâmina, com a direção da polarização fazendo um ângulo θ com o eixo x . As expressões das componentes da amplitude ao longo dos eixos x e y na saída são

$$x = x_o \sin(\omega t + \phi) = x_o \sin \omega t \cos \phi + x_o \cos \omega t \sin \phi \quad (2.1)$$

$$y = y_o \sin \omega t \quad (2.2)$$

$$\text{com } x_o = A \cos \theta \text{ and } y_o = A \sin \theta \quad (2.3)$$

onde ω é a frequência da luz e ϕ é o atraso de fase entre ambas componentes (onda rápida e onda lenta) na saída da lâmina. Somando os quadrados das expressões em Eq.(2.1) e (2.2) e rearranjando os termos resulta

$$\frac{x^2}{x_o^2} + \frac{y^2}{y_o^2} - \sin^2 \phi - 2\frac{x}{x_o} \frac{y}{y_o} \cos \phi = 0 \quad (2.4)$$

que representa uma elipse rotada, que pode ser transformada numa elipse não-rotada por meio de uma rotação do sistema de coordenadas. Para isso usamos a matriz de transformação

$$\begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y' \\ x' \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

Com as correspondentes transformações $x \rightarrow x'$ e $y \rightarrow y'$, a Eq.(2.4) transforma-se em

$$\frac{y'^2}{b^2} + \frac{x'^2}{a^2} = 1 + x'y' \frac{2x_0y_0 \cos 2\alpha \cos \phi + (y_0^2 - x_0^2) \sin 2\alpha}{x_0^2y_0^2 \sin^2 \phi} \quad (2.6)$$

com

$$\frac{1}{a^2} = \frac{x_0^2y_0^2 \sin^2 \phi}{y_0^2 \cos^2 \alpha + x_0^2 \sin^2 \alpha - x_0y_0 \sin 2\alpha \cos \phi} \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{b^2} = \frac{x_0^2y_0^2 \sin^2 \phi}{y_0^2 \sin^2 \alpha + x_0^2 \cos^2 \alpha + x_0y_0 \sin 2\alpha \cos \phi} \quad (2.8)$$

Fazendo zero o último termo da direita na Eq.(2.6), encontramos o ângulo de rotação α necessário

$$\tan 2\alpha = 2 \frac{x_0y_0}{x_0^2 - y_0^2} \cos \phi \quad (2.9)$$

para que o novo sistema de coordenadas mostre uma leipse centrada.

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} = 1 \quad (2.10)$$

2.3 Vector de Poynting

$$\begin{aligned} \vec{S} &= \vec{E} \times \vec{H} \\ \nabla \cdot \vec{S} &= \nabla \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) \end{aligned}$$

$$\int_V \nabla \cdot \vec{S} dv = \oint \vec{S} \cdot d\vec{s} \Rightarrow \text{potência}$$

$$\nabla \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) = \vec{H} \cdot \nabla \times \vec{E} - \vec{E} \cdot \nabla \times \vec{H}$$

Equações de Maxwell

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{H} &= \vec{j} - \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} \vec{H} \cdot \nabla \times \vec{E} &= -\mu \vec{H} \cdot \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \\ \vec{E} \cdot \nabla \times \vec{H} &= \vec{E} \cdot \vec{j} + \vec{E} \cdot \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \nabla \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) &= -(\mu \vec{H} \cdot \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} + \epsilon \vec{E} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) - \vec{E} \cdot \vec{j} \\ &= -\frac{\partial}{\partial t} (\frac{1}{2} \epsilon E^2 + \frac{1}{2} \mu H^2) - \vec{E} \cdot \vec{j} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) &= -\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \varepsilon E^2 + \frac{1}{2} \mu H^2 \right) - \vec{E} \cdot \vec{j} \\ &\Downarrow \\ \int_V \nabla \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) \cdot d\vec{v} + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \left(\frac{1}{2} \varepsilon E^2 + \frac{1}{2} \mu H^2 \right) dV &= - \int_V \vec{E} \cdot \vec{j} d\vec{v} \\ \oint_S (\vec{E} \times \vec{H}) \cdot d\vec{s} + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \left(\frac{1}{2} \varepsilon E^2 + \frac{1}{2} \mu H^2 \right) dV &= - \int_V \vec{E} \cdot \vec{j} d\vec{v}\end{aligned}$$

$$\boxed{\text{FLUXO de POTÊNCIA: } \vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}}$$

2.4 Vetor de Poynting e Intensidade

$$\begin{aligned}\vec{S} &= \vec{E} \times \vec{H} \\ \vec{E} &= \vec{E}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ \vec{H} &= \vec{H}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ \vec{S} &= \vec{E} \times \vec{H} = \vec{E}_0 \times \vec{H}_0 \cos^2(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\end{aligned}$$

média temporal:

$$\begin{aligned}\langle \vec{S} \rangle &\equiv \frac{1}{T} \int_0^T \vec{S} dt = \vec{E}_0 \times \vec{H}_0 \frac{1}{T} \int_0^T \cos^2(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) dt \\ \langle \vec{S} \rangle &= \frac{1}{2} \vec{E}_0 \times \vec{H}_0\end{aligned}$$

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \vec{E}_0 \times \vec{H}_0$$

$$\begin{aligned}\text{Lei de Faraday: } \nabla \times \vec{E} &= -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} & i\vec{k} \times \vec{E} &= i\mu\omega\vec{H} \\ \langle \vec{S} \rangle &= \frac{1}{2} \vec{E}_0 \times \vec{H}_0 & &= \frac{1}{2} \vec{E}_0 \times \frac{1}{\omega\mu} (\vec{k} \times \vec{E}_0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Teorema: } \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) &= (\vec{a} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{c} \\ &\Downarrow \\ \vec{E}_0 \times (\vec{k} \times \vec{E}_0) &= (\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0) \vec{k} - (\vec{E}_0 \cdot \vec{k}) \vec{E}_0 \\ &\Downarrow \\ \langle \vec{S} \rangle &= \frac{1}{2} (\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0) \frac{\vec{k}}{\omega\mu}\end{aligned}$$

$$\boxed{I \equiv \langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon |E_0|^2 \frac{\vec{k}}{k} v}$$

densidade de energia de um campo elétrico **constante**: $w_E = \frac{1}{2} \varepsilon E^2$

densidade de energia de um campo magnético **constante**: $w_H = \frac{1}{2} \mu H^2$

$$I \equiv |\langle \vec{S} \rangle| = \frac{1}{2} \varepsilon E_0^2 \left| \frac{\vec{k}}{k} \right| v$$

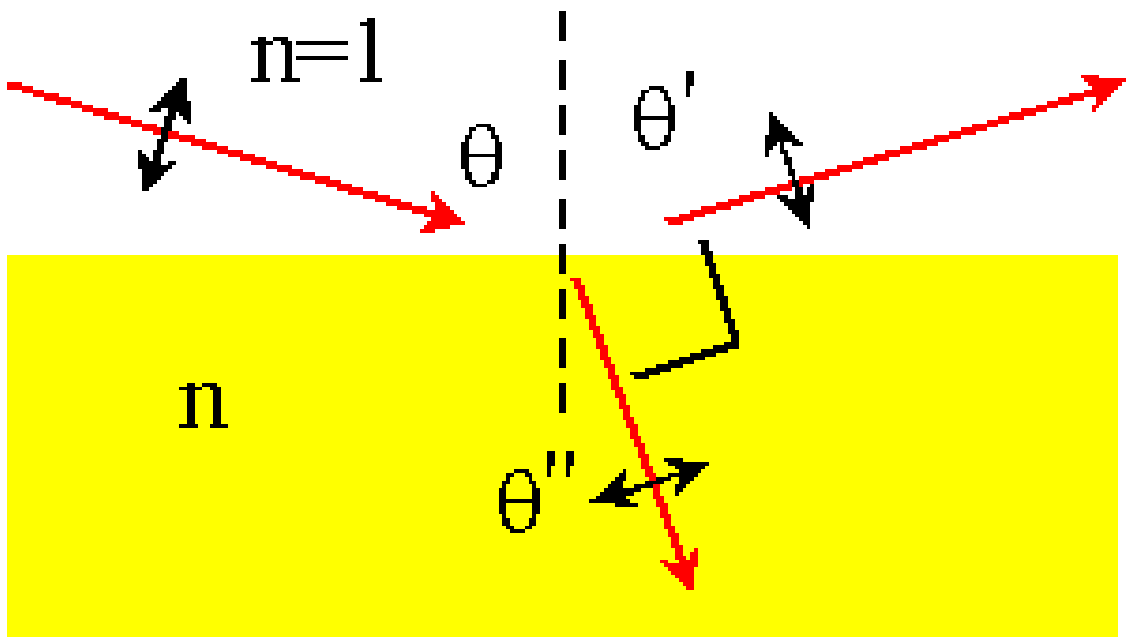
$$\begin{aligned} w_E &= \frac{1}{2} \varepsilon E^2 \\ w_H &= \frac{1}{2} \mu H^2 \Rightarrow \left| \frac{E}{H} \right| = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \Rightarrow \frac{w_E}{w_H} = \frac{\varepsilon E^2}{\mu H^2} = \frac{\varepsilon \mu}{\mu \varepsilon} = 1 \end{aligned}$$

meio não condutor

$$w_E = w_H$$

$$I = \left(\frac{1}{4} \varepsilon E_0^2 + \frac{1}{4} \mu H_0^2 \right) \left| \frac{\vec{k}}{k} \right| v$$

2.5 Ângulo de Brewster



ângulo de incidência: θ reflexão: θ' refração: θ''

$$\begin{aligned} \theta' + \theta'' &= \pi/2 \\ \frac{\sin \theta_B}{\sin \theta''} &= n \\ \sin \theta'' &= \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta'\right) = \sin \frac{\pi}{2} \cos \theta' - \cos \frac{\pi}{2} \sin \theta' = \cos \theta' = \cos \theta_B \end{aligned}$$

$$\text{ângulo de Brewster: } \frac{\sin \theta_B}{\cos \theta_B} = \tan \theta_B = n$$

2.5.1 Energia

Calcule a amplitude do campo elétrico da onda de luz nos seguintes casos:

1. Uma lâmpada de 1000W a 1metro
2. Um laser de He-Ne ($\lambda=0.633\text{nm}$) de 1mW, de forma gaussiana (tipo e^{-r^2/r_o^2}) com um raio $r_o = 0.5\text{mm}$, em $r=0$.
3. Uma onda luminosa harmônica e plana se propagando no ar, com uma intensidade de 10mW/cm^2 .

Capítulo 3

Interferência e Coerência

A pureza espectral ou grau de monocromaticidade da luz, indica o quanto ela está próxima da condição ideal de uma onda harmônica pura, e pode ser medido usando um espectrômetro. Já a coerência, que está relacionada com o comprimento dos trens de onda que formam a radiação luminosa sob estudo, determina a capacidade de produzir franjas de interferência e, conseqüentemente, deve ser medida em experimentos de interferência. Esses conceitos de pureza espectral por um lado, e coerência por outro, aparentemente tão distintos, estão estreitamente relacionados física e matematicamente. Veremos que, se conhecendo um deles, podemos calcular o outro.

3.1 Interferência

Analisaremos a interferência da luz, em termos matemáticos primeiro, e depois a partir de dois arranjos experimentais clássicos: o experimento das fendas de Young, e o interferômetro de Michelson. Este último será extensivamente utilizado para estudar o efeito Doppler e sobretudo para estudar a coerência da luz.

3.1.1 Formalismo matemático

Seja uma onda $\vec{e}(\vec{r}, t)$, formada pela soma das duas ondas harmônicas de freqüências angulares ω_1 e ω_2 e vetores de propagação \vec{k}_1 e \vec{k}_2 respectivamente

$$\begin{aligned}\vec{e}(\vec{r}, t) &= \vec{e}_1(\vec{r}, t) + \vec{e}_2(\vec{r}, t) \\ \vec{e}_1(\vec{r}, t) &= \vec{E}_1 \cos(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega_1 t + \phi_1) = \Re\{\vec{\mathcal{E}}_1(\vec{r}, t)\} \\ \vec{e}_2(\vec{r}, t) &= \vec{E}_2 \cos(\vec{k}_2 \cdot \vec{r} - \omega_2 t + \phi_2) = \Re\{\vec{\mathcal{E}}_2(\vec{r}, t)\}\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{E}}_j(\vec{r}, t) &= \vec{E}_j e^{i\Phi_j(\vec{r})} e^{-i\omega t} & \Phi_j(\vec{r}) &= \vec{k}_j \cdot \vec{r} + \phi_j & \vec{E}_j &= \hat{e}_j E_j \\ & & |\vec{k}_j| &= 2\pi/\lambda & \omega &= 2\pi/T\end{aligned}$$

$\Re\{ \}$ representa a “parte real”, \vec{r} é o vetor de posição e \hat{e}_j é o vetor unitário no eixo “j”. A intensidade resultante é:

$$I = |\langle \vec{S} \rangle| \propto \langle |\vec{e}|^2 \rangle = \langle |\vec{e}_1(\vec{r}, t) + \vec{e}_2(\vec{r}, t)|^2 \rangle$$

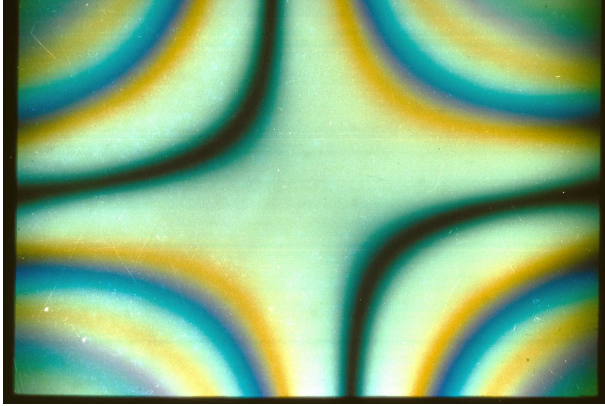


Figura 3.1: *Figura de interferência produzida por um cristal de niobato de lítio com o eixo óptico no plano da figura, observado com luz branca convergente, entre polarizadores cruzados*



Figura 3.2: *Figura de interferência produzida por um cristal de niobato de lítio com o eixo perpendicular ao plano da figura, observado com luz branca convergente, entre polarizadores cruzados*

No que segue convencionaremos trocar o sinal de “proporcionalidade” pelo de “igualdade”, ficando então a expressão da intensidade na forma

$$I = \langle |e_1(\vec{r}, t)|^2 + |e_2(\vec{r}, t)|^2 + 2\vec{e}_1(\vec{r}, t) \cdot \vec{e}_2(\vec{r}, t) \rangle$$

sendo $I_1 = \langle |e_1(\vec{r}, t)|^2 \rangle = \frac{1}{2} |E_1|^2$ $I_2 = \langle |e_2(\vec{r}, t)|^2 \rangle = \frac{1}{2} |E_2|^2$

e $2 \langle \vec{e}_1(\vec{r}, t) \cdot \vec{e}_2(\vec{r}, t) \rangle = \langle \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 [\cos(\Phi_1 + \Phi_2 - (\omega_1 + \omega_2)t) + \cos(\Phi_1 - \Phi_2 - (\omega_1 - \omega_2)t)] \rangle$

onde o símbolo “ $\langle \ \rangle$ ” representa a média temporal¹.

Para o caso de um detector com resposta maior que $\omega_1 - \omega_2$ e muito menor que $\omega_1 + \omega_2$, o primeiro termo à direita da igualdade não será detectado dando um sinal nulo, resultando então:

$$\langle \vec{e}_1(\vec{r}, t) \cdot \vec{e}_2(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{2} \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 \langle \cos(\Phi_1 - \Phi_2 - (\omega_1 - \omega_2)t) \rangle \quad (3.1)$$

onde $\vec{E}_{1,2}$ são constantes. Para o caso que $\omega_1 = \omega_2$, a expressão da intensidade fica

$$I = I_1 + I_2 + \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 \ 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \vec{k}_2 \cdot \vec{r} + \phi_1 - \phi_2) \quad (3.2)$$

que é a expressão mais conhecida para descrever a interferência de duas ondas.

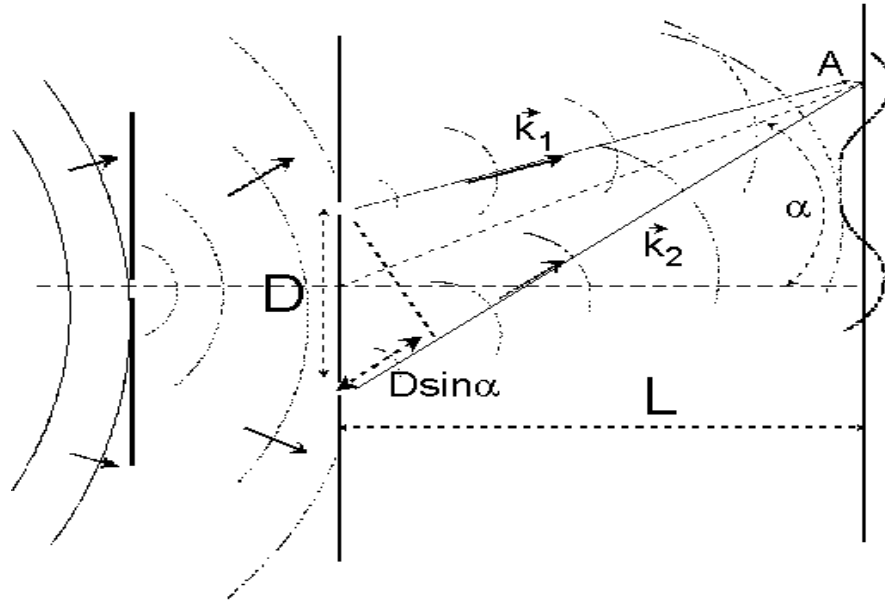


Figura 3.3: *Experimento de interferência das duas fendas de Young*

3.1.2 Fendas de Young

Utilizando a Eq.(3.2) para descrever a formação de franjas de interferência no experimento das fendas de Young, esquematizado na Fig.3.3, podemos supor que, por razões de simetria, as duas ondas têm a mesma fase nas fendas, mas ao chegar no ponto A a diferença de fase entre elas corresponde à diferença de caminho $D \sin \alpha$, ou seja:

$$\phi_1 - \phi_2 + (\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r} = \frac{2\pi D \sin \alpha}{\lambda}$$

o que substituído na Eq.(3.2) resulta em

$$I = I_1 + I_2 + \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 \, 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(2\pi D \sin \alpha / \lambda)$$

dando origem a franjas brilhantes nas posições onde $\sin \alpha = N\lambda/D$ e franjas escuras onde $\sin \alpha = (2N + 1)\lambda/(2D)$, onde N é um número inteiro. Note-se que o vetor \vec{r} representa a posição de observação que pode ser arbitrariamente escolhida como sendo o centro de coordenadas sendo então $\vec{r} = 0$.

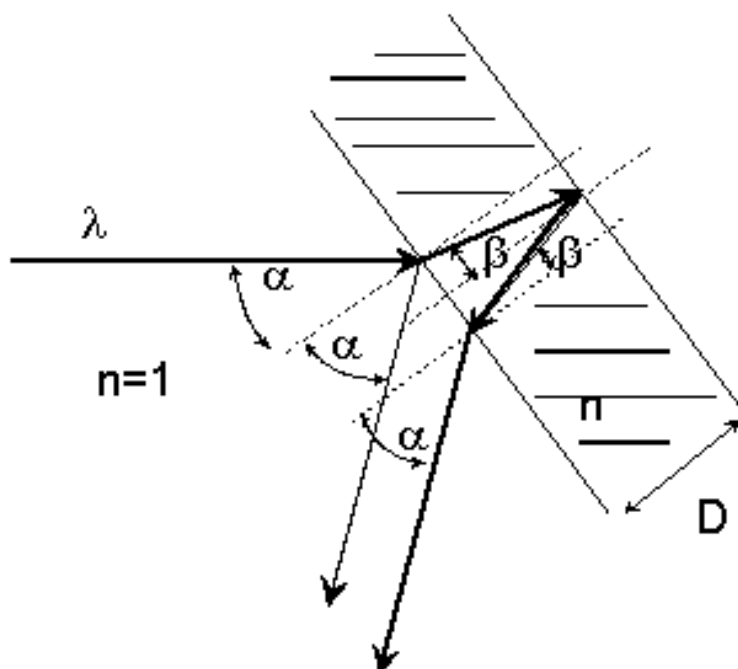


Figura 3.4: Interferência numa lâmina de faces paralelas

3.1.3 Interferência numa lâmina de faces paralelas

A Fig.3.4 mostra esquematicamente um experimento onde a onda luminosa refletida na primeira interface (ar-vidro) interfere com a onda refletida na segunda interface (vidro-ar). Mostre que para o caso do ângulo de incidência ser muito pequeno ($\alpha \ll 1$), a espessura da lâmina D pode ser calculada assim [?]:

$$D = \frac{\lambda n}{\alpha_2^2 - \alpha_1^2} \quad (3.3)$$

onde n é o índice de refração do vidro e λ é o comprimento de onda da luz (suposta coerente). O ângulo α_1 é o ângulo de incidência do feixe onde pode-se ver um mínimo de interferência. O ângulo α_2 corresponde ao próximo mínimo de interferência. Num experimento realizado em aula, foram obtidos os seguintes dados:

- a lâmina utilizada foi um porta objeto de microscópio com espessura aproximada de 1mm,
- iluminação com um laser de He-Ne de $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$,
- posição angular da lâmina para incidência normal ($\alpha = 0$): $3^\circ 41' \pm 1'$,

¹Na verdade a onda luminosa é uma função aleatória e ela, assim como as quantidades derivadas dela (intensidade, por exemplo) devem ser descritas pelas suas “esperanças matemáticas” e não pelas “médias temporais” indicadas pelo símbolo “ $\langle \rangle$ ” [?]. A relação entre “esperança matemática” e “média temporal” (mais fácil de calcular) é bastante complicada e assunto especializado da matemática dos processos aleatórios. Nós adotaremos um critério simples: se o processo (função temporal) aleatório é estacionário (o que significa que suas propriedades estatísticas não dependem do tempo) sua esperança matemática e sua média temporal são equivalentes [?, ?].

- posição angular da lâmina para uma franja escura: $2^{\circ}58'$,
- posição angular da lâmina para a franja escura seguinte: $1^{\circ}48'$,
- índice de refração estimado para o vidro: 1.50 ± 0.005 .

Com os dados acima calcule a espessura da lâmina e estime a precisão dessa espessura.
Resposta: $D = 1.025\text{mm}$ e $\Delta D/D \approx 3\%$ devido basicamente aos erros de medida dos ângulos.

3.1.4 Interferômetro de Michelson

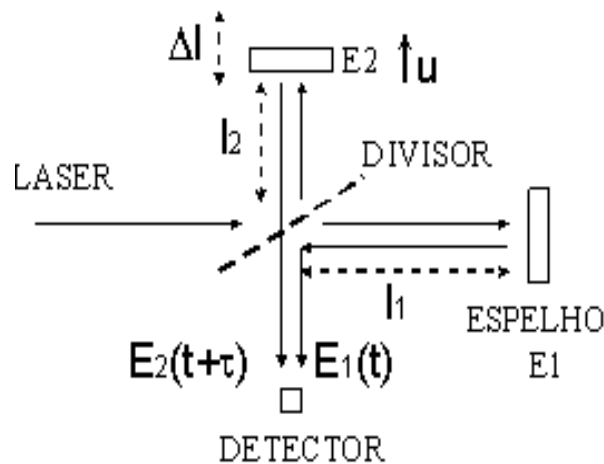


Figura 3.5: *Interferômetro de Michelson.*

Neste caso interferem duas ondas, uma que se reflete no espelho E1 e percorre uma distância $2l_1$ e a outra que se reflete no espelho E2 e percorre uma distância $2l_2$ como indicado na Fig.3.5. Ambas provêm da mesma onda inicial que é dividida no “beam-splitter” (divisor) de 50%. Queremos saber o número de franjas de interferência que passam pelo detector quando deslocamos o espelho E2 de uma distância Δl . O problema pode ser analisado de duas formas:

Analisamos a expressão da intensidade da luz (vide Eq.(3.2) com $\vec{r} = 0$) no estado inicial e no final quando o espelho E_2 desloca-se uma distância Δl . Verificamos a variação na fase ocorrida entre esses dois estados e sabendo que cada 2π radianos representa uma franja, podemos calcular o que queremos, assim:

$$\text{número de franjas: } \frac{(\phi_1 - \phi_2)_{\text{final}} - (\phi_1 - \phi_2)_{\text{inicial}}}{2\pi} = \frac{2 \Delta l}{\lambda}$$

3.2 Coerência e Espectro de Potência

A coerência e a pureza espectral da luz estão diretamente relacionadas entre elas e o caráter aleatório das ondas de luz é fundamental para se compreender estes conceitos. Veremos

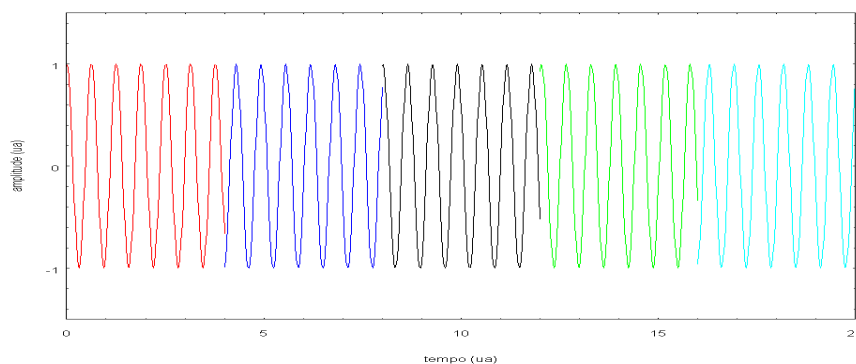


Figura 3.6: Sucessão de pulsos emitidos por uma fonte incoerente

que as idéias de “coerência” e de “espectro de potência” não têm sentido em termos de pulsos isolados e que se aplicam apenas às sucessões de pulsos que formam ondas ditas “estacionárias”.

3.2.1 Introdução

As diferentes fontes de luz (lâmpadas incandescentes, lâmpadas de descarga de gases, arco elétrico, lasers, etc.) emitem trens de ondas ou “pulsos” com determinadas características médias (frequência, amplitude, etc.) incluindo o comprimento do pulso. Os átomos contidos na “lâmpada” são excitados de alguma maneira e por isso algum elétron no átomo passa para um nível energético maior. A decaer ele emite um foton com a energia correspondente à da diferença entre o nível excitado e o de repouso aonde o elétron cai no final do processo. Entre um pulso e o seguinte tudo fica mais ou menos igual exceto sua fase, que varia aleatoriamente devido a estar associada aos diferentes instantes em que cada pulso é emitido. Isto se repete continuamente dando uma sucessão de pulsos com as características médias determinadas pelo processo de decaimento mas sem nenhuma relação de fase entre eles como ilustrado na Fig.3.6

Em lâmpadas de gas de alta pressão, a densidade de átomos é muito grande e por isso o número de colisões entre os átomos aumenta muito. Conseqüentemente o processo de decaimento pode ser interrompido mais rapidamente que se ocorresse sem colisões. O resultado são pulsos mais curtos ainda que com a mesma frequência (cor) média, dada pela diferença de níveis energéticos no átomo, que não muda pelas colisões, obviamente. O caso de radiação laser é bastante diferente: Por causa de um mecanismo especial, o decaimento de um átomo fica sendo “estimulado” ou “iniciado” pelo pulso emitido pelo seu átomo vizinho e isso faz que exista uma “sintonia” de fase entre ambos os pulsos (o estimulante e o estimulado). O resultado disso é uma sucessão de pulsos todos em fase uns com os outros. É como se os pulsos sucessivos estivessem “emendados” sem discontinuidade de fase como ilustrado na Fig.3.7.

Em algum momento essa sintonia é interrompida e tudo recomeça. Por causa desta sintonia os lasers podem emitir pulso de centímetros, metros ou quilômetros enquanto que as fontes ditas “incoerentes” emitem pulsos de micrometros ou milímetros como máximo. O

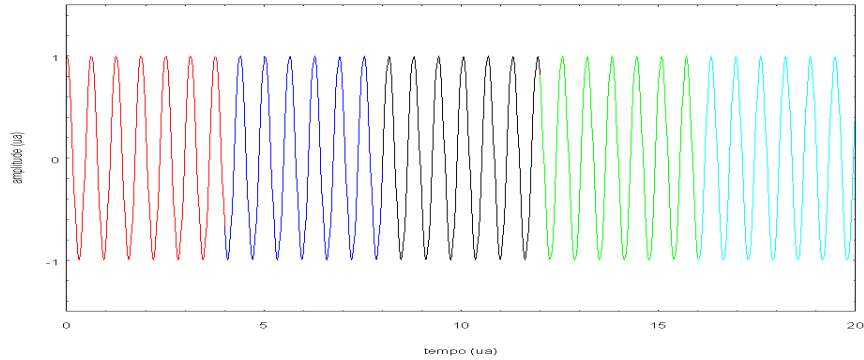


Figura 3.7: Sucessão de pulsos sincronizados emitidos por uma fonte laser, dita coerente

comprimento dos pulsos é uma variável fundamental nos fenômenos de interferência da luz. Num experimento de interferência sempre estamos superpondo dois raios de luz provenientes da mesma fonte mas percorrendo caminhos um pouco diferentes ou superpondo dois feixes provenientes de um mesmo feixe que foi dividido em dois por um “beam-splitter”. O resultado é sempre a superposição de dois feixes um atrasado em relação ao outro, como ilustrado na Fig.3.8.

Ao superpormos esses dois feixes atrasados, há uma região onde se superpõem apenas um pulso com ele mesmo (atrasado) (marcada como “constante” na figura) e outra onde se superpõem um pulso com o seu vizinho e que está marcada como “variável”. Como a relação entre pulsos sucessivos é aleatória, aleatória é também a relação de fase na superposição nessa região. Essa variação rápida de fase não permite visualizar a interferência desses feixes pois os nossos instrumentos de observação são muito mais lentos. Na região marcada como “constante” em câmbio, a posição espacial das franjas de interferência não muda pois a diferença de fase entre os pulsos em questão é sempre a mesma (verifique isso qualitativamente na figura). As franjas de interferência observadas são apenas originadas nessas regiões. A medida que vamos aumentando a diferença de caminho entre os dois feixes no experimento de interferência, a percentagem de luz que contribui efetivamente à visualização das franjas diminui e o contraste dessas franjas diminui também por conta do fundo de luz que não contribui à formação das franjas e que está aumentando. Quando a diferença de caminho é da ordem do comprimento dos pulsos, não veremos mais franjas.

3.2.2 Coerência

O termo de interferência na Eq.(3.1) pode ser também escrito em função da formulação complexa assim:

$$\langle \vec{e}_1(t) \cdot \vec{e}_2(t) \rangle = \Re \{ \langle \vec{\mathcal{E}}_1(t) \cdot \vec{\mathcal{E}}_2^*(t) \rangle \}$$

e a intensidade resultante terá então a seguinte formulação:

$$I = I_1 + I_2 + \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 \cdot 2 \Re \{ \langle \mathcal{E}_1(\vec{r}, t) \mathcal{E}_2^*(\vec{r}, t) \rangle \}$$

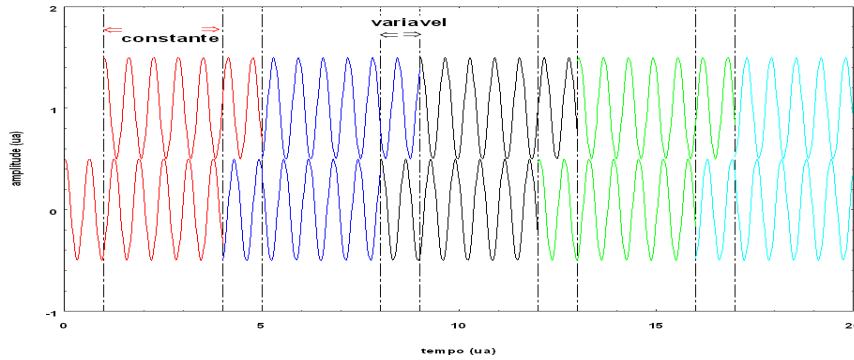


Figura 3.8: Superposição de dois feixes (formados por pulsos) mutuamente defasados. Na região indicada por “constante” a diferença de fase entre os dois pulsos que se puperpõem é constante sempre pois se trata sempre do mesmo pulso. Na região indicada por “variavel” a diferença de fase é sempre distinta para cada vavez, pois se trata sempre de 2 pulsos diferentes.

No caso do interferômetro de Michelson, as duas ondas que estão interferindo são as mesmas, uma atrasada em relação à outra, de forma que a expressão acima pode ser escrita

$$I = I_1 + I_2 + \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 2\Re\{\Gamma(\tau)\} \quad (3.4)$$

$$\Gamma(\tau) = \langle \mathcal{E}_1(t) \mathcal{E}_2^*(t + \tau) \rangle \quad (3.5)$$

onde $\Gamma(\tau)$ é a **função de correlação (auto-correlação)** para o caso de $\mathcal{E}_1(t)$ e \mathcal{E}_2 serem a mesma onda, mesmo que com amplitudes diferentes) e τ é o atraso entre as duas ondas ($\tau = 2\Delta l/c$). A Eq.(3.4) mostra claramente que o interferômetro de Michelson é um “correlômetro”, isto é, um medidor de função de auto-correlação. Definido o “grau de coerência” da luz como

$$\gamma(\tau) = \frac{\Gamma(\tau)}{\Gamma(0)} \quad \Gamma(0) = \sqrt{I_1 I_2}$$

a expressão da intensidade fica

$$I = I_1 + I_2 + \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 2\sqrt{I_1 I_2} \Re\{\gamma(\tau)\} \quad (3.6)$$

A função $\gamma(\tau)$ é complexa e periódica em τ (de fato ela corresponde ao cosseno da expressão na Eq.(3.2), e os valores máximos e mínimos para a intensidade (as franjas) correspondem aos casos

$$\begin{aligned} I_M &= I_1 + I_2 + \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 2\sqrt{I_1 I_2} |\gamma(\tau)| \\ I_m &= I_1 + I_2 - \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 2\sqrt{I_1 I_2} |\gamma(\tau)| \\ \mathcal{V} &= \frac{I_M - I_m}{I_M + I_m} = \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 \frac{2\sqrt{I_1 I_2} |\gamma(\tau)|}{I_1 + I_2} \end{aligned} \quad (3.7)$$

O parâmetro \mathcal{V} é a chamada “visibilidade” das franjas e é claro que ela depende de $|\gamma(\tau)|$ sendo:

$$\begin{array}{ll} \text{máxima para} & |\gamma(\tau)| = 1 \text{ luz totalmente coerente} \\ \text{zero para} & |\gamma(\tau)| = 0 \text{ luz incoerente} \\ \text{intermediária para} & |\gamma(\tau)| < 1 \text{ luz parcialmente coerente} \end{array}$$

É interessante destacar que, ao escrever a expressão de $\Gamma(\tau)$ na Eq.(3.5), estamos implicitamente supondo que ela não depende do instante t em que o cálculo (ou a medida) é feito: isso significa admitir o caráter estacionário da $\mathcal{E}(t)$. Ou seja que, para definir sua função de auto-correlação, a função envolvida deve ser necessariamente estacionária.

3.2.2.1 Tempo de coerência e comprimento de coerência

Vamos calcular a expressão de $\gamma(\tau)$ para um modelo simplificado de luz. Seja uma luz do tipo [?]

$$\mathcal{E}(t) = E_o e^{-i\omega t} e^{i\phi(t)} \quad 0 \leq \phi(t) \leq 2\pi \quad (3.8)$$

onde $\phi(t)$ assume aleatoriamente e com igual probabilidade quaisquer valores dentro do intervalo $[0, 2\pi]$, ficando constante por um tempo τ_o , como ilustrado na Fig.3.9.

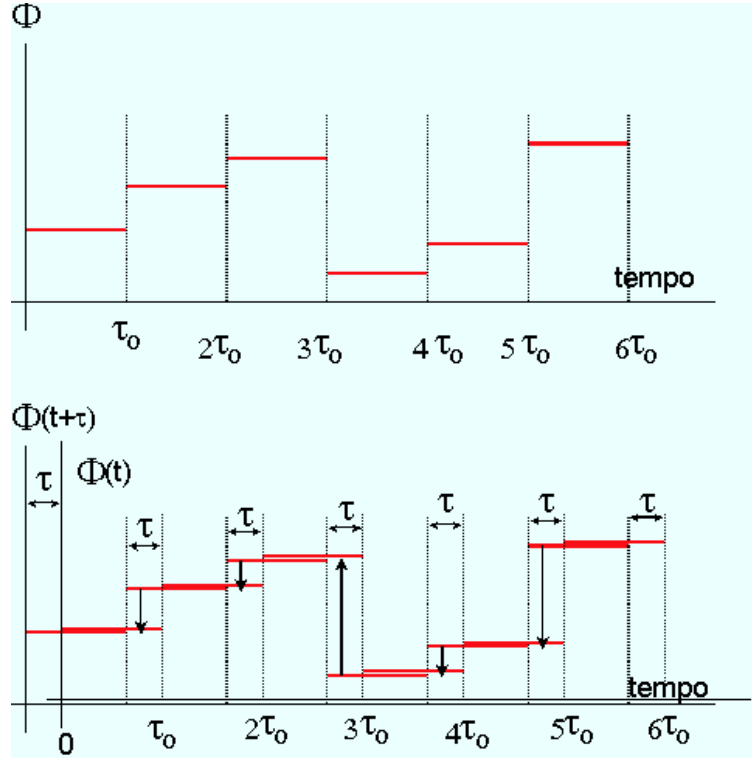


Figura 3.9: Gráfico superior: Evolução da fase para o modelo de luz descrito na Eq.(3.8). Gráfico inferior: superposição de $\phi(t)$ com $\phi(t + \tau)$ (levemente deslocada na vertical para facilitar a visualização).

Para calcular o grau de coerência complexo

$$\begin{aligned}\gamma(\tau) &= \frac{\langle \mathcal{E}(t)\mathcal{E}^*(t+\tau) \rangle}{\langle |\mathcal{E}(t)|^2 \rangle} = e^{i\omega\tau} \langle e^{-i(\phi(t) - \phi(t+\tau))} \rangle \\ &\langle e^{-i(\phi(t) - \phi(t+\tau))} \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(\phi(t) - \phi(t+\tau))} dt\end{aligned}$$

Ao formular a média temporal acima estamos supondo, como indicado na sec.3.1, que estamos tratando com uma onda estacionária. Para isso vamos considerar não apenas um pulso, mas uma sucessão deles, cujo conjunto constitui a onda estacionária em questão. Para calcular a integral acima podemos supor que T inclui um número inteiro de intervalos τ_o e fazer então o cálculo

$$\begin{aligned}\langle e^{-i(\phi(t) - \phi(t+\tau))} \rangle &= \langle \frac{1}{\tau_o} \int_0^{\tau_o - \tau} e^{-i(\phi(t) - \phi(t+\tau))} dt \rangle + \\ &\langle \frac{1}{\tau_o} \int_{\tau_o - \tau}^{\tau_o} e^{-i(\phi(t) - \phi(t+\tau))} dt \rangle\end{aligned}$$

Considerando (vide a Fig.3.9) que no intervalo $[0, \tau_o - \tau]$ a diferença de fase é sempre zero, e que no outro intervalo $[\tau_o - \tau, \tau_o]$ ela é aleatória (resultando numa integral nula), o resultado será

$$\gamma(\tau) = e^{i\omega\tau} \Lambda\left(\frac{\tau}{\tau_o}\right) \quad (3.9)$$

$$|\gamma(\tau)| = \Lambda\left(\frac{\tau}{\tau_o}\right) \quad (3.10)$$

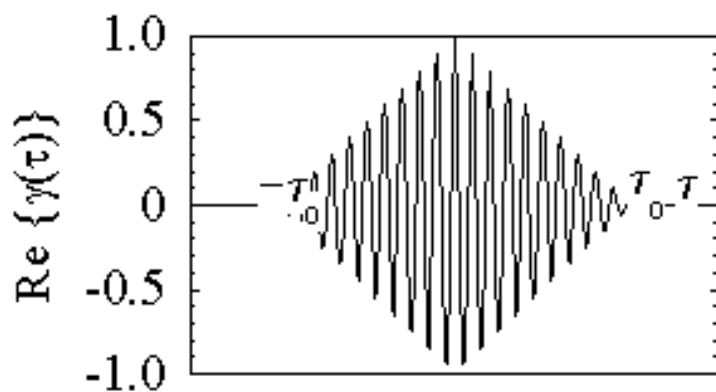
Onde “ Λ ” é a função “triângulo”

$$\Lambda(x) = 1 + x \quad \text{para } -1 \leq x \leq 0 \quad (3.11)$$

$$= 1 - x \quad \text{para } 0 \leq x \leq 1 \quad (3.12)$$

$$= 0 \quad \text{para } |x| \geq 1 \quad (3.13)$$

Fica evidente que τ_o representa o comprimento (em termos temporais) da coerência da luz. Para tempos maiores que ele, o termo de interferência desaparece e a soma é incoerente.



A figura mostra $\Re\{\gamma(\tau)\}$, que representa o termo de interferência, ficando evidente a presença de máximos e mínimos na intensidade da luz, ou seja, mostra as franjas de interferência com frequência angular ω , cuja visibilidade vai diminuindo à medida que aumenta τ , até $\tau = \tau_0$, a partir de onde fica constante em zero.

Figura 3.10: Parte real do grau de coerência complexo para o modelo de luz da Fig.3.9

Capítulo 4

Difração

Estudaremos a difração da luz utilizando o formalismo clássico para o cálculo da difração como é apresentado no textos de Óptica [?].

4.1 Introdução

O primeiro registro do fenômeno da difração apareceu num trabalho de Leonardo da Vinci (1452-1519), mas a descrição rigorosa so apareceu num livro (1665) de Grimaldi. Na época dominava amplamente a teoria copuscular que não podia explicar a difração. O primeiro a propor uma teoria ondulatoria foi Huygens, em 1678, que aparentemente desconhecia o trabalho de Grimaldi. Em 1818 Fresnel publicou um trabalho mostrando que a difração poderia ser explicada com a construção de Huygens para a propagação da luz, junto com o principio de interferencia das ondas. Em 1882 Kirchhoff colocou o assunto sobre bases matemáticas mais sólidas e desde então o assunto foi evoluindo permanentemente.

4.2 Formalismo clássico

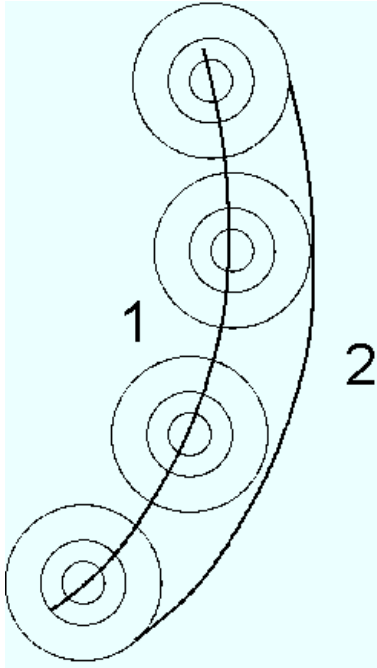
4.2.1 Principio de Huygens-Fresnel

4.2.2 Difração por uma fenda

Antes de nos aprofundar num formalismo matemático mais complexo vamos estudar a difração com a abordagem ondulatória mais simples. Vamos supor uma onda luminosa plana de amplitude E_0 incidindo perpendicularmente no plano da fenda. Queremos calcular a amplitude das ondas que chegam ao ponto \mathbf{P} no anteparo, vindas da fenda. Para isso vamos decompor a fenda em pequenos segmentos de comprimento a (o da fenda) e de largura dx , suficientemente pequena para poder supor que a amplitude é uniforme em cada segmento. Somamos todos os segmentos para dar a amplitude total. Calculemos primeiro a amplitude dE_x que chega ao ponto \mathbf{P} no anteparo, vinda do segmento na posição x medida a partir do centro da fenda como indicado na Fig.4.2:

$$dE_x = \frac{E_0 a dx}{ab r} \sin(kr - \omega t + k\Delta) \quad (4.1)$$

$$\text{onde } \Delta \equiv x \sin \theta \text{ e } r \gg b \quad (4.2)$$



[b]

Segundo Huygens, cada ponto de uma frente de onda pode ser considerado, por sua vez, como um centro gerador de uma onda esférica (secundária) centrada nele. A frente de onda principal num tempo posterior está determinada pela envolvente, num dado instante, de todas essas ondas secundárias. As amplitudes e fases dessas ondas secundárias teriam que ter determinadas propriedades matemáticas para descrever corretamente o fenômeno e fazer com que, por exemplo, a onda se propagasse para frente e não para trás.

Figura 4.1: Teoria de Huygens para a propagação da luz

onde Δ é a diferença de caminho em relação ao centro da fenda. A expressão simétrica à mesma distância x mas para acima é

$$dE_{x^-} = \frac{E_0 dx}{b r} \sin(kr - \omega t - k\Delta) \quad (4.3)$$

e a soma dos dois fica

$$dE = dE_x + dE_{x^-} = \frac{E_0 dx}{b r} 2 \sin(kr - \omega t) \cos(k\Delta) \quad (4.4)$$

$$\text{porque } \sin \alpha + \sin \beta = 2 \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2} \quad (4.5)$$

Para calcular a contribuição da fenda toda, sobre o ponto \mathbf{P} , integramos de 0 até $b/2$ assim

$$E = \int_{x=0}^{x=b/2} dE = \frac{2E_0}{b r} \sin(kr - \omega t) \int_0^{b/2} \cos(kx \sin \theta) dx \quad (4.6)$$

$$= \frac{2E_0}{b r} \sin(kr - \omega t) \left[\frac{\sin(kx \sin \theta)}{k \sin \theta} \right]_0^{b/2} = \frac{2E_0}{b r} \sin(kr - \omega t) \frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k \sin \theta} \quad (4.7)$$

$$E = \frac{E_0}{r} \sin(kr - \omega t) \frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \quad (4.8)$$

Para calcularmos a intensidade correspondente a essa amplitude, devemos calcular a média temporal do módulo quadrado dessa amplitude assim

$$I(\theta) = \langle |E|^2 \rangle = \left(\frac{E_0}{r} \right)^2 \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 \langle \sin^2(kr - \omega t) \rangle \quad (4.9)$$

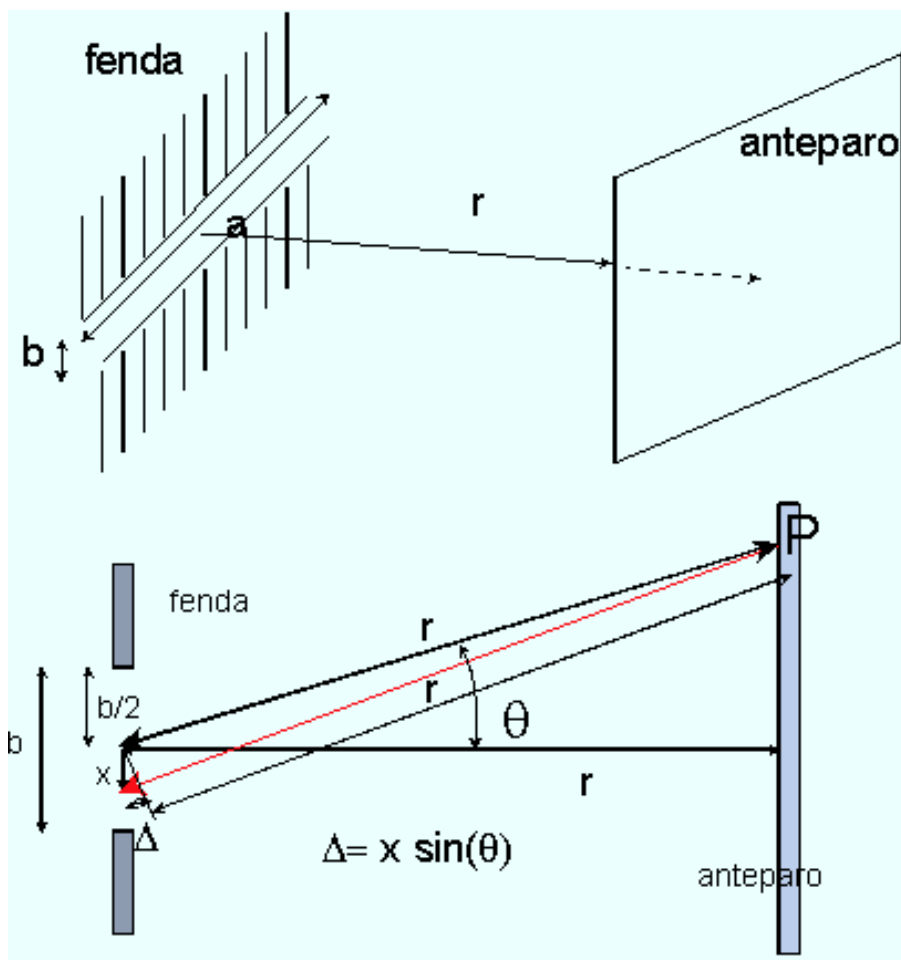


Figura 4.2: Difração por uma fenda de largura b e comprimento infinito, observado num anteparo a uma distância muito grande.

sabendo que $\langle \sin^2(kr - \omega t) \rangle = 1/2$ concluímos que

$$I(\theta) = I(0) \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 \quad I(0) = \frac{1}{2} \frac{E_0^2}{r^2} \quad (4.11)$$

Podemos escrever o resultado acima de forma simplificada chamando $\Phi \equiv kb \sin \theta$, que representa a diferença de fase dos dois raios saindo dos extremos da fenda, e substituindo na fórmula acima

$$I(\theta) = I(0) \left(\frac{\sin \Phi/2}{\Phi/2} \right)^2 \quad (4.12)$$

$$\text{lembrando que } \lim_{\Phi \rightarrow 0} \frac{\sin \Phi/2}{\Phi/2} = 1 \quad (4.13)$$

4.2.3 Fenda dupla

Para o caso das duas fendas ilustradas na Fig.4.3 o procedimento é similar excepto que x é medida a partir do centro de simetria das duas fendas e a integração deve estar de acordo

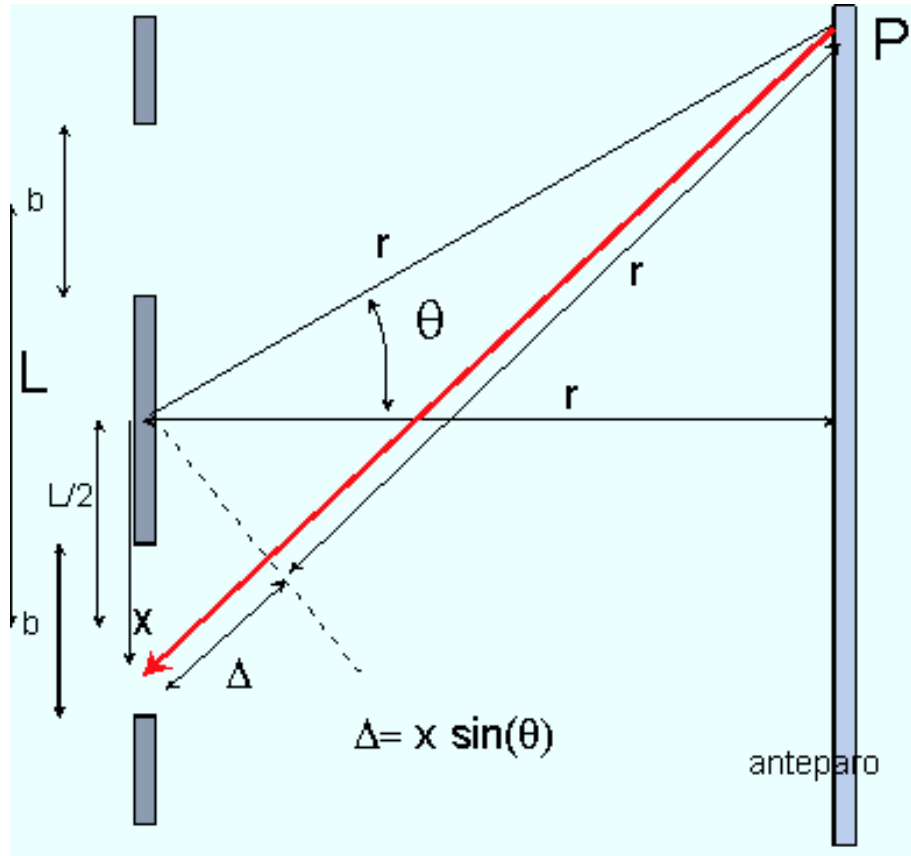


Figura 4.3: Difração por duas fendas de largura b e comprimento infinito, separadas de uma distância L e observada num anteparo a uma distância muito grande.

com este novo esquema. Partindo da Eq.(4.6)

$$E = \frac{2E_0}{b r} \sin(kr - \omega t) \int_{x=L/2-b/2}^{x=L/2+b/2} \cos(kx \sin \theta) dx \quad (4.14)$$

$$= \frac{2E_0}{b r} \sin(kr - \omega t) \left[\frac{\sin(kx \sin \theta)}{k \sin \theta} \right]_{L/2-b/2}^{L/2+b/2} \quad (4.15)$$

$$= \frac{E_0}{r} \sin(kr - \omega t) \frac{\sin(k(L/2 + b/2) \sin \theta) - \sin(k(L/2 - b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \quad (4.16)$$

$$E = 2 \frac{E_0}{2r} \sin(kr - \omega t) 2 \cos(k(L/2) \sin \theta) \frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \quad (4.17)$$

Com o mesmo raciocínio desenvolvido para a fenda única, calculamos agora a intensidade total como

$$I(\theta) = 2I(0) 2 \cos^2(k(L/2) \sin \theta) \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 \quad (4.18)$$

sabendo que $2 \cos^2 \alpha = 1 + \cos 2\alpha$ que substituímos acima, resulta (4.19)

$$I(\theta) = 2I(0) \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 [1 + \cos(kL \sin \theta)] \quad (4.20)$$

$$I(\theta) = 2I(0) \left(\frac{\sin \Phi/2}{\Phi/2} \right)^2 [1 + \cos(kL \sin \theta)] \quad \text{onde} \quad \Phi \equiv kb \sin \theta \quad (4.21)$$

$$(4.22)$$

Note que o termo entre parentéses retos representa a difração por duas fendas infinitamente finas (Experimento das Fendas de Young) separadas de uma distância L enquanto que o primeiro termo representa a difração por uma fenda larga (largura b). Assim o resultado pode ser interpretado como sendo a difração de duas fendas finas, modulada pela difração da largura real de cada uma delas.

4.2.3.1 Outra forma

Podemos chegar ao resultado na Eq.(4.21) de uma outra forma, escrevendo a amplitude total no ponto \mathbf{P} como

$$A = a + a e^{i\delta} \quad (4.23)$$

$$\delta \equiv kL \sin \theta \quad (4.24)$$

sendo que δ é a diferença de fase entre as ondas chegando ao ponto \mathbf{P} a partir de cada uma das duas fendas e a é a amplitude (complexa) de cada uma das fendas. A intensidade total será então

$$|A|^2 = A.A^* = |a|^2 (1 + e^{i\delta})(1 + e^{-i\delta}) = 2|a|^2 (1 + \cos \delta) \quad (4.25)$$

Substituindo o valor de a acima pela expressão calculada para uma unica fenda temos a expressão final

$$I = I(0) 2 \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 (1 + \cos kL \sin \theta) \quad (4.26)$$

4.2.4 Múltiplas fendas: Rede de difração

Para o caso de um numero grande de fendas, igualmente espaçadas. podemos escrever a amplitude total resultante como

$$A e^{i\theta} = a(1 + e^{i\delta} + e^{i2\delta} + \dots + e^{i(N-1)\delta}) = a \frac{1 - e^{iN\delta}}{1 - e^{i\delta}} \quad (4.27)$$

$$\delta \equiv 2\pi L \sin \theta / \lambda = kL \sin \theta \quad (4.28)$$

onde L é a separação entre as fendas (período espacial) e θ é o ângulo de observação, como indicados na Fig.fig-diffend2. Para calcular a intensidade, multiplicamos a expressão acima pela sua complexa conjugada

$$I \propto |A e^{i\theta}|^2 = A^2 = a^2 \frac{1 - e^{iN\delta}}{1 - e^{i\delta}} \frac{1 - e^{-iN\delta}}{1 - e^{-i\delta}} \quad (4.29)$$

$$I \propto a^2 \frac{1 - \cos N\delta}{1 - \cos \delta} \quad (4.30)$$

$$\text{e substituindo } 1 - \cos \alpha = 2 \sin^2(\alpha/2) \text{ resulta} \quad (4.31)$$

$$I \propto A^2 = a^2 \frac{\sin^2(N\delta/2)}{\sin^2(\delta/2)} \quad (4.32)$$

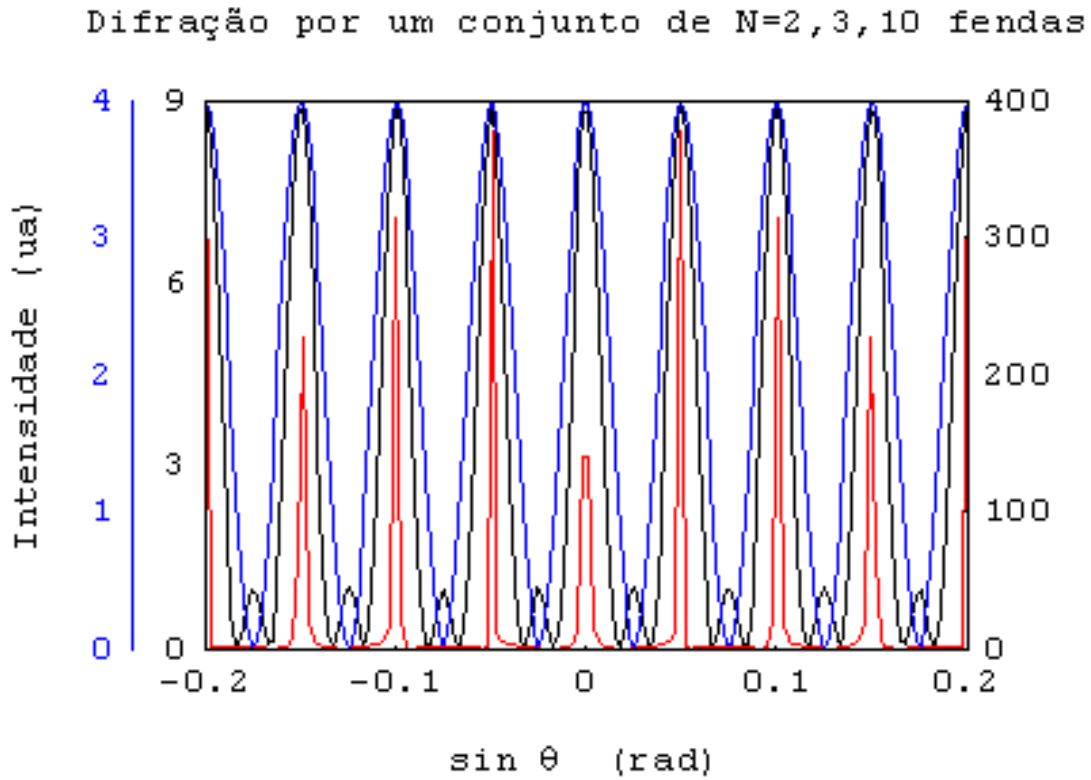


Figura 4.4: Difração de uma rede (ua) em função de $\sin \theta$ (rad) para uma rede de $N=2,3$ e 20 fendas iguais e igualmente espaçadas com período $L=10\mu\text{m}$

Substituindo o valor de a pela sua expressão calculada para uma única fenda

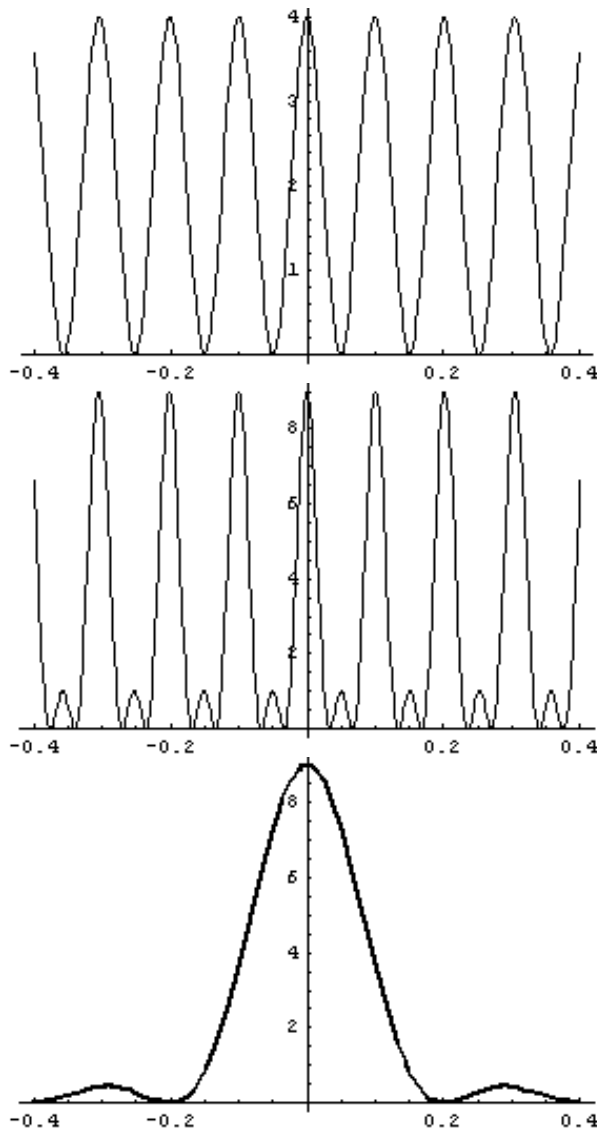
$$a^2 = I(0) \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 \quad (4.33)$$

resulta

$$I \propto A^2 = I(0) \left(\frac{\sin(k(b/2) \sin \theta)}{k(b/2) \sin \theta} \right)^2 \frac{\sin^2(Nk(L/2) \sin \theta)}{\sin^2(k(L/2) \sin \theta)} \quad (4.34)$$

4.3 Problemas

4.4 Difração



De cima para baixo: a primeira figura mostra um gráfico da intensidade da luz difratada (sempre em unidades arbitrárias), por duas fendas retangulares infinitamente finas e separadas de uma distância a , em função do ângulo em radianos. A segunda figura dá a mesma informação, mas para três fendas, também infinitamente finas e com o mesmo espaçamento a entre as fendas. A terceira figura mostra a difração de uma única fenda de largura igual a $a/2$. A quarta e última figura mostra a superposição das figuras segunda e terceira.

- Como seria o gráfico mostrando a difração de 3 fendas de largura $a/2$ e igualmente separadas de uma distância a (centro-a-centro) Γ Guarde as proporções.
- Alguma das franjas de difração seria mais intensa que as outras Γ Qual Γ
- Algumas das franjas desapareceriam Γ Quais Γ
- Quanto vale a em termos do comprimento de onda λ da luz difratada Γ

Parte II

Relatividade

Capítulo 5

Relatividade Especial[?]

5.1 Cinemática clássica

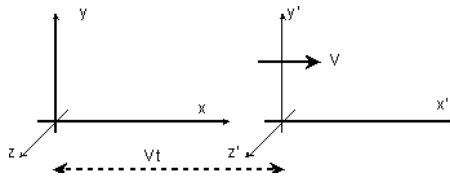


Figura 5.1: *Sistemas referenciais inerciais, sendo S o da esquerda, em repouso e S' o da direita se afastando com velocidade V em relação a S ao longo do eixo x.*

Um ponto P com coordenadas (x, y, z, t) no sistema referencial inercial S tem coordenadas (x', y', z', t') no sistema S' . As coordenadas de um evento em um sistema estão relacionadas com as coordenadas no outro, pelas Transformações de Galileu:

$$\begin{aligned}x' &= x - Vt & x &= x' + Vt \\y' &= y & y &= y' \\oz' &= z & z &= z' \\t' &= t & t &= t' \\r^{\vec{}} &= r^{\vec{}} - \vec{V}t & r^{\vec{}} &= r^{\vec{}} + \vec{V}t\end{aligned}\tag{5.1}$$

com

$$\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z\tag{5.2}$$

$$\vec{r}^{\vec{}} = \vec{i}^{\vec{}}x' + \vec{j}^{\vec{}}y' + \vec{k}^{\vec{}}z'\tag{5.3}$$

A soma de velocidades resulta ser

$$\frac{d\vec{r}^{\vec{}}}{dt} = \frac{d\vec{r}^{\vec{}}}{dt} + \vec{V}\tag{5.4}$$

e a aceleração fica invariante

$$\vec{a} = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{d^2r^i}{dt^2} \quad (5.5)$$

O enunciado da Relatividade Clássica fica assim:

As leis da natureza são iguais em todos os sistemas de referência inerciais

5.2 Experimento de Michelson-Morley

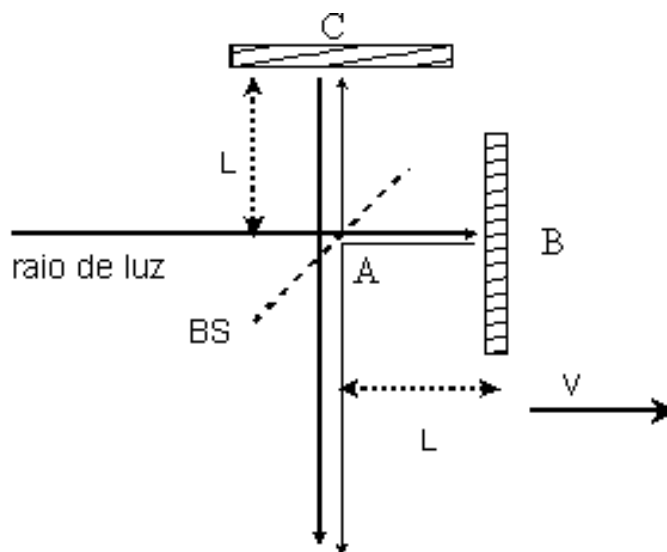


Figura 5.2: *Interferômetro de Michelson: BS semiespelho, C e B espelhos fixos.*

Trata-se de um experimento de interferometria (cujo resultado final foi anunciado em 1887) que se destinava a medir a velocidade da luz que na época acreditava-se se propagar num “éter” que preencheria o espaço todo. Seja V a velocidade (conhecida já na época) com que a Terra se propaga no Espaço e seja c a velocidade da luz no “éter”. Pela cinemática clássica, a velocidade resultante da luz na direção do movimento da Terra, na direção oposta e na direção perpendicular (Fig.5.3) seriam, respectivamente,

$$c - V, \quad c + V \quad \text{e} \quad \sqrt{c^2 - V^2} \quad (5.6)$$

e os tempos para um feixe de luz percorrer ABA e ACA seriam respectivamente

$$t_{ABA} = \frac{L}{c - V} + \frac{L}{c + V} = \frac{2L/c}{1 - V^2/c^2} \quad (5.7)$$

$$t_{ACA} = \frac{2L/c}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \neq t_{ABA} \quad (5.8)$$

Os cálculos acima mostram que ambos os tempos deveriam ser diferentes mas nunca se observou diferença alguma!!

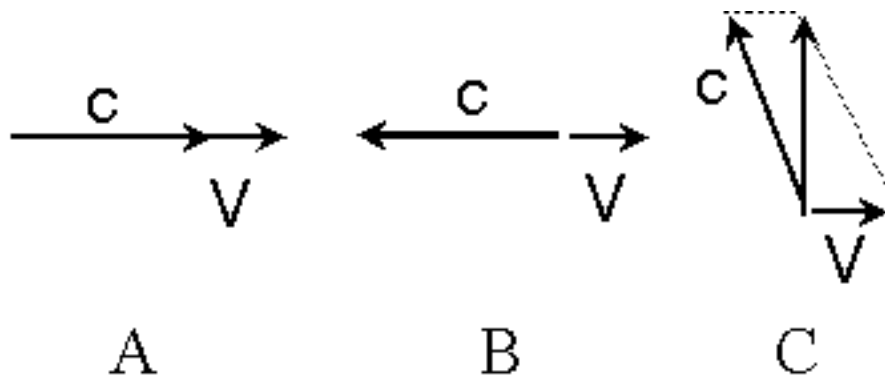


Figura 5.3: *Velocidade total da luz calculada na direção do movimento da Terra (A), na direção oposta à do movimento da Terra (B) e na direção perpendicular à do movimento da Terra (C)*

5.2.1 Contração de Fitzgerald

Frente ao resultado surpreendente do experimento de Michelson-Morley (M-M), pensou-se numa solução: Um objeto ao se mover numa direção no “éter” (ainda o éter !!) devia sofrer uma contração (na direção do movimento) assim:

$$L \Rightarrow L\sqrt{1 - V^2/c^2} \quad (5.9)$$

pelo que o tempo t_{ABA} , no experimento de M-M, seriam agora

$$t_{ABA} = \frac{2(L\sqrt{1 - V^2/c^2})/c}{1 - V^2/c^2} = \frac{2L/c}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.10)$$

enquanto que o outro braço do interferômetro não sofreria contração nenhuma e continuaria tendo o valor indicado em Eq.(5.8), sendo assim $t_{ABA} = t_{ACA}$ como indicado pelo experimento.

5.3 Relatividade Especial

A teoria de contração de Fitzgerald não se mostrou consistente e resultou ser insustentável. Uma formulação mais geral para explicar os resultados do experimento de M-M, foi elaborada mais tarde por Einstein, que estabeleceu os seguintes postulados:

1. As equações da Física são as mesmas em todos os referenciais inerciais.
2. A velocidade da luz é a mesma em todos os referenciais inerciais.

Uma consequência direta destes postulados foi que

↓

o espaço e o tempo não são absolutos mas relativos

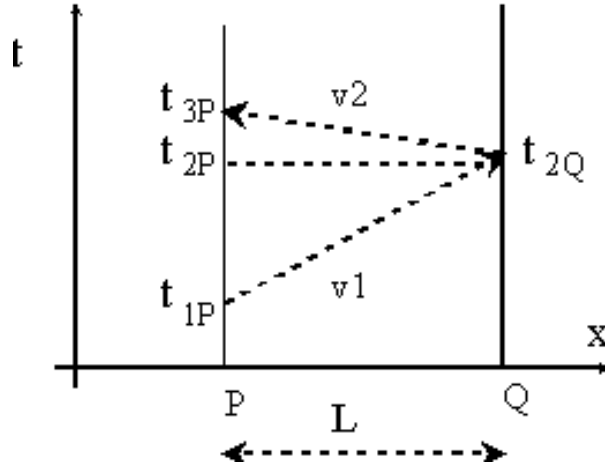


Figura 5.4: *Sincronização de relógios num mesmo referencial*

5.3.1 Relatividade do tempo

Em decorrência dos postulados de Einstein foi necessário definir de forma precisa a noção de “tempo”. Isso envolvia o problema de como se comparar tempos medidos em diferentes sistemas inerciais, ou, dito de outra forma, como sincronizar relógios em diferentes sistemas inerciais. Como se pode sincronizar 2 relógios colocados em dois pontos distantes P e Q Γ Para isso vamos utilizar a ferramenta mais adequada à mão: a luz, que pelos postulados de Einstein, tem a mesma velocidade em todos os sistemas inerciais. Vamos mandar um raio de luz de P para Q que vai ser refletido e re-enviado a P . O experimento está esquematizado na Fig.5.4. O evento $2P$ que é simultâneo com $2Q$ ocorre no tempo calculado assim

$$\overline{PQ} = L = (t_{2Q} - t_{1P})v_1 = (t_{3P} - t_{2Q})v_2 \quad (5.11)$$

$$\Downarrow$$

$$t_{2P} \equiv \frac{t_{3P}v_2 + t_{1P}v_1}{v_1 + v_2} \quad t_{2Q} = t_{2P} \quad (5.12)$$

No caso particular $v_1 = v_2$ temos

$$t_{2P} = \frac{t_{3P} + t_{1P}}{2} = t_{2Q} \quad (5.13)$$

Mas o que acontece agora se os pontos P e Q estão em referenciais inerciais diferentes, se afastando um em relação ao outro ao longo do eixo $x - x'$ como indicado na Fig.5.5 Γ Na Fig.5.6 o ponto Q fixo ao referencial S' “vê” o ponto P no referencial S se afastar para a esquerda. O ponto Q envia um raio para P , no instante t_{Q1} (medido no relógio de Q) que atinge o ponto P no instante t_{P2} (agora medido no relógio de P) que é refletido de volta e chega ao ponto Q no instante t_{Q3} (no relógio de Q). O instante t_{Q2} se calcula a partir dos tempos t_{Q1} e t_{Q3} , medidos no ponto Q

$$t_{Q2} = \frac{t_{Q3} + t_{Q1}}{2} \quad (5.14)$$

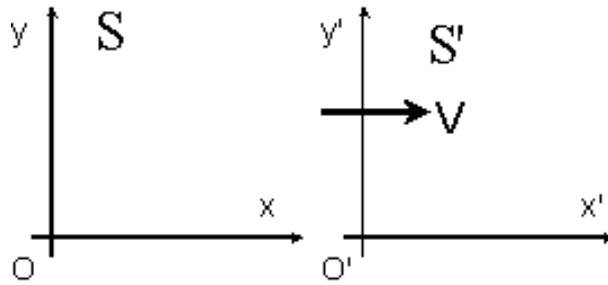


Figura 5.5: Referencial S' se afastando do referencial S

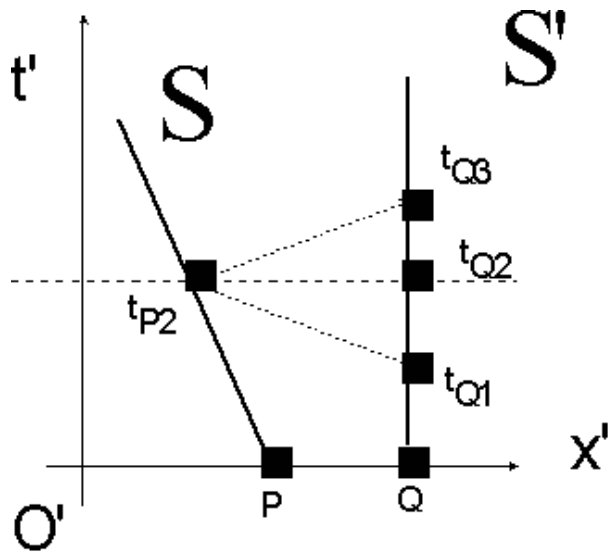


Figura 5.6: Sincronização de relógios desde o referencial S'

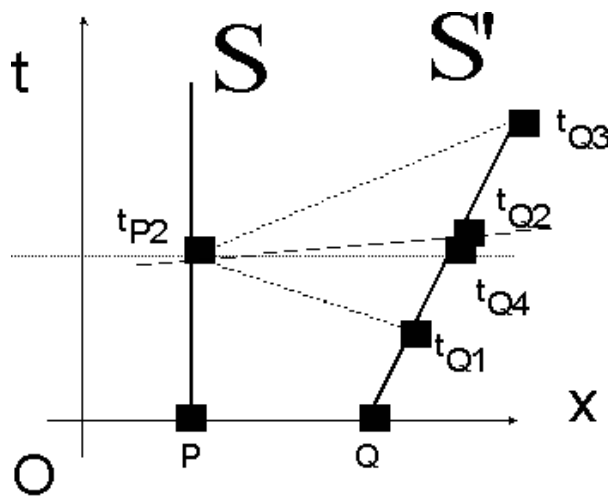


Figura 5.7: Sincronização de relógios no referencial S

que por definição deve ser simultâneo com o t_{P2} medido em P :

$$t_{Q2} = t_{P2}. \quad (5.15)$$

Ou seja, o evento **P2** no referencial **S** que se move em relação ao **S'** é simultâneo com o evento **Q2** medido neste último. A linha tracejada na Fig.5.6 representa os eventos, em outros referenciais em movimento em relação ao **S'**, que são simultâneos com o evento **Q2** medido neste referencial.

Vejam agora o mesmo experimento visto no referencial **S** em repouso que “vê” o referencial **S'** se afastar para a direita como indicado na Fig.5.7. Neste caso, o cálculo anterior que conduz ao valor t_{Q2} continua sendo obviamente o mesmo:

$$t_{Q2} = \frac{t_{Q3} + t_{Q1}}{2} \quad (5.16)$$

o que significa que, visto de Q em movimento para a direita, $P2$ e $Q2$ são simultâneos. Mas visto de P em repouso,

$$t_{P2} = t_{Q4} \neq t_{Q2} \quad (5.17)$$

ou seja, $P2$ é simultâneo com $Q4$ e não com $Q2$. A linha tracejada na Fig.5.7 representa os eventos simultâneos (curva isotempo) com **Q2** medidos em um referencial **S'** em movimento e a linha pontilhada representa os eventos simultâneos (curva isotempo) com **P2**, medidos num referencial fixo **S**. Os isotempos em um e outro referencial **são diferentes**.

5.3.2 Conclusões

O experimento de Michelson-Morley levou primeiro à idéia de que o espaço teria que se contrair num referencial em movimento: a contração de Fitzgerald. Essa idéia veio depois a ser substituída pelo postulado da constância universal (em todos os referenciais inerciais) da velocidade da luz (relatividade especial) cuja consequência imediata foi:

⇓

o tempo não é absoluto mas depende do referencial em que está sendo medido.

Essa relatividade do tempo (note-se que a noção de espaço já era relativa ao sistema de referência, mesmo na cinemática clássica) é o elemento básico da Teoria de Relatividade de Einstein.

5.4 Transformação de Lorentz

Trata-se de estudar a propagação da luz vista em dois referenciais inerciais diferentes: o $\mathbf{S}=\{x,y,z,t\}$ em repouso e o $\mathbf{S}'=\{x',y',z',t'\}$ se deslocando com velocidade V para a direita ao longo do eixo x como ilustrado na Fig5.1. Supomos que inicialmente as origens dos dois sistemas coincidem:

$$x = y = z = t = 0 \quad (5.18)$$

$$x' = y' = z' = t' = 0 \quad (5.19)$$

Podemos escrever as coordenadas de um evento em um sistema em função das coordenadas no outro sistema mediante uma transformação linear do tipo:

$$z' = z \quad (5.20)$$

$$y' = y \quad (5.21)$$

$$x' = xk + lt \quad (5.22)$$

$$t' = xm + nt \quad (5.23)$$

que para o caso de focalizarmos a origem do sistema S' ($x' = 0$) teremos

$$x' = 0 \quad x = Vt \quad (5.24)$$

o que substituído na Eq.(5.22) resulta em

$$0 = Vtk + lt \rightarrow l = -Vk \quad (5.25)$$

que permite re-escrever as Eqs.(5.22) e (5.23)

$$x' = k(x - Vt) \quad (5.26)$$

$$t' = xm + nt \quad (5.27)$$

Supondo que estamos estudando a propagação de uma onda esférica de luz originada na origem no momento em que as origens dos dois sistemas S e S' coincidiram, teremos as equações da frente de onda representada nos referenciais S e S' , que, em função do postulado da constância das leis da Física e da velocidade da luz, devem ser escritas assim

$$x^2 + y^2 + z^2 - c^2t^2 = 0 \Rightarrow x^2 - c^2t^2 = 0 \quad (5.28)$$

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2t'^2 = 0 \Rightarrow x'^2 - c^2t'^2 = 0 \quad (5.29)$$

respectivamente. Substituindo as Eqs.(5.26) e (5.27) na Eq.(5.29) temos

$$k^2(x - Vt)^2 - c^2(xm + nt)^2 = 0 \quad (5.30)$$

↓

$$x^2(k^2 - c^2m^2) - 2xt(k^2V + c^2mn) - t^2(c^2n^2 - k^2V^2) = 0 \quad (5.31)$$

Comparando a Eq.(5.31) com a Eq.(5.28), e levando em conta que ambas devem representar o mesmo fenômeno, concluímos que ambas equações devem ser idênticas, e para isso deve ser

$$k^2 - c^2 m^2 = 1 \quad (5.32)$$

$$k^2 V + c^2 m n = 0 \quad (5.33)$$

$$c^2 n^2 - k^2 V^2 = c^2 \quad (5.34)$$

Das Eqs.(5.32-5.34) resulta

$$n = \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.35)$$

$$k = \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.36)$$

$$m = \frac{V/c^2}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.37)$$

Substituindo os valores de n , k e m no sistema de Eqs.(5.22-5.23) resultam as

Transformações de Lorentz

↓

$$x' = \gamma(x - Vt) \quad (5.38) \quad x = \gamma(x' + Vt') \quad (5.42)$$

$$z' = z \quad (5.39) \quad z = z' \quad (5.43)$$

$$y' = y \quad (5.40) \quad y = y' \quad (5.44)$$

$$t' = \gamma(t - xV/c^2) \quad (5.41) \quad t = \gamma(t' + x'V/c^2) \quad (5.45)$$

$$\text{sendo que } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.46)$$

5.4.1 Diagramas x-t

No sistema de coordenadas $t - x$ do referencial \mathbf{S} da Fig.5.7, vamos calcular, usando a Eq.(5.38), o lugar dos pontos onde x' é constante (equi-espço):

$$x' = \gamma(x - Vt) = \text{constante} \quad (5.47)$$

$$\Downarrow$$

$$t = x \frac{1}{V} - \frac{x'}{\gamma V} \quad (5.48)$$

E da Eq.(5.41), o lugar dos pontos onde t' é constante (equi-tempo):

$$t' = \gamma(t - xV/c^2) = \text{constante} \quad (5.49)$$

$$\Downarrow$$

$$t = x \frac{V}{c^2} + \frac{t'}{\gamma} \quad (5.50)$$

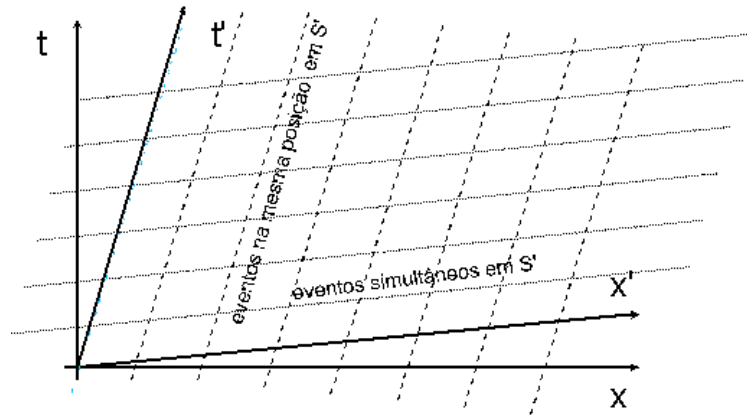
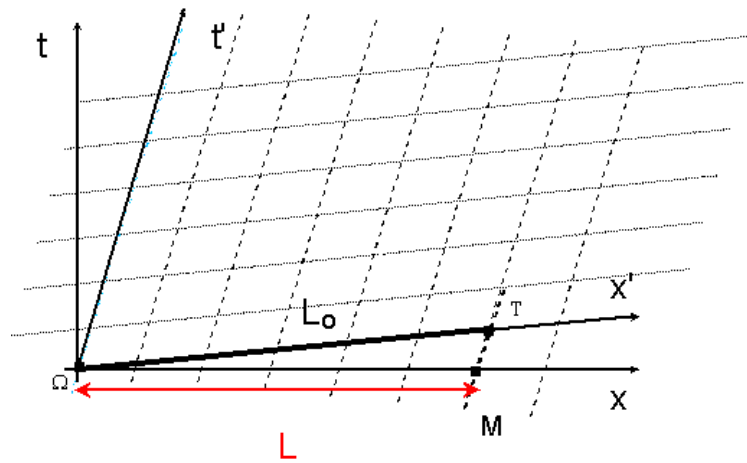
Figura 5.8: Diagrama $x-t$ 

Figura 5.9: Contração do espaço

Na Fig.5.8 aparece o sistema de coordenadas $t-x$ com várias linhas equi-tempo (pontilhadas) e equi-espaço (tracejadas), incluindo os casos especiais para $x' = 0$ e $t' = 0$ (linhas contínuas pretas), que corresponde ao sistema de coordenadas $t' - x'$ visto desde o referencial S . As linhas paralelas ao eixo Ox' correspondem aos eventos simultâneos vistos desde S' . As linhas paralelas ao eixo Ot' correspondem às posições espacialmente invariantes em S' .

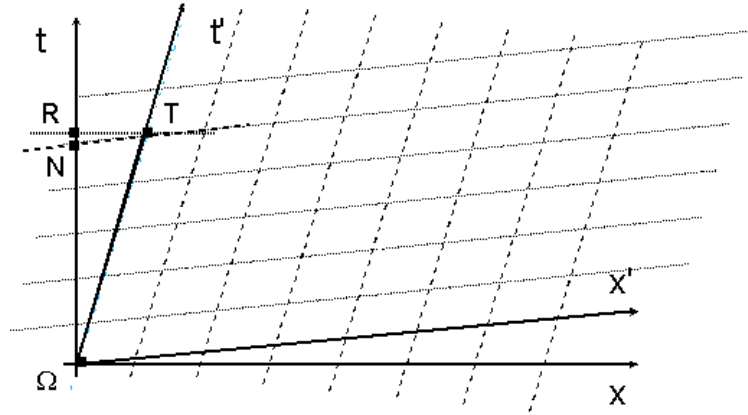
5.4.2 Contração do espaço

Trata-se da medida de um tarugo fixo no referencial S' e de como esse comprimento seria visto desde o referencial S . Sejam 2 eventos, inicial Ω e final T , que representam o comprimento L_0 de um tarugo colocado ao longo do eixo Ox' como indicado na Fig.5.9, com as coordenadas

$$\Omega = (0, 0, 0, 0)_S = (0, 0, 0, 0)_{S'} \quad (5.51)$$

$$T = (L_0, 0, 0, 0)_{S'} \quad (5.52)$$

A ponta do tarugo medida em S , simultaneamente com Ω , tem que estar ao longo de $t = 0$. A linha tracejada (iso-espaço) que passa pelos pontos T e M representa o lugar dos pontos

Figura 5.10: *Expansão do tempo*

com a mesma posição espacial, do ponto de vista de S' , isto é, representa a distância L_o nesse referencial. Do ponto de vista de S porém, o ponto que está na mesma posição que o T é o R (colocado na sua própria linha iso-espaço) e não o M . Isso quer dizer que, visto no referencial S , o comprimento em questão é $x_R = L$. Assim podemos calcular, utilizando as Transformações de Lorentz e, em particular, as Eqs.(5.42) e (5.45):

$$L = x_R = \gamma(x'_R + Vt'_R) \quad (5.53)$$

$$t_R = \gamma(t'_R + x'_R V/c^2) = 0 \Rightarrow t'_R = -x'_R V/c^2 \quad (5.54)$$

que substituída na primeira equação fica:

$$L = \gamma x'_R (1 - V^2/c^2) \quad (5.55)$$

mas como, no referencial S , os pontos R e T representam a mesma posição, podemos substituir x'_R por $x'_T = L_o$ na Eq.(5.55), resultando assim

$$L = L_o \gamma (1 - V^2/c^2)$$

Isso mostra que, o comprimento L_o (no referencial S'), quando visto no referencial S , é menor e igual a

$$\boxed{L = L_o \sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.56)$$

5.4.3 Expansão do tempo

Um raciocínio similar ao desenvolvido acima para o comprimento, pode ser realizado para o tempo. Na Fig.5.10 está indicado um intervalo de tempo entre os eventos Ω e T medidos em S'

$$\Omega = (0, 0, 0, 0)_{S'} = (0, 0, 0, 0)_S \quad (5.57)$$

$$\text{e } T = (0, 0, 0, t'_T)_{S'} \quad (5.58)$$

Traçando a linha equi-tempo que passa por T no sistema \mathbf{S}' , cruzamos o eixo Ot no ponto N . Todos os pontos sobre a linha $N - T$ são simultâneos no sistema \mathbf{S}' o que significa que ao considerar o intervalo de tempo $\Omega - N$ em \mathbf{S} , estarei medindo o intervalo em \mathbf{S}' no meu sistema \mathbf{S} . Mas o evento que eu preciso considerar não é qualquer um simultâneo com T em \mathbf{S}' mas somente aquele que ocorre na mesma coordenada em \mathbf{S}' , ou seja apenas T que equivale a R e não a N no sistema \mathbf{S} . Por isso o evento que ocorre em \mathbf{S}' num intervalo $\Omega - N$ (medido em \mathbf{S}) na verdade corresponde o intervalo $\Omega - R$ que é maior. O tempo próprio em \mathbf{S}' maior quando visto em \mathbf{S} .

$$N = (0, 0, 0, t_N)_S \quad (5.59)$$

que é simultâneo com T no sistema \mathbf{S}' . Mas os eventos T e $R = (0, 0, 0, t_R)_S$ são simultâneos em \mathbf{S} , e por isso:

$$t_R = \gamma(t'_T + 0V/c^2) = \gamma t'_T \quad (5.60)$$

ou escrito de forma geral chamando τ ao tempo “próprio” e t ao tempo visto do outro referencial

↓

$$\boxed{t = \gamma\tau} \quad (5.61)$$

5.4.4 Efeito Doppler

No esquema da Fig5.11 uma fonte luminosa está fixa em \mathbf{S} e emite um raio na direção de \mathbf{S}' no instante t_D (evento D) que atinge o referencial \mathbf{S}' no instante t_G (evento G). Ao transcorrer um período T_{fonte} da onda luminosa, no instante $t_E = t_D + T_{\text{fonte}}$ (evento E), emite outro raio que atinge \mathbf{S}' no instante t_F (evento F). Nessas condições se verifica

$$c(t_G - t_D) = L + Vt_G \quad c(t_F - t_E) = L + Vt_F \quad (5.62)$$

$$T_{\text{fonte}} \equiv t_E - t_D \quad T_{\text{obs}} \equiv t_F - t_G \quad (5.63)$$

↓

$$T_{\text{obs}} = T_{\text{fonte}} \frac{1}{1 - V/c} \quad (5.64)$$

onde T_{obs} representa o tempo transcorrido entre o primeiro e o segundo pulso atingirem o referencial \mathbf{S}' em movimento, visto desde \mathbf{S} . Em função da expansão do tempo representada pela Eq.(5.61), o período medido no próprio referencial \mathbf{S}' será então

$$\gamma\tau'_{\text{obs}} = T_{\text{obs}} \Rightarrow \nu'_{\text{obs}} = \nu_{\text{fonte}} \frac{\sqrt{1 - V/c}}{\sqrt{1 + V/c}} \quad (5.65)$$

O mesmo experimento se pode repetir considerando-se agora a fonte em movimento (se afastando) em \mathbf{S} e o observador fixo em \mathbf{S}' . Os cálculos são semelhantes

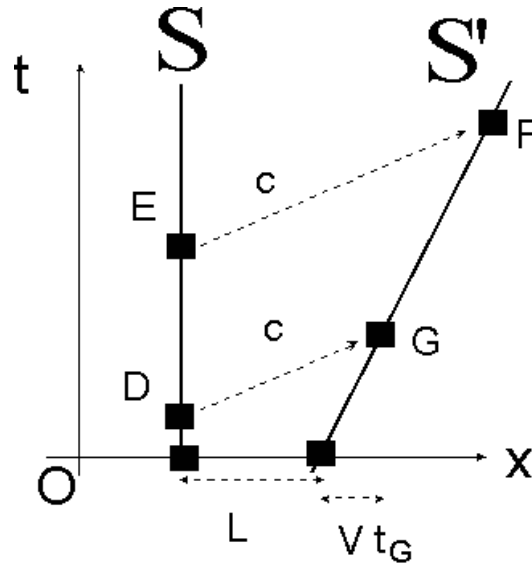


Figura 5.11: *Efeito Doppler: fonte em repouso e observador se afastando com velocidade V*

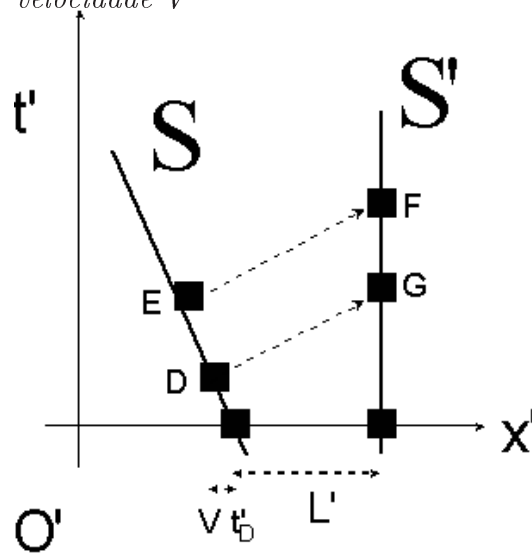


Figura 5.12: *Efeito Doppler: fonte se afastando com velocidade V e observador em repouso.*

$$c(t'_G - t'_D) = Vt'_D + L' \quad c(t'_F - t'_E) = Vt'_E + L' \quad (5.66)$$

$$T'_{\text{fonte}} \equiv t'_E - t'_D \quad T'_{\text{obs}} \equiv t'_F - t'_G \quad (5.67)$$

$$\Downarrow$$

$$T'_{\text{obs}} = T'_{\text{fonte}}(1 + V/c) \quad (5.68)$$

$$\Downarrow$$

$$\gamma T_{\text{fonte}} = T'_{\text{fonte}} = T'_{\text{obs}}/(1 + V/c) \quad (5.69)$$

$$\Downarrow$$

$$\nu_{\text{fonte}} = \nu'_{\text{obs}} \frac{\sqrt{1 + V/c}}{\sqrt{1 - V/c}} \quad (5.70)$$

5.4.5 Efeito Doppler Transversal

Este efeito não existe na teoria clássica mas sim na Teoria da Relatividade. Apesar de não haver variação nos comprimentos neste caso, existe a transformação do tempo próprio representada pela Eq.(5.61). Isso significa que

$$\gamma T_{\text{fonte}} = T'_{\text{obs}} \quad (5.71)$$

$$\Downarrow$$

$$\nu'_{\text{obs}} = \nu_{\text{fonte}} \sqrt{1 - V^2/c^2} \quad (5.72)$$

5.4.6 Soma de velocidades

Qual é a transformação de velocidades na Teoria de Relatividade? Isto é: Como se faz a transformação?

$$\begin{aligned} v'_x &\Rightarrow v_x \\ v'_y &\Rightarrow v_y \\ v'_z &\Rightarrow v_z \\ \mathbf{S}' &\Rightarrow \mathbf{S} \end{aligned} \quad (5.73)$$

Sejam os eventos

$$X_1 = (x_1, y_1, z_1, t_1)_S = (x'_1, y'_1, z'_1, t'_1)_{S'} \quad (5.74)$$

$$X_2 = (x_2, y_2, z_2, t_2)_S = (x'_2, y'_2, z'_2, t'_2)_{S'} \quad (5.75)$$

Utilizando as Transformações de Lorentz, descritas nas Eqs.(5.38-5.45), teremos

$$x = \gamma(x' + Vt') \quad (5.76)$$

$$y = y' \quad (5.77)$$

$$z = z' \quad (5.78)$$

$$t = \gamma(t' + Vx'/c^2) \quad (5.79)$$

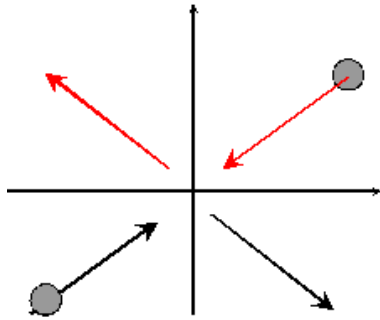


Figura 5.13: Colisão entre duas partículas de igual massa e igual velocidade, vista de um sistema de referência em repouso.

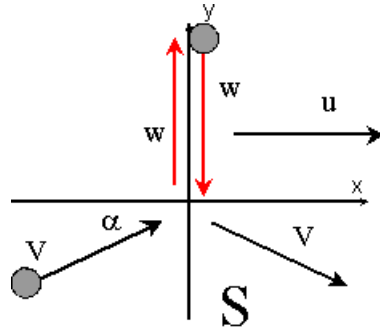


Figura 5.14: Colisão descrita na Fig.5.13 mas agora vista de um sistema de referência S se movendo para à esquerda com a mesma velocidade que a da componente horizontal da velocidade da massa de cima na figura anterior.

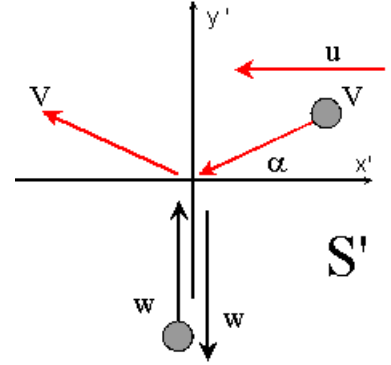


Figura 5.15: Colisão descrita na Fig.5.13 mas agora vista de um sistema de referência S' se movendo para à direita com velocidade $u = V \cos \alpha$ visto do referencial S .

Calculando os intervalos

$$\Delta x = x_2 - x_1 \quad \Delta x' = x'_2 - x'_1 \text{ etc.} \quad (5.80)$$

$$\Delta x = \gamma(x'_2 + Vt'_2) - \gamma(x'_1 + Vt'_1) = \gamma\left(\frac{\Delta x'}{\Delta t'} + V\right)\Delta t' \quad (5.81)$$

$$\Delta y = \Delta y' \quad (5.82)$$

$$\Delta z = \Delta z' \quad (5.83)$$

$$\Delta t = \gamma\left(\Delta t' + V\frac{\Delta x'}{c^2}\right) = \gamma\left(1 + \frac{V}{c^2}\frac{\Delta x'}{\Delta t'}\right)\Delta t' \quad (5.84)$$

onde o resultado final é

$$v_x = \frac{v'_x + V}{1 + v'_x V/c^2} \quad (5.85)$$

$$v_y = \frac{v'_y}{\gamma(1 + v'_x V/c^2)} \quad (5.86)$$

$$v_z = \frac{v'_z}{\gamma(1 + v'_x V/c^2)} \quad (5.87)$$

$$v'_x = \frac{v_x - V}{1 - v_x V/c^2} \quad (5.88)$$

$$v'_y = \frac{v_y}{\gamma(1 - v_x V/c^2)} \quad (5.89)$$

$$v'_z = \frac{v_z}{\gamma(1 - v_x V/c^2)} \quad (5.90)$$

5.4.7 Massa Relativista

Vamos calcular a expressão relativística para a massa. Sejam duas massas de igual valor colidindo no plano como representado na Fig.5.13. Essa colisão é agora representada no sistema referencial S na Fig.5.14, que se move à esquerda com a mesma velocidade que a da componente horizontal da velocidade da massa vinda de cima. Neste caso é óbvio que a

quantidade de movimento linear se conserva na coordenada x . Mas, o que ocorre ao longo de $y\Gamma$. Para isso precisamos calcular a componente de V na direção y

$$u \tan \alpha = V \sin \alpha \quad (5.91)$$

Se mudamos para um outro referencial \mathbf{S}' , ilustrado na Fig.5.15, e que se move, em relação à \mathbf{S} , para a direita e com velocidade u , teremos a nova representação na Fig.5.15. Por questão de simetria, o que era w no referencial \mathbf{S} agora é $u \tan \alpha$ neste novo referencial \mathbf{S}' . Podemos assim utilizar a transformação relativística da velocidade $v_y = w$ no referencial \mathbf{S} para $v'_y = u \tan \alpha$ no referencial \mathbf{S}' utilizando a Eq.(5.89) onde a velocidade do referencial \mathbf{S}' em relação ao \mathbf{S} é u :

$$u \tan \alpha = \frac{w}{\gamma} = w \sqrt{1 - u^2/c^2}$$

$$u \tan \alpha = w \sqrt{1 - u^2/c^2} \quad (5.92)$$

Escreveremos então a conservação da quantidade de movimento linear no eixo y no referencial \mathbf{S} igualando os valores antes e depois da colisão respectivamente assim:

$$m_w w - m_V u \tan \alpha = -m_w w + m_V u \tan \alpha \quad (5.93)$$

$$2m_w w = 2m_V w \sqrt{1 - u^2/c^2} \quad (5.94)$$

$$m_w = m_V \sqrt{1 - u^2/c^2} \quad (5.95)$$

Considerando que

$$V^2 = u^2 + (u \tan \alpha)^2 = u^2 + w^2(1 - u^2/c^2) \quad (5.96)$$

$$\lim_{w \rightarrow 0} V^2 = u^2 \quad (5.97)$$

a Eq.(5.95) fica

$$m_0 = m_u \sqrt{1 - u^2/c^2} \quad (5.98)$$

ou seja

$$m_u = \frac{m_0}{\sqrt{1 - u^2/c^2}}$$

5.4.8 Energia Relativista

Supondo uma partícula se movendo ao longo do eixo x com velocidade v

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{dm_o \gamma \vec{v}}{dt} \quad (5.99)$$

$$\text{energia cinética: } dE_c = \vec{F} \cdot d\vec{x} = d(m_o \gamma v) \frac{dx}{dt} \quad (5.100)$$

$$E_c = \int_{v=0}^v v d\left(\frac{m_o v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right) = m_o \int_0^v \frac{v dv}{(1 - v^2/c^2)^{3/2}} \quad (5.101)$$

$$= m_o c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right) = m_o c^2 \gamma - m_o c^2 \quad (5.102)$$

$$\text{energia total: } E = m_o \gamma c^2 \quad (5.103)$$

$$\text{energia em repouso: } E_o = m_o c^2 \quad (5.104)$$

$$\text{momento linear: } p = m_o \gamma v \quad (5.105)$$

Podemos achar as seguintes relações entre as quantidades acima

$$p^2 c^2 = \frac{m_o^2}{1 - v^2/c^2} v^2 c^2 \quad (5.106)$$

$$E_o^2 = m_o^2 c^4 \quad (5.107)$$

$$\frac{m_o^2}{1 - v^2/c^2} v^2 c^2 + m_o^2 c^4 \frac{1 - v^2/c^2}{1 - v^2/c^2} = \frac{m_o^2 c^4}{1 - v^2/c^2} \quad (5.108)$$

↓

$$E^2 = E_o^2 + (pc)^2 \quad (5.109)$$

Capítulo 6

Física Quântica: Os primeiros experimentos e o modelo atômico de Bohr

6.1 Os primeiros experimentos

6.1.1 Efeito foto-elétrico: Einstein (1905)

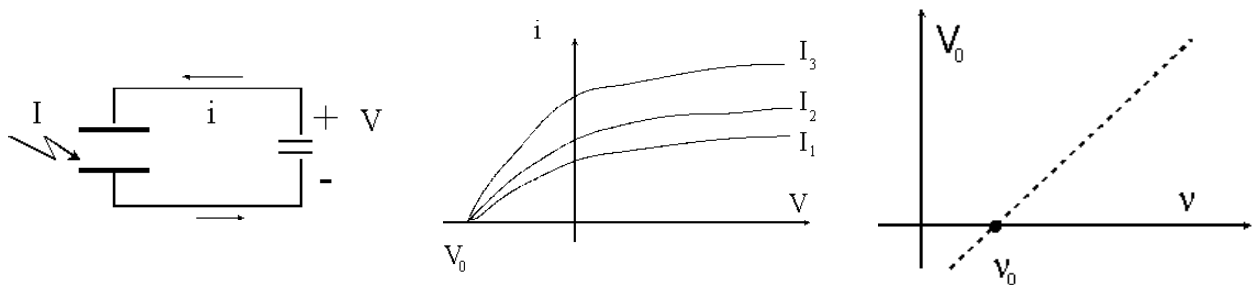


Figura 6.1: *Efeito fotoelétrico: A figura da esquerda mostra o esquema simplificado do experimento. Aplica-se uma diferença de potencial elétrico V entre cátodo e ânodo, sendo aquele primeiro iluminado com luz de frequência ν e intensidade I . Mede-se a corrente elétrica i que circula no circuito, em função de V . A figura no centro mostra o gráfico da corrente elétrica no circuito em função do potencial aplicado, para diferentes intensidades I_j da luz de frequência ν . Todas as curvas mostram o mesmo potencial de “corte” V_0 . A figura da direita mostra o gráfico do potencial de corte V_0 para iluminações com diferentes frequências ν , onde aparece a “frequência de corte” ν_0*

Em 1905 Einstein propôs o “quanta de luz” ou “fóton” com energia

$$E = h\nu$$

onde h é a constante de Planck. O momento do fóton poderia ser calculado a partir da expressão acima e da relação relativística [?]

$$E^2 = E_0^2 + (pc)^2$$

onde E é a energia total e E_0 é a energia em repouso, associada à massa em repouso.

Colocando $E_0 = 0$ na equação acima, porque o fóton não tem massa, fica a expressão

$$E = pc \quad E = h\nu \Rightarrow \boxed{p = h/\lambda} \quad (6.1)$$

Essa proposta foi originada nos experimentos de efeito fotoelétrico, esquematicamente ilustrados na Fig.6.1, que mostraram que, para arrancar um elétron de uma superfície, é necessário que ela seja iluminada com luz de frequência maior que um dado limiar ν_0 , independentemente da intensidade I dessa iluminação. Os resultados podem ser resumidos assim:

- A corrente i aumenta quando aumenta a intensidade da luz I
- Existe um potencial reverso $-V_0$ que corta a corrente i para um dado ν e qualquer I
- Existe um limiar ν_0 abaixo do qual não há mais corrente i , para qualquer I .
- Não há qualquer atraso entre a iluminação da superfície e a circulação da corrente i : a energia não se acumula para chegar ao limite necessário para arrancar um elétron

Os resultados acima podem ser descritos pela equação

$$h\nu = \phi + V_0 \quad (6.2)$$

função de trabalho da superfície: ϕ

energia cinética dos elétrons ejetados: V_0

6.1.2 Efeito Compton (1923)

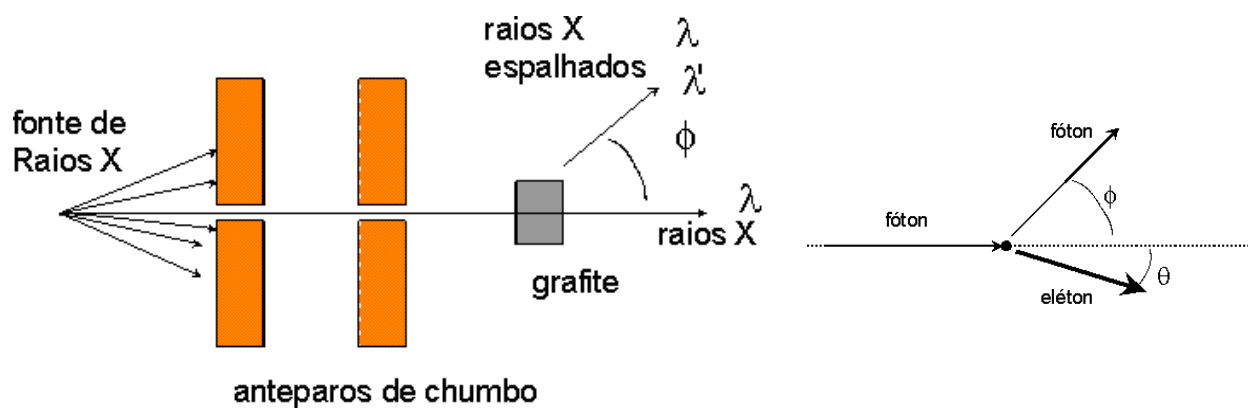


Figura 6.2: Esquema do experimento de Compton (figura da esquerda), onde os raios X espalhados pelo bloco de grafite têm o mesmo comprimento de onda λ que o do feixe incidente, mas também apresentam raios de um comprimento de onda menor λ' . A figura da direita mostra a representação da colisão do fóton com um elétron livre.

Para explicar a presença de 2 picos (em λ e em λ' , sendo que λ' é função de ϕ) no feixe de raios X espalhados no ângulo ϕ , no experimento de Compton ilustrado na Fig.6.2, podemos imaginar a colisão de um fóton de raios X com um elétron ligado ao átomo (para o caso de λ), e com um elétron livre dentro do material (para o caso de λ'). Neste último caso, aplicando as leis de conservação, a começar pela da energia:

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (6.3)$$

Pela conservação do momento linear

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \phi + \frac{m_0v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \cos \theta \quad (6.4)$$

$$0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \phi + \frac{m_0v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \sin \theta \quad (6.5)$$

Das Eqs(6.3-6.5) resulta a relação

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos \phi) \quad (6.6)$$

onde $h/(m_0c)$ é o chamado “comprimento de onda de Compton”. Para o caso de um elétron ligado ao átomo, a massa do conjunto fica muito grande e assim

$$\frac{h}{m_0c} \rightarrow 0 \quad \text{e então} \quad \lambda' - \lambda \rightarrow 0 \quad (6.7)$$

o que explica a presença de luz espalhada também com o mesmo comprimento λ do feixe incidente.

6.1.2.1 Exercício

Prove que, no vácuo, um fóton não pode se desintegrar espontaneamente em outros dois. Dica: verifique a conservação da energia e do momento neste processo.

6.1.3 Radiação do Corpo Negro

Trata-se do estudo da radiação do chamado Corpo Negro, isto é, um objeto que absorve toda a radiação que a ele chega. O modelo prático é uma cavidade com um pequeno buraco por onde sai a radiação. As paredes da cavidade são mantidas a uma temperatura constante T . Podemos imaginar que se trata de uma cavidade ressonante unidimensional com ondas eletromagnéticas estacionárias, com nós nas paredes, da forma

$$E(x, t) = E_0 \sin(kx) \sin(\omega t) \quad (6.8)$$

Os comprimentos de onda possíveis nessa cavidade de comprimento a são:

$$E(x, t) = E_0 \sin(kx) \sin(\omega t) \quad (6.9)$$

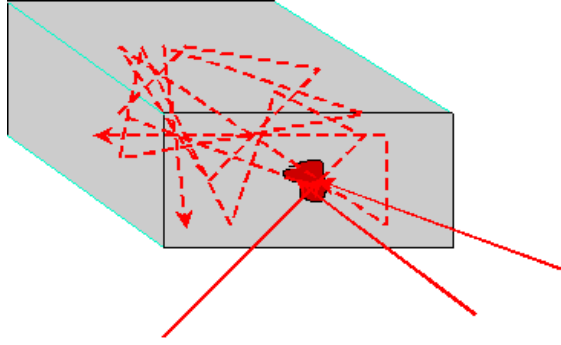


Figura 6.3: *Corpo negro: cavidade com um pequeno buraco e paredes a temperatura constante T .*

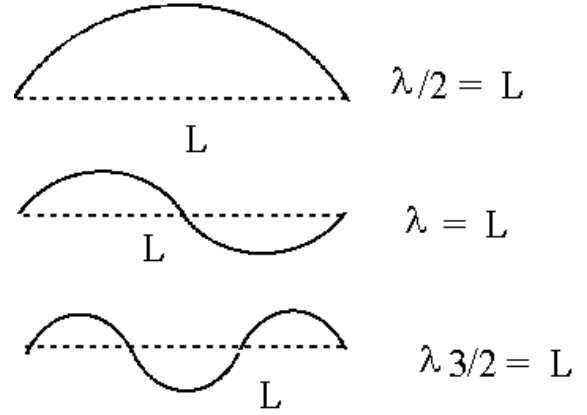


Figura 6.4: *Corda vibrante: Cavidade ressonante unidimensional*

e o número de comprimentos de onda possíveis nessa cavidade será:

$$n\lambda/2 = a \Rightarrow \lambda = 2a/n \quad (6.10)$$

$$\text{ou } \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2a}n \quad (6.11)$$

O número de ondas estacionárias possíveis num intervalo de frequência entre ν e $\nu + d\nu$: $N(\nu)d\nu$ será

$$d\nu = \frac{c}{2a}dn \quad (6.12)$$

$$\frac{dn}{d\nu} = \frac{2a}{c} \quad (6.13)$$

$$\text{portanto } N(\nu) = 2\frac{2a}{c} \quad (6.14)$$

onde o fator “2” é devido ao fato que cada onda tem duas polarizações possíveis para o campo elétrico (ou magnético).

6.1.3.1 Caso 3D:

Para o caso 3D, $N(\nu)$ toma a forma:

$$N(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2 \quad (6.15)$$

sendo que $V = a^3$ é o volume da cavidade. Se utilizamos o Teorema de Equipartição da Energia (teoria clássica da Física Estatística) para este sistema formado por múltiplos estados em equilíbrio térmico (temperatura T), temos que a energia cinética média (dos osciladores nas paredes da cavidade) por unidade de volume na cavidade e por unidade de intervalo de frequência deve ser $N(\nu)$ vezes $k_B T/2$. Mas a energia total dos osciladores é o dobro da energia cinética média e por isso temos que multiplicar também por 2. Assim:

$$S_T(\nu) = 2 \times N(\nu) k_B T/2 = N(\nu) k_B T = k_B T \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad \text{fórmula de Rayleigh-Jeans} \quad (6.16)$$

onde $k_B = 1.38 \times 10^{-23} J/K$ é a constante de Boltzman. A radiação saindo da cavidade tem uma formulação algo diferente e pode se descrita pela potência radiada por unidade de área na Fig.?? assim:

$$S_T(\nu) \frac{c}{4} = k_B T \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \quad (6.17)$$

6.1.3.2 A constante de Planck (1900)

Por volta de 1900 foi medida experimentalmente a radiação do Corpo Negro e os resultados estavam em total desacordo com a Eq.(6.16), para as altas frequências de onda. Planck propôs então outra fórmula

$$S_T(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (6.18)$$

O resultado de Planck se baseou na idéia de que a energia poderia ser calculada como soma de valores discretos ΔE . Para se ajustar com a curva experimental, esse ΔE deveria ser

$$\begin{aligned} \Delta E &\ll k_B T \text{ para } \nu \text{ pequeno} \\ \Delta E &\gg k_B T \text{ para } \nu \text{ grande} \end{aligned}$$

e ele então verificou que poderia ser escrito assim:

$$\Delta E = h\nu \quad h = 6.63 \times 10^{-34} J/s \quad (6.19)$$

onde essa constante h (que vem da palavra alemã “Hohlraum” que significa recinto vazio ou oco) foi um mero recurso matemático sem maior significação física (na época!!). Verifique que o limite da Eq.(6.18) para $\nu \rightarrow 0$, efetivamente corresponde à Eq.(6.16).

Hipóteses de Planck As paredes da cavidade podem ser representadas por conjuntos de osciladores harmônicos com todas as frequências ν possíveis.

- O oscilador de frequência ν só pode ter valores discretos de energia

$$E_n = nh\nu \text{ com } n = 1, 2, 3... \quad (6.20)$$

o que significa que a energia é quantizada.

- Os osciladores não irradiam continuamente mas pulando de um estado estacionário para outro ($E_1 \rightarrow E_2$). Nessa transição liberam ou absorvem energia discretamente no valor

$$E_2 - E_1 = \Delta E = (n_2 - n_1)h\nu \quad (6.21)$$

Exemplo: Oscilador harmônico clássico Seja o caso de uma massa $m = 1\text{Kg}$, se movimentando sobre uma superfície plana e horizontal, sem atrito, sob a ação de uma mola com constante elástica de $k = 16\text{N/m}$. Vamos calcular a energia desse sistema quando a mola for inicialmente esticada de 1 metro:

$$m\ddot{x} + kx = 0 \quad (6.22)$$

$$x = x_o \cos(2\pi\nu t + \phi) \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k/m} \approx 0.64\text{Hz} \quad (6.23)$$

$$E = \frac{1}{2} kx_o^2 = 8\text{J} = nh\nu \Rightarrow n \approx 1.89 \times 10^{34} \quad (6.24)$$

A conclusão óbvia é que para este sistema macroscópico, o número de “quanta” de energia é tão grande que o caráter discreto da energia é de difícil detecção.

6.2 Estrutura Atômica: Átomo de Bohr

Em diversos experimentos ao longo do tempo foram medidos os espectros de emissão e de absorção de diferentes tipos de átomos. O átomo de hidrogênio foi particularmente bem estudado, e seu espectro revelou-se formado por linhas discretas, agrupadas em séries que foram denominadas segundo os pesquisadores envolvidos nesses trabalhos assim:

- Série de Balmer: luz visível e UV (1885)
que satisfaz a seguinte equação geral:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=3,4,5\dots \quad (6.25)$$

- Série de Paschen: luz IV (1905)
que satisfaz a equação

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=4,5,6\dots \quad (6.26)$$

- Série de Lyman

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=2,3,4,5\dots \quad (6.27)$$

- Série de Brackett

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=5,6,7\dots \quad (6.28)$$

Onde $R = 1.097 \times 10^7/\text{m}$ é a constante de Rydberg. Todas as séries acima têm a mesma fórmula geral

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad m < n, \text{ naturais} \quad (6.29)$$

Esses resultados levaram a pensar que haveria elétrons em órbitas definidas ao redor do núcleo, e que a emissão de um fóton de um dado λ ocorreria quando um elétron decaísse espontaneamente para um nível orbital de menor energia. Da mesma forma, a absorção de um fóton de uma dada energia poderia fazer o elétron “ascender” a uma órbita de energia correspondentemente maior.

6.2.1 Átomo de Bohr(1913)

O problema com o modelo atômico de um elétron orbitando em torno de um núcleo (positivo) é que os elétrons carregados eletricamente estariam constantemente acelerados em seu movimento e, de acordo com a teoria eletromagnética clássica, deveriam perder energia sob a forma de radiação eletromagnética. Com isto a energia mecânica do elétron diminuiria constantemente e seu movimento orbital acabaria colapsando até o elétron atingir o núcleo. Este problema da estabilidade do átomo levou à formulação de um modelo simples da estrutura atômica, baseado em dois postulados de Niels Bohr:

1. Estados estacionários

O elétron orbitando está num estado estacionário onde não emite radiação nenhuma. Só emite ao passar de um estado estacionário para um outro. Por exemplo, ao passar do 2 para o 1, emite um fóton cujo valor é:

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

As energias nesses níveis podem ser calculadas das leis do eletromagnetismo. A energia total no nível “ n ” (no átomo de H) será

$$E_n = K + U \quad (6.30)$$

$$\text{ou seja } E_n = m_e v^2 / 2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (6.31)$$

$$F_c = m_e v^2 / r_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (6.32)$$

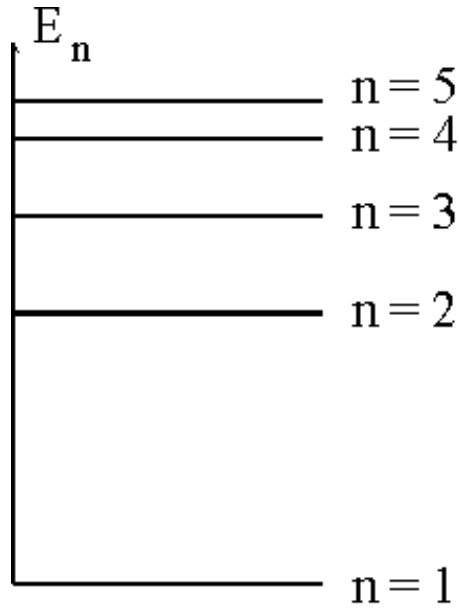
onde E_n , K e U são as energias total, cinética e potencial, respectivamente, e m_e é a massa do elétron. Das equações acima resulta que

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} \quad (6.33)$$

Por existirem evidências experimentais de que a radiação de um átomo está formada por linhas discretas, os raios orbitais r_n teriam que assumir valores também discretos.

2. Quantização do momento angular orbital L do elétron

Bohr admitiu que L só poderia assumir valores discretos dados por



Níveis de energia para um elétron
no átomo

$$L = n \frac{h}{2\pi} \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.34)$$

Então:

$$L = m_e v_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (6.35)$$

$$F_c = \frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 n^2}{m_e r_n^3} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$$

↓

$$\frac{1}{r_n} = \frac{m_e e^2 \pi}{h^2 \epsilon_0 n^2} \quad (6.36)$$

$$r_1 = \frac{h^2 \epsilon_0}{m_e e^2 \pi} \approx 0.5 \text{ \AA} \quad (\text{estado fundamental})$$

$$E_n = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{m_e e^2 \pi}{h^2 \epsilon_0 n^2}$$

$$E_n = - \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2} \quad (6.37)$$

É interessante notar que a quantização do momento angular no modelo de Bohr deriva diretamente do modelo ondulatório para o elétron, como formulado por De Broglie e descrito no Capt.7. De fato a órbita de comprimento $2\pi r$ para o elétron tem de comportar um número inteiro de comprimentos de onda, pois do contrário a média temporal de sua função de onda findaria por se anular. Assim

$$2\pi r = n\lambda \quad \lambda = h/p \quad (6.38)$$

$$\Rightarrow 2\pi p r = nh \Rightarrow \boxed{L = n\hbar} \quad (6.39)$$

que é igual à Eq.(6.34)

Capítulo 7

Física quântica: Partícula ondulatória

A partir das relações

$$E = h\nu = pc \quad (7.1)$$

$$p = h\nu/c = h/\lambda \quad (7.2)$$

que já eram universalmente aceitas para o fóton, De Broglie postulou, em 1924, que a partícula também tinha natureza ondulatória e seu comprimento de onda também satisfazia a relação na Eq.(7.2). Vejamos os valores que resultam da aplicação destas idéias para alguns casos reais:

- Elétron com energia cinética de 120 eV:

$$K = mv^2/2 \Rightarrow p = mv = \sqrt{2mK} \quad (7.3)$$

$$= \sqrt{2 \times (9.11 \times 10^{-31}) \times 120 \times (1.6 \times 10^{-19})} = 59.1 \times 10^{-25} \text{Kg m/s} \quad (7.4)$$

$$\Downarrow \quad (7.5)$$

$$\lambda = h/p = 6.63 \times 10^{-34} / 59.1 \times 10^{-25} = 1.12 \times 10^{-10} \text{m} \quad (7.6)$$

- Bola com m=1 Kg e velocidade v=1 m/s:

$$p = 1 \text{Kg m/s} \Rightarrow \lambda = 6.63 \times 10^{-34} / 1 \text{Kg m/s} = 6.63 \times 10^{-34} \text{m} \quad (7.7)$$

Momento de um fóton: Qual seria a potência de um feixe laser ($\lambda = 514.5 \text{nm}$) focalizado num próton, capaz de levantar ele contra o campo gravitatório na Terra?

7.1 Caráter ondulatório do elétron

Dois experimentos confirmaram as idéias de De Broglie sobre a natureza ondulatória das partículas:

- O experimento de G.P.Thomson em 1927

Thomson fez um experimento de difração de alumínio em pó utilizando raios X e depois outro utilizando um feixe de elétrons com uma energia tal que o comprimento de onda fosse igual à dos raios X do experimento anterior. A figura de difração resultou idêntica em ambos os casos!

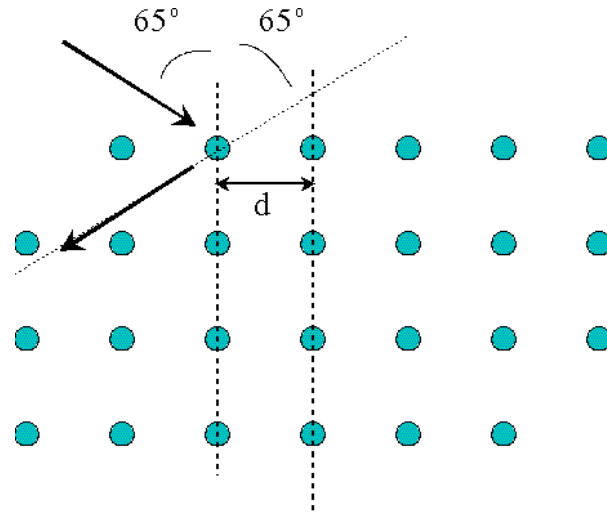


Figura 7.1: *Experimento de Davisson-Germer, usando um cristal de Ni, com $d = 0.91\text{Å}$.*

- Experimento de Davisson-Germer

Fizeram um experimento de difração em um cristal de Ni, utilizando um feixe de elétrons. Quando a energia do feixe era de 54 eV e o cristal estava posicionado com os planos cristalinos fazendo 65° com o feixe de elétrons, como indicado na Fig.7.1, o comprimento de onda medido pela difração de Bragg

$$\lambda_{\text{medido}} = 2d \sin 65^\circ = 1.65 \times 10^{-10} \text{m} \quad (7.8)$$

e o calculado pela fórmula de De Broglie

$$\lambda_{\text{calculado}} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times (9.11 \times 10^{-31}) \times 54 \times (1.6 \times 10^{-19})}} = 1.67 \times 10^{-10} \text{m} \quad (7.9)$$

resultaram muito próximos.

7.2 A função de onda

Observemos o caso de ondas estacionárias numa corda presa pelos dois extremos, como ilustrado na Fig.7.2. Imaginando o mesmo caso para a luz, podemos obter resultado semelhante, como ilustrado na Fig.7.3, formado pela soma de duas ondas de luz contra-propagantes do tipo:

$$E = \Re\{E_o e^{i(kx - \omega t + \varphi)} + E_o e^{i(kx + \omega t)}\} \quad (7.10)$$

$$\Rightarrow E = E_o \cos(kx - \omega t + \varphi) + E_o \cos(kx + \omega t) \quad (7.11)$$

$$= E_{\text{max}} \cos(\omega t - \varphi/2) \quad (7.12)$$

$$\text{onde } E_{\text{max}} = 2E_o \cos(kx + \varphi/2) \quad (7.13)$$

com as seguintes condições limites:

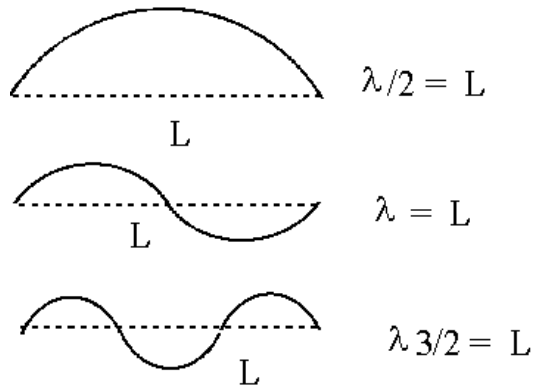


Figura 7.2: Modos de vibração de uma corda presa nas extremidades. Somente ondas estacionárias podem se instalar na corda nesse caso, e elas estão caracterizadas por um conjunto discreto de comprimentos de onda $\lambda = 2L/n$ com $n = 1, 2, 3, \dots$: quantização

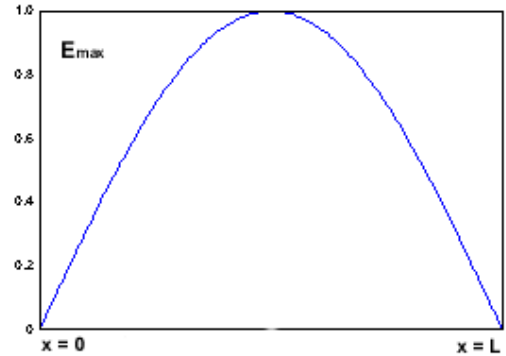


Figura 7.3: Amplitude do campo elétrico da luz numa cavidade ressonante, onde, como no caso da corda, podem-se estabelecer ondas eletromagnéticas estacionárias. O caso aqui representado corresponde ao modo de oscilação com a freqüência mais baixa.

$$E_{\max} = 2E_o \cos(kx + \varphi/2) = 0 \quad \text{para } x = 0 \Rightarrow \varphi/2 = \pi/2 \quad (7.14)$$

$$= \cos(kx + \varphi/2) = 0 \quad \text{para } x = L \Rightarrow kL = n\pi \quad (7.15)$$

A probabilidade de detectar um fóton em qualquer ponto da cavidade é proporcional à intensidade, ou seja a E_{\max}^2 , como ilustrado na Fig.7.4

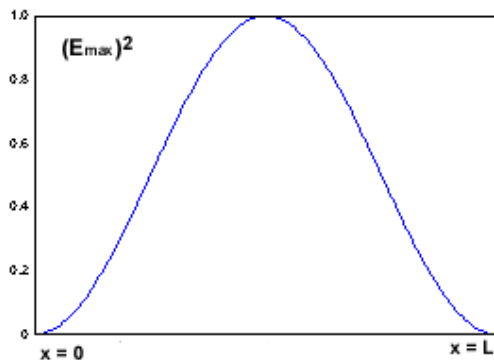


Figura 7.4: Intensidade do campo elétrico da luz numa cavidade ressonante, correspondente à Fig.7.3.

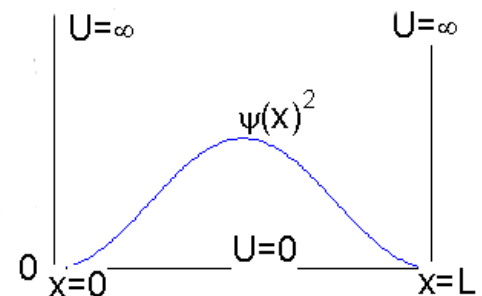


Figura 7.5: Função de onda de um elétron num poço de potencial infinito, correspondente a $n=1$.

7.2.1 Função de onda de um elétron

Seja um único elétron confinado num poço de potencial infinito como ilustrado na Fig.7.5. Podemos generalizar as conclusões sobre o caso das ondas eletromagnéticas, para o caso

do elétron, cuja natureza ondulatória permitiria definir uma função de onda associada $\psi(x)$. Como no caso do fóton, a probabilidade de se encontrar o elétron em algum lugar entre $x=0$ e $x=L$, estaria relacionada com a densidade de probabilidade $|\psi(x)|^2$. Essa função geralmente se escreve em forma normalizada, o que significa que deve satisfazer a condição:

$$\int_{x=0}^{x=L} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (7.16)$$

7.2.2 Estados permitidos para o elétron confinado

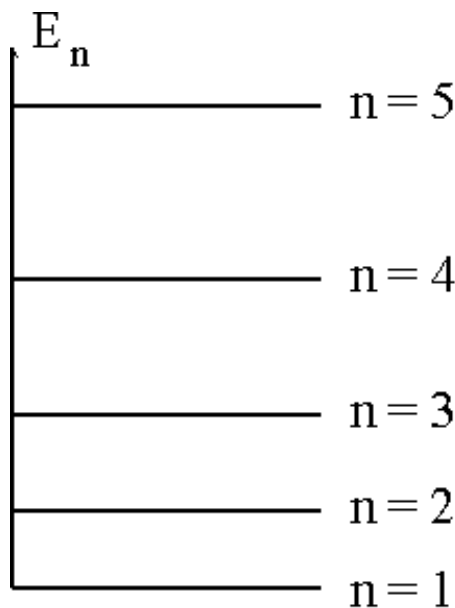
A energia total neste caso é apenas cinética e se calcula em função do seu momento linear p

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (7.17)$$

Pelo postulado de De Broglie temos que

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (7.18)$$

sendo que por se tratar de uma cavidade limitada, teremos ondas estacionárias com valores discretos para λ :



Níveis de energia para um elétron confinado num poço de potencial infinito

$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad (7.19)$$

↓

$$p = \frac{h}{2L}n \quad (7.20)$$

↓

$$E = n^2 \frac{h^2}{8mL^2} = E_n, \quad (7.21)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Fazendo $n = 1$ obtemos a energia do estado fundamental do elétron, que é também a

$$\text{energia do ponto zero } E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \quad (7.22)$$

Conclui-se disto que a energia do elétron no poço não pode ser nula e, portanto, o elétron não pode estar em repouso dentro do poço.

7.3 Equação de Schrödinger (1925)

A equação de Schrödinger descreve a função de onda de uma partícula de massa m sujeita a forças originadas de uma energia potencial $U(x, y, z)$. Ela se origina da relação geral de conservação de energia, das hipóteses de De Broglie sobre o caráter ondulatório da partícula e da formulação da função de onda, como descrito embaixo.

Conservação da energia: A formulação de Schrödinger é não relativística, razão pela qual a energia total E corresponde à soma da energia cinética K e da energia potencial U

$$E = K + U \quad (7.23)$$

$$K = \frac{p^2}{2m} \quad \text{momento linear: } p$$

Hipóteses de De Broglie (vide Eqs.(7.1) e (7.2)):

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$p = h/\lambda = \hbar k$$

$$\text{onde } k \equiv 2\pi/\lambda \quad \text{e } \hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$$

Formulação da função de onda:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t} \quad \psi(\vec{r}) \equiv \phi(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (7.24)$$

Substituindo $E = \hbar\omega$ e $K = p^2/(2m) = \hbar^2 k^2/(2m)$ na Eq.(7.23) temos

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U \quad (7.25)$$

Podemos escrever também

$$\omega = i \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (7.26)$$

$$k^2 = -\frac{1}{\Psi} \nabla^2 \Psi \quad \text{para } \nabla \phi(\vec{r}) \ll k \quad (7.27)$$

onde a condição imposta na Eq.(7.27) significa que a amplitude deve variar muito mais lentamente que a fase. Substituindo agora as Eqs.(7.26) e (7.27) na Eq.(7.25) resulta:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \Psi(x, y, z, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t) \quad (7.28)$$

A Eq.(7.28) pode ser escrita também em termos da parte independente do tempo $\psi(\vec{r})$ assim

$$\boxed{\mathcal{H}\psi = E\psi} \quad (7.29)$$

$$(7.30)$$

onde o operador Hamiltoniano do sistema é:

$$\mathcal{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \quad (7.31)$$

A Eq.(7.29) tem solução apenas para alguns valores discretos de E que são os

$$\Downarrow$$

níveis de E quantizados ou autovalores de energia

Para que $|\psi(x)|^2$ continue tendo o significado de “densidade de probabilidade” é necessário poder normalizar essa função de onda, ou seja, deve ser possível fazer

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (7.32)$$

em todo o espaço onde $\psi(x)$ esta definida.

7.3.1 Estados estacionários

7.3.1.1 Elétron livre num poço de potencial infinito

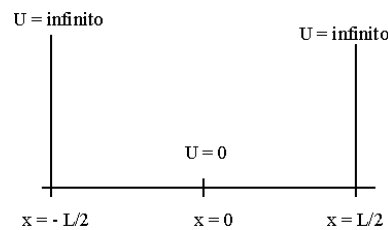


Figura 7.6: Poço de potencial infinito com os limites $-L/2$ e $+L/2$.

Vamos repetir o cálculo da função de onda para um elétron confinado num poço de potencial infinito, agora utilizando o formalismo derivado da equação de Schödinger, que neste caso assume a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (7.33)$$

com $U = 0$ dentro da cavidade. Uma solução possível seria

$$\psi = A \sin kx \quad (7.34)$$

\Downarrow

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2) A \sin kx = EA \sin kx \quad (7.35)$$

\Downarrow

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (7.36)$$

Deve ser

$$\psi(x) = 0 \quad \text{para} \quad |x| > L/2 \quad (7.37)$$

e por continuidade deve ser também

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0 \quad (7.38)$$

$$\Downarrow$$

$$kL/2 = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.39)$$

O valor $n = 0$ não nos convém pois leva à solução trivial $\psi = 0$ para qualquer x . Substituindo a Eq.(7.39) na Eq.(7.36) temos os níveis de energia permitidos:

$$E_n = \frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2}n^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n)^2 \quad (7.40)$$

Outra solução possível

$$\psi(x) = B \cos kx \quad (7.41)$$

$$\Downarrow$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (7.42)$$

com as condições de contorno

$$\cos(kL/2) = 0 \Rightarrow kL/2 = (2n - 1)\pi/2 \quad (7.43)$$

$$\Downarrow$$

$$kL = (2n - 1)\pi \quad (7.44)$$

Substituindo a Eq.(7.44) na Eq.(7.42), resulta:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n - 1)^2 \quad (7.45)$$

Solução geral Considerando as duas soluções achadas nas 2 seções anteriores temos uma solução geral

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (7.46)$$

$$\Downarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (7.47)$$

$$\Downarrow$$

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (7.48)$$

Considerando as condições de contorno:

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0 \quad (7.49)$$

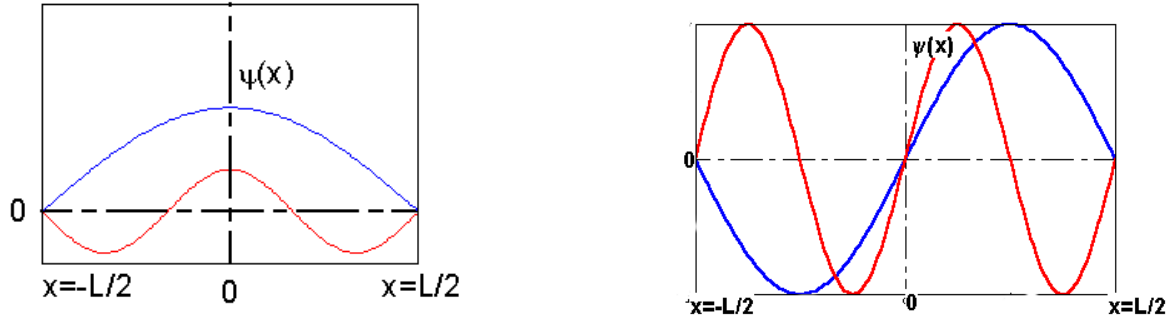


Figura 7.7: Simetria das soluções para $n = 1$ e $n = 2$: Par para $B \cos kx$ à esquerda e ímpar para $A \sin kx$ à direita.

↓

$$\begin{aligned} A \sin(-kL/2) + B \cos(-kL/2) &= 0 \\ A \sin(kL/2) + B \cos(kL/2) &= 0 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} 2B \cos(kL/2) &= 0 \\ 2A \sin(kL/2) &= 0 \end{aligned} \quad (7.50)$$

Temos assim 2 grupos de soluções possíveis, sendo que uma é

$$A = 0 \Rightarrow kL/2 = (2n - 1)\pi/2 \Rightarrow k = \frac{\pi}{L}(2n - 1) \quad (7.51)$$

enquanto a outra é

$$B = 0 \Rightarrow kL/2 = n\pi \Rightarrow k = \frac{\pi}{L}2n \quad (7.52)$$

Considerando os dois casos possíveis, acima, temos a solução geral:

$$\boxed{k = \frac{\pi}{L}n}$$

para qualquer n (par ou ímpar). A energia quantizada possível para o elétron confinado será então

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots} \quad (7.53)$$

em acordo com o resultado anteriormente achado na Eq.(7.21).

Simetria das soluções A solução geral encontrada para o elétron confinado, na sec.7.3.1.1, tem uma parte com simetria par e outra com simetria ímpar, como ilustrado na Fig.7.7

Exemplo Seja um elétron confinado numa cavidade L e no estado **par** de energia mais baixa. Ache a constante de normalização B e determine a probabilidade de que o elétron se encontre entre $-L/2$ e $L/4$.

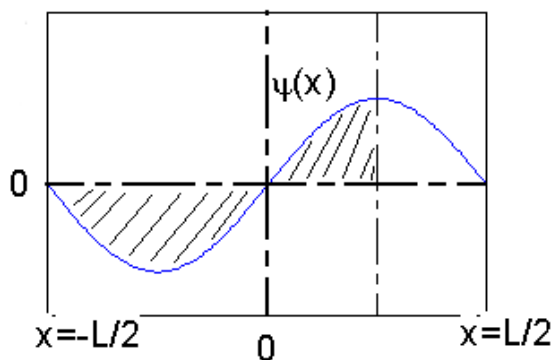


Figura 7.8: Cálculo gráfico da probabilidade do elétron se encontrar entre $-L/2$ e $L/4$, para uma solução ímpar no nível de energia mais baixo: (Área hachurada) / (área total) = 0.75, igual ao cálculo analítico.

Pelos resultados da sec.7.41 temos que deve ser

$$kL = (2n - 1)\pi \quad (7.54)$$

$$\text{Para o nível de energia mais baixo } (n = 1) \Rightarrow kL = \pi \quad (7.55)$$

↓

$$\psi(x) = B \cos(\pi x/L) \quad (7.56)$$

$$\text{Condição de normalização: } \int_{-L/2}^{L/2} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (7.57)$$

↓

$$B^2 \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2(\pi x/L)^2 dx = 1 \quad (7.58)$$

Mas

$$\int_{-L/2}^{L/2} \cos^2(\pi x/L) dx = \frac{1}{2} \left[x + \frac{L}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{L} \right]_{-L/2}^{L/2} = L/2 \quad (7.59)$$

$$\text{Portanto } \int_{-L/2}^{L/2} |\psi(x)|^2 dx = B^2 L/2 = 1 \Rightarrow \boxed{B = \sqrt{2/L}} \quad (7.60)$$

A probabilidade então será calculada assim

$$P = \int_{-L/2}^{L/4} |\psi(x)|^2 dx = 3/4 + 1/(2\pi) \approx 0.909 \quad (7.61)$$

7.3.1.2 Outro exemplo

Verificar que para o problema anterior, no caso de uma solução ímpar, teríamos:

- $B = \sqrt{2/L}$
- $P=0.75$

como se pode verificar graficamente na Fig.7.8.



Figura 7.9: Interferência de elétrons no experimento das Fendas de Young, mostrando a densidade de probabilidade $|\psi|^2$ em função da posição sobre o anteparo depois das fendas: À esquerda, com uma só fenda; à direita, com as duas fendas abertas.

7.3.1.3 Superposição e interferência

No experimento das Fendas de Young com elétrons, as funções ψ_A e ψ_B são soluções diferentes representando estados diferentes. A primeira representa a função de onda do elétron (relacionada com a densidade de probabilidade de o elétron ser achado numa posição no plano de observação) correspondente à fenda A . Idem para ψ_B em relação à fenda B . A solução geral seria a combinação linear

$$\psi = C_A\psi_A + C_B\psi_B \quad (7.62)$$

A intensidade (ou densidade de probabilidade) com as 2 fendas abertas seria então:

$$I_A = |\psi_A|^2 \quad \text{só a fenda } A \text{ aberta} \quad (7.63)$$

$$I_B = |\psi_B|^2 \quad \text{só a fenda } B \text{ aberta} \quad (7.64)$$

$$I = |\psi|^2 = |\psi_A + \psi_B|^2 \quad (7.65)$$

$$= \frac{1}{2}|\psi_A|^2 + \frac{1}{2}|\psi_B|^2 + [\psi_A\psi_B^* + \psi_A^*\psi_B] \quad (7.66)$$

sendo o termo entre colchetes o “termo de interferência”.

7.3.1.4 Tunelamento

Para calcular a função de onda de uma partícula com energia total E , colidindo contra uma barreira de potencial $U_o > E$ como indicado na Fig.7.10 utilizaremos a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_o\psi = E\psi \quad (7.67)$$

$$\Downarrow$$

$$(U_o - E)\psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \quad (7.68)$$

Para $U_o > E$ a solução não é mais oscilatória, mas da forma:

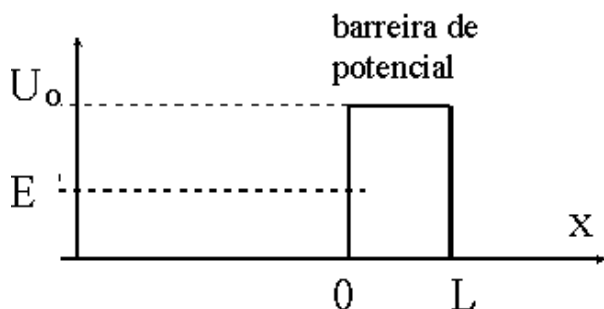


Figura 7.10: Partícula numa barreira de potencial maior que a sua própria energia total.

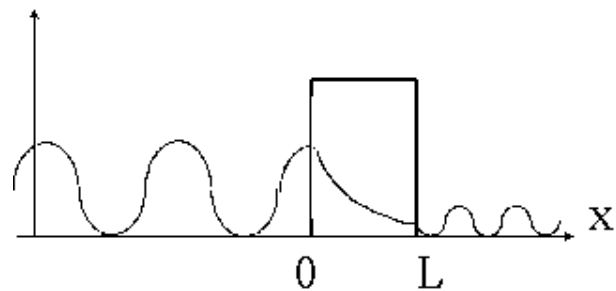


Figura 7.11: Partícula atravessando uma barreira de potencial maior que a sua própria energia total.

$$\psi(x) = A e^{-\alpha x} + B e^{\alpha x} \quad \alpha \equiv \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} \quad (7.69)$$

Ou seja, de cada lado da barreira de potencial teremos uma solução oscilatória para $\psi(x)$, e apenas dentro da barreira a solução será amortecida. Nas fronteiras deve haver continuidade e por isso a solução terá a forma ilustrada na Fig.7.11, com um coeficiente de transmissão em intensidade, isto é em $|\psi(x)|^2$, dado por

$$T \equiv \left| \frac{\psi(L)}{\psi(0)} \right|^2 \approx e^{-2\alpha L} \quad \text{para } \alpha L \gg 1 \quad (7.70)$$

Exercício

Demonstre que, quando não se verifica a condição $\alpha L \gg 1$ indicada na Eq.(7.70), o coeficiente de transmissão pela barreira de potencial responde à expressão

$$T = \left| \frac{\psi(L)}{\psi(0)} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{e^{\alpha L} - e^{-\alpha L}}{16(E/U_0)(1-E/U_0)}} \quad (7.71)$$

7.3.1.5 Tunelamento da luz: Reflexão total frustrada

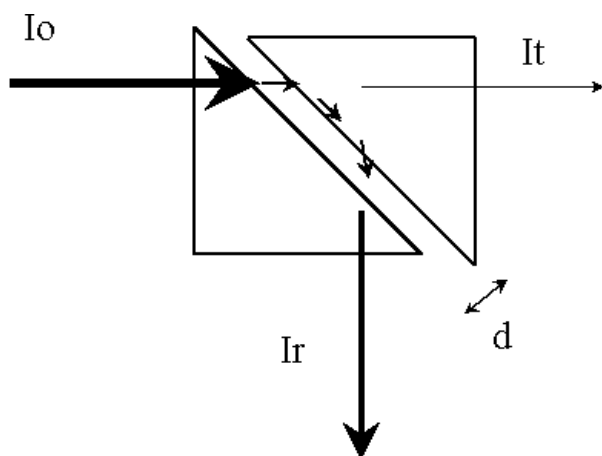


Figura 7.12: Tunelamento da luz num experimento de reflexão total frustrada (FTR): Quando a separação d entre os dois prismas de vidro é da ordem de, ou menor que $1/\alpha$, na Eq.(7.80), algo de luz se transmite, devido às ondas evanescentes que se formam do lado do ar, na reflexão total no primeiro prisma.

As ondas evanescentes [?] são um bom exemplo de tunelamento, desta vez da luz numa interface no fenômeno de reflexão total. As luzes incidente, refletida e transmitida na interface da Fig.7.12 escrevem-se, respectivamente

$$E_i = E_i^o e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (7.72)$$

$$E_r = E_r^o e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (7.73)$$

$$E_t = E_t^o e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (7.74)$$

A expressão para a luz transmitida será

$$\vec{k}_t \cdot \vec{r} = k_t x \sin \phi + k_t y \cos \phi \quad (7.75)$$

$$= k_t x \sin \phi + k_t y \sqrt{1 - \sin^2 \phi} \quad (7.76)$$

$$= k_t x \sin \phi + k_t y \sqrt{1 - n^2 \sin^2 \theta} \quad (7.77)$$

onde ϕ é o ângulo de refração (que na Fig.7.12 corresponde ao ar) e θ é o ângulo de incidência que neste caso corresponde ao vidro. Para o caso de $\theta > \theta_c$ onde θ_c é o ângulo crítico de reflexão total, teremos

$$\vec{k}_t \cdot \vec{r} = k_t x \sin \phi + ik_t y \sqrt{n^2 \sin^2 \theta - 1} \quad (7.78)$$

$$E_t = E_t^o e^{i(k_t x - \omega t)} e^{-\alpha |y|} \quad (7.79)$$

$$k_1 = k_t \sin \phi = k_i \sin \theta \quad \text{e} \quad \alpha = \sqrt{n^2 \sin^2 \theta - 1} \quad \text{para} \quad \theta > \theta_c \quad (7.80)$$

Aplicando os resultados das Eqs.(7.79-7.80) ao caso da Fig.7.12, e considerando que

$$I_o = |E_t^o|^2 \quad I_t = |E_t|^2 \quad (7.81)$$

calculamos o coeficiente de transmissão neste caso como sendo

$$T = e^{-2\alpha d} \quad (7.82)$$

Exemplo de tunelamento: Uma emenda defeituosa entre dois cabos de cobre, no vácuo, deixou um pequeno espaçamento D entre ambos. Sabendo que a função de trabalho (energia necessária para arrancar um elétron do metal) para o cobre é de 4.6eV, calcule o valor máximo de D para que, ao se aplicar uma diferença de potencial de 4V nessa emenda, 99% dos elétrons possam atravessá-la. Para o caso presente é necessário utilizar a fórmula exata (verifique que está correta!)

$$\psi(D) = \frac{\psi(0)}{\sqrt{1 + \frac{e\alpha D - e^{-\alpha D}}{16(E/U_o)(1-E/U_o)}}} \quad \text{sendo} \quad \alpha \equiv \frac{\sqrt{2m(U_o - E)}}{\hbar}$$

que relaciona as funções de onda para o elétron no início $\psi(0)$ e no final $\psi(D)$ da barreira, sendo que E é a energia do elétron e U_o é a altura da barreira.

7.3.2 Estados não estacionários

Para o caso de uma partícula se propagando livremente no espaço, sua equação de onda é da forma

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (7.83)$$

cuja velocidade de fase e de grupo são respectivamente

$$u = \omega/k \quad (7.84)$$

$$u_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (7.85)$$

Sabendo que $\omega = E/\hbar$, $E = p^2/(2m)$ e $p = k\hbar$ podemos escrever

$$\omega = \frac{k^2 \hbar}{2m} \quad (7.86)$$

Substituindo a expressão acima na Eq.(7.85) obtemos

$$u_g = \frac{k\hbar}{m} = p/m = v = 2u \quad (7.87)$$

onde v é a velocidade da partícula. O resultado acima significa:

- A função de onda apresenta dispersão, isto é, sua velocidade varia com k , como no caso da luz se propagando num meio material
- A velocidade da partícula não é a mesma que a velocidade de fase de sua onda associada mas a da velocidade de grupo que, neste caso, é o dobro da velocidade de fase.
- A existência de $u_g \neq u$ significa que não estamos em presença de uma onda harmônica mas de um pulso, formado por um conjunto grande de ondas harmônicas com diferentes ks ao redor de um valor central.

Em conclusão podemos dizer que uma partícula está associada a um pulso e não a uma onda como a representada em Eq.(7.83).

7.3.2.1 Densidade de corrente de probabilidade

O que significa então a Eq.(7.83)? Se escrevemos a probabilidade na forma usual

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1 \quad (7.88)$$

temos que concluir que $|A|^2 = 0$, o que não faz muito sentido. Temos então que encontrar outra formulação para este caso. Vamos escrever

$$\rho \equiv \Psi^* \Psi \quad (7.89)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \quad (7.90)$$

Mas da Eq.(7.28) podemos concluir que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \Psi U \right] \quad (7.91)$$

que substituída na expressão acima resulta em

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i2m} \left[\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right] = -\frac{\hbar}{i2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \quad (7.92)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x} j \quad (7.93)$$

$$j \equiv \frac{\hbar}{i2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \quad (7.94)$$

A expressão acima pode ser escrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (7.95)$$

que é a formulação unidimensional de expressão geral

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (7.96)$$

e que representa a conservação da “probabilidade” onde $\rho = \Psi^* \Psi$ é a densidade de probabilidade e “ \vec{j} ” é a “densidade de corrente de probabilidade”.

Densidade de corrente de probabilidade para uma função de onda monocromática

Para o caso de uma onda propagante como representada na Eq.(7.83), a expressão de j em Eq.(7.94) resulta ser

$$j = |\Psi(x, t)|^2 \frac{k\hbar}{m} = \rho v \quad (7.97)$$

7.4 Princípio de Incerteza

Quanto mais curto o pulso de luz, mais policromática (menos pura fica sua frequência) a luz fica. Um laser emitindo em $\lambda = 850nm$ é “choppado” com uma frequência de $10^{10}Hz$ para formar pulsos a com propósitos de telecomunicações. Qual vai ser a largura espectral ($\Delta\lambda$) aproximada desses pulsos?

7.5 Poço de potencial infinito

Um elétron num poço (monodirecional) de potencial infinito, de 10nm de comprimento, está no seu estado de energia mais baixo. Qual seria a energia do fóton necessário para excitá-lo até o próximo nível de energia no poço?

7.6 Princípio de Incerteza

Veremos que, em decorrência do caráter ondulatório das partículas em geral, existe uma relação de incerteza envolvendo certas grandezas da partícula, tais como a posição e o momento linear, ou a energia e a localização temporal dessa partícula.

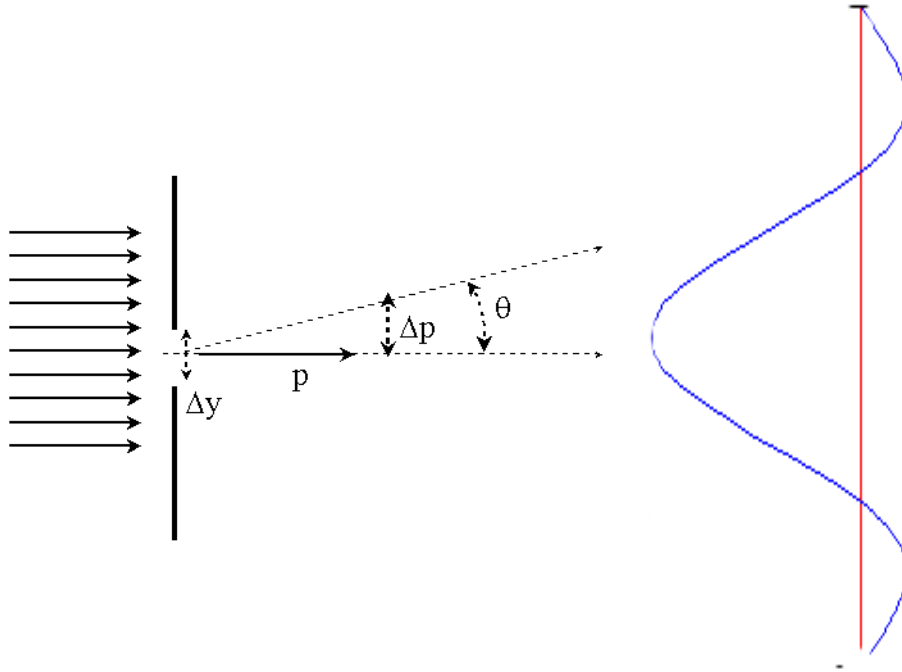


Figura 7.13: *Princípio de incerteza na difração de um elétron*

7.6.1 Incerteza no momento linear

Na Fig.7.13 é descrito um experimento de difração de um feixe de elétrons cujo comprimento de onda está dado pela Eq.(7.2): $\lambda = h/p$. Ao difratar pela fenda de largura Δy forma-se um feixe divergente onde a irradiância da luz difratada é função do ângulo θ (vide Fig.7.13)

$$I = I_{\max} \left(\frac{\sin \phi/2}{\phi/2} \right)^2 \quad \text{onde} \quad \phi \equiv \frac{2\pi}{\lambda} \Delta y \sin \theta \quad (7.98)$$

$$(7.99)$$

Podemos considerar que toda a energia da onda está praticamente limitada à região entre os dois primeiros mínimos, isto é entre $-\pi < \phi/2 < \pi$. Conseqüentemente, a largura angular será

$$\Delta(\sin \theta) \approx \Delta\theta = \frac{\lambda}{\Delta y} \quad (7.100)$$

$$\text{Conseqüentemente} \quad \frac{\Delta p}{p} \approx \Delta\theta \approx \frac{h}{p \Delta y} \Rightarrow \Delta p_y \Delta y \approx h \quad (7.101)$$

A Eq.(7.101), que deriva diretamente da difração, estabelece que existe uma relação de incerteza entre a posição e o momento linear ao longo do mesmo eixo, no caso o eixo y . Isto é, não podemos determinar com total precisão, ao mesmo tempo, a componente (vertical) do momento e a posição (vertical) do elétron ao longo da mesma coordenada espacial. Isso vale para qualquer outra direção. Considerando que o termo à esquerda na Eq.(7.101) tem

dimensão de momento angular e que unidade desta quantidade é \hbar , podemos re-escrever aquela expressão como

$$\boxed{\Delta p_y \Delta y \geq \hbar} \quad (7.102)$$

7.6.2 Incerteza na energia

Seja $f(t)$ uma função de onda e $F(\nu)$ sua Transformada de Fourier (TF) que estão relacionadas assim

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\nu) e^{i2\pi\nu t} d\nu \quad (7.103)$$

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i2\pi\nu t} dt \quad (7.104)$$

onde $F(\nu)$ representa uma onda harmônica de frequência ν . A função $f(t)$ pode ser considerada um pulso temporal cuja largura Δt pode ser calculada segundo [?]

$$\Delta t = \frac{|\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) dt|}{|f(0)|} \quad (7.105)$$

E similarmente para a largura espectral $\Delta\nu$ desse pulso

$$\Delta\nu = \frac{|\int_{-\infty}^{+\infty} F(\nu) d\nu|}{|F(0)|} \quad (7.106)$$

Podemos mostrar facilmente [?] que Δt e $\Delta\nu$ nas Eq.(7.105) e (7.106) verificam a relação

$$\Delta t \Delta\nu \approx 1 \quad (7.107)$$

Substituindo $\Delta\nu = \Delta(h\nu)/h = \Delta(hE)/h$ na Eq.(7.107) obtemos a relação

$$\boxed{\Delta t \Delta E \approx h} \quad (7.108)$$

o que mostra que existe uma relação de incerteza entre a energia da partícula E e sua localização temporal determinada pela duração Δt do pulso. O sinal de “aproximado” nas eqs.(7.101) e (7.108) aparecem nem tanto porque essas equações sejam aproximadas mas porque as larguras das quantidades envolvidas quase nunca são calculadas de acordo com a definição matemática correspondente.

Função de onda de um elétron: A função de onda de um elétron, se propagando livremente no espaço, tem a forma de um pulso de aproximadamente 2.8nm de comprimento e um comprimento de onda $\lambda = 86.8\text{pm}$. Calcule o valor medio de sua energia e a incerteza desta.

Capítulo 8

Equação de Schrödinger e o novo Modelo Atômico

A equação de Schrödinger e o advento da nova mecânica quântica levou a um novo modelo para o átomo, bastante diferente do modelo de Bohr. Preliminarmente, para levar em conta a massa finita M do núcleo, podemos imaginar um sistema formado por um núcleo de massa infinita ao redor do qual orbita um elétron cuja massa reduzida é de

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \quad (8.1)$$

onde m é a massa do elétron. A energia potencial U desse sistema tem origem na atração elétrica entre o núcleo e o elétron e está dada pela expressão

$$U(x, y, z) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (8.2)$$

onde Z é o número atômico. A energia cinética pode ser escrita em função do momento linear

$$K = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2\mu} \quad (8.3)$$

Substituindo as quantidades acima na Eq.(7.29), resulta a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi \quad (8.4)$$

Para aproveitar a simetria esférica do sistema, podemos utilizar a expressão de ∇^2 em coordenadas esféricas [?, ?]

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (8.5)$$

e tentar achar uma solução da forma [?]

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (8.6)$$

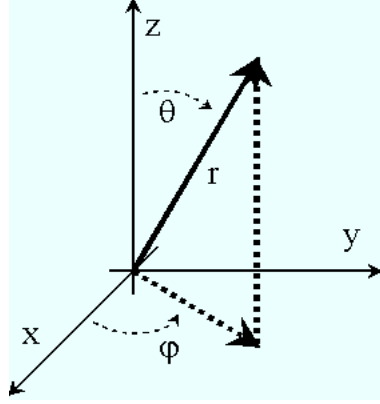


Figura 8.1: Coordenadas esféricas

que substituída na equação de Schrödinger resulta em três equações diferenciais independentes

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_\ell^2\Phi \quad (8.7)$$

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{m_\ell^2\Theta}{\sin^2\theta} = \ell(\ell+1)\Theta \quad (8.8)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U(r)) R = \ell(\ell+1) \frac{R}{r^2} \quad (8.9)$$

onde m_ℓ e ℓ são constantes que por razões históricas foram colocadas na forma m_ℓ^2 e $(\sqrt{\ell(\ell+1)})^2$. A Eq.(8.7), onde deve ser $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$, φ só tem solução univocamente definida para o caso

$$|m_\ell| = 0, 1, 2, \dots \quad (8.10)$$

onde m_ℓ é chamado de número quântico magnético. Da mesma forma a Eq.(8.8) só tem solução finita e contínua para

$$\ell = |m_\ell|, |m_\ell| + 1, |m_\ell| + 2, \dots \quad (8.11)$$

onde ℓ é chamado de número quântico orbital. Finalmente a Eq.(8.9) só tem solução finita e contínua para valores discretos da energia

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = -\frac{13.6eV}{n^2} Z^2 \quad (8.12)$$

$$\text{para } n = \ell + 1, \ell + 2, \ell + 3, \dots \quad (8.13)$$

onde n é chamado de número quântico principal. Os números acima podem ser escritos de uma forma mais conveniente assim

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.14)$$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1 \quad (8.15)$$

$$m_\ell = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \dots, 0, \dots, \ell-2, \ell-1, \ell \quad (8.16)$$

8.1 Momento angular

8.1.1 Número quântico orbital

Enquanto o significado de n é claro no sentido de que determina a quantização da energia total do átomo, é possível demonstrar [?] que l na Eq.(8.11) representa a quantização no valor do momento angular L , assim:

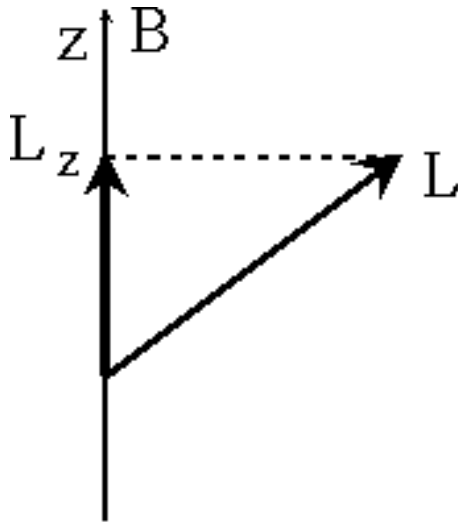
$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, (n - 1) \quad (8.17)$$

A Eq.(8.17) leva a resultados diferentes dos obtidos no modelo de Bohr, representados pela Eq.(6.35)

$$L = n\hbar$$

onde L não pode ser zero pois $n \neq 0$. Não obstante, para $n = 1$, temos $l = 0$ e nesse caso a Eq.(8.17) nos leva a $L = 0$, em contradição com o modelo simples de Bohr!!

8.1.2 Número quântico magnético



Na presença de um campo magnético que quebre a isotropia do espaço, a componente de \vec{L} ao longo desse campo (vamos dizer que seja o eixo z) também está quantizada e essa quantização será dada justamente pelo número quântico magnético m_ℓ

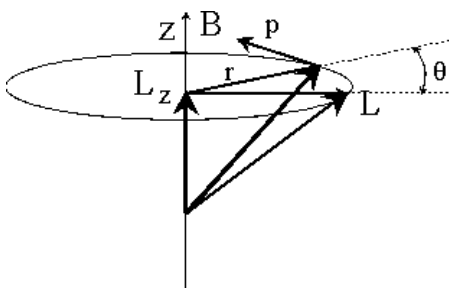
$$L_z = m_\ell \hbar \quad (8.18)$$

$$m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell$$

Momento angular \vec{L} e sua componente L_z na direção da indução magnética B .

8.1.2.1 Incerteza na posição angular

Escrevendo a Eq.(7.101) em termos da coordenada “x”, resulta



$$\Delta x \Delta p_x = h \quad (8.19)$$

$$\frac{\Delta x}{r} r \Delta p_x = \Delta \theta \Delta L_z = h \quad (8.20)$$

especificando m_ℓ sabemos exatamente que $\Delta L_z = 0$ e então não sabemos mais nada sobre a posição de \vec{L} .

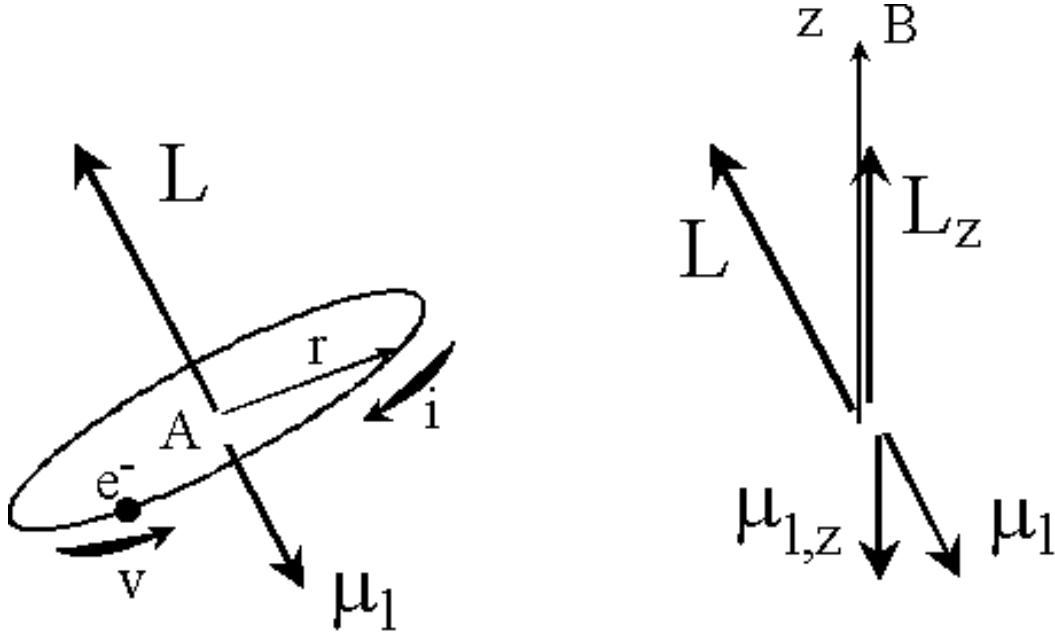


Figura 8.2: Momento angular \vec{L} e magnético orbital $\vec{\mu}_\ell$ de um elétron e^- numa órbita com número quântico orbital l , e o dipolo magnético equivalente levando em conta a área A e corrente i equivalentes (esquerda). Componente do momento magnético orbital $\mu_{1,z}$ na direção da indução magnética B (direita)

8.1.2.2 Momento dipolar magnético orbital

Seja um elétron de massa m se movendo com velocidade v e raio r numa órbita de um modelo atômico de Bohr. Isso equivale a uma corrente

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \quad (8.21)$$

sendo que o momento do dipolo magnético orbital correspondente seria

$$\mu_\ell = iA = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = evr/2 \quad (8.22)$$

$$\frac{\mu_\ell}{L} = \frac{evr}{2} \frac{1}{mvr} = \frac{e}{2m} = g_\ell \frac{\mu_B}{\hbar} \quad (8.23)$$

$$\text{com } \mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \times 10^{-24} (\text{Am}^2) \text{ e } g_\ell = 1 \quad (8.24)$$

onde μ_B é o “magneton” de Bohr e g_ℓ é o “fator orbital” que corrige o valor do momento magnético para órbitas que se afastem do modelo circular ideal. Podemos escrever então

$$\vec{\mu}_\ell = -\frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} \vec{L} \quad (8.25)$$

A relação acima é muito geral, independente do raio, da freqüência e da forma da órbita e então

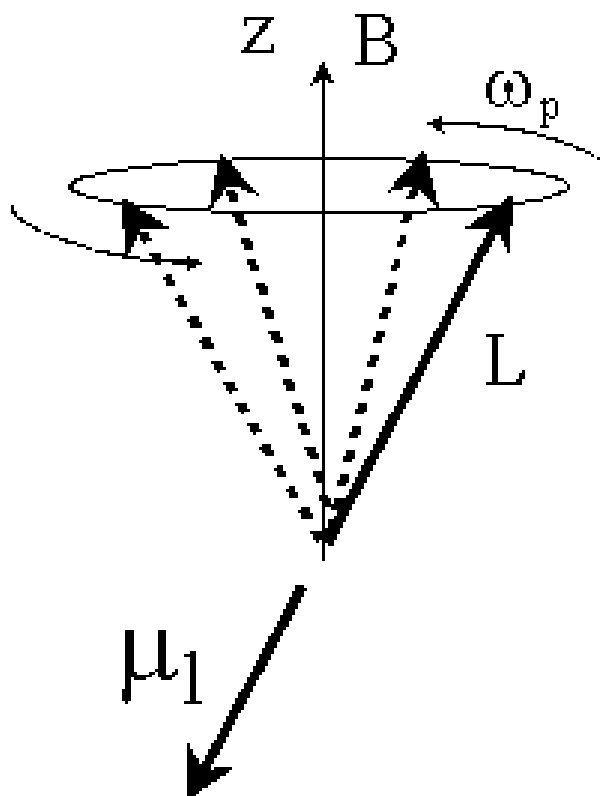
$$\mu_\ell = -\frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} L = -\frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} = -g_\ell \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (8.26)$$

$$\mu_{\ell,z} = -\frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} L_z = -\frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} m_\ell \hbar = -g_\ell \mu_B m_\ell \quad (8.27)$$

Valores de ℓ e m_ℓ para cada n

n	1	2		3		
ℓ	0	0	1	0	1	2
m_ℓ	0	0	-1,0,1	0	-1,0,1	-2,-1,0,1,2
Nº de estados para cada ℓ	1	1	3	1	3	5
nome do orbital	s	s	p	s	p	d
estados de spin	2	2	6	2	6	10
Nº de estados para cada n	2	8		18		

8.1.2.3 Precessão do dipolo



O torque do dipolo num campo magnético \vec{B} é

$$\vec{\tau} = \vec{\mu}_\ell \times \vec{B} \quad (8.28)$$

e a energia potencial

$$U = -\vec{\mu}_\ell \cdot \vec{B} = g_\ell \mu_B m_\ell B \quad (8.29)$$

e a frequência de precessão do dipolo ao redor \vec{B} da direção de \vec{B} é

$$\vec{\omega}_P = \frac{g_\ell \mu_B}{\hbar} \vec{B} \quad (8.30)$$

onde $\vec{\omega}_P$ é paralelo com \vec{B} . Das Eqs.(8.29) e (8.30) resulta

$$\hbar \omega_P = g_\ell \mu_B B = \Delta U \text{ para } \Delta m_\ell = 1 \quad (8.31)$$

Eq.(8.30) mostra que, para um dado campo magnético B , ω_P é uma constante que independe, em particular, do valor de m_ℓ , isto é, do valor da energia U . Isso significa que estamos em presença de um oscilador (quântico) cuja energia só pode variar por valores discretos de $\hbar \omega_P$. E neste caso é exatamente o que ocorre pois o número m_ℓ não varia em mais de uma unidade por vez ($\Delta m_\ell = \pm 1$), emitindo (ou absorvendo) um quanta de energia $\hbar \omega_P$. Esta é a fundamentação teórica da espectroscopia de ressonância paramagnética eletrônica e, estendendo o raciocínio para os prótons no núcleo dos átomos, também da ressonância magnética nuclear.

8.1.3 Número quântico de spin

As evidências experimentais (experimento de Stern-Gerlach) obtidas na década de 20 do século XX, indicaram que o elétron possuía um momento de dipolo magnético intrínseco, independente de seu movimento orbital. Poderíamos pensar num elétron girando sobre ele mesmo e por isso tendo um momento dipolar magnético de spin μ_s , devido à existência de um momento angular intrínseco S e que, como no caso de L e μ_ℓ , esses parâmetros estejam quantizados

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad (8.32)$$

$$S_z = \hbar m_s \quad (8.33)$$

onde s e m_s são o momento quântico de spin e o momento quântico magnético de spin, respectivamente. Como no caso do movimento orbital podemos escrever também

$$\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (8.34)$$

$$\mu_{s,z} = -g_s \mu_B m_s \quad (8.35)$$

onde g_s é o fator “ g_s ” de spin. Experimentalmente concluiu-se que

$$s = 1/2 \quad (8.36)$$

$$m_s = -1/2, +1/2 \quad (8.37)$$

$$g_s = 2 \quad (8.38)$$

Tudo o que foi dito sobre a precessão de um dipolo magnético em relação ao momento angular orbital, pode ser repetido em relação ao momento angular de spin.

Spin e momento dipolar magnético: O próton também tem momento angular de spin e por causa do seu spin, um próton num campo magnético \vec{B} tem, como no caso do elétron, um movimento de precessão com uma frequência angular característica ω_P que vale

$$\omega_P^p = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} B \quad g_s = 2$$

$$\text{magneton de Bohr para o próton: } \mu_B^p = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

Como exemplo compare, para um mesmo campo magnético, as frequências de precessão para o spin de um elétron e de um próton:

$$\frac{\omega_P(\text{elétron})}{\omega_P^p(\text{próton})} = \frac{m_p}{m_e} = \frac{1.67 \times 10^{-27}}{9.11 \times 10^{-31}} \approx 1833 \quad (8.39)$$

A energia potencial para o dipolo magnético de um próton no campo magnético é

$$U = -\vec{\mu}_s^p \cdot \vec{B}$$

onde $\vec{\mu}_s^p$ é o momento dipolar magnético de spin para o próton. Calcule a frequência da radiação absorvida ou emitida pelo próton, quando ele inverte a orientação do seu spin, para um campo $B=1\text{Wb/m}^2$. Este sistema, como no caso do elétron, também é um oscilador quântico no sentido que ele tem uma frequência de oscilação fixa (ω_P^p) com diferentes estados de energia quantizados.

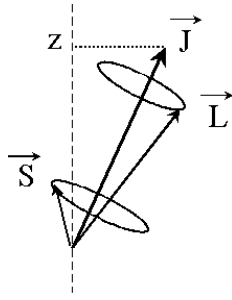


Figura 8.3: Momentos angulares de spin e orbital, acoplados e precessionando ao redor do vetor momento angular total \vec{J} , que por sua vez precessiona ao redor do eixo “z”.

Exemplo

Os átomos excitados de sódio emitem duas linhas muito próximas (o duplete de sódio) cujos comprimentos de onda são 588.995nm e 589.592nm.

- Calcule a diferença de energia entre os níveis de energia responsáveis por essas duas linhas

$$\begin{aligned} \Delta E &= hc\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right) \\ &= 6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \cdot 3 \times 10^8 \left(\frac{1}{0.588995} - \frac{1}{0.589592}\right) 10^6 = 3.41 \times 10^{-22} \text{ J} = 2.13 \times 10^{-4} \text{ eV} \end{aligned} \quad (8.40)$$

- Essa diferença de energia ocorre porque o momento de dipolo magnético de spin (que vale 1 magneton de Bohr) pode estar orientado no mesmo sentido ou em sentido oposto ao campo magnético interno associado ao movimento orbital do elétron. Use o resultado do item acima para calcular a intensidade desse campo magnético interno

$$\Delta E = 3.41 \times 10^{-22} \text{ J} = 2\mu_B B \quad \mu_B = 9.27 \times 10^{-24} \text{ Am}^2 \Rightarrow B = 18.4 \text{ Tesla} \quad (8.42)$$

8.1.4 Interação spin-órbita

O movimento orbital do elétron e o seu spin, ambos produzem momentos dipolares magnéticos associados, que podem interagir um com o outro. Se esta interação mútua é mais forte que a interação de cada um deles com o campo externo, então aquela predomina ficando ambos (spin e momento orbital) precessionando ao redor do vetor soma que é o momento angular total \vec{J}

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (8.43)$$

Neste caso é o momento total que tem sua componente J_z quantizada

$$J_z = m_j \hbar \quad (8.44)$$

onde o máximo valor possível para m_j deve ser

$$(m_j)_{\text{max}} = l + 1/2 \quad (8.45)$$

8.2 Regras de seleção para as transições atômica

Quando um átomo é excitado, e um elétron passa para um nível energético mais alto, após um tempo característico ele decai emitindo um fóton cuja energia é a diferença de energia entre ambos níveis. Essas transições porém não ocorrem entre quaisquer níveis mas obedecem a uma regra de seleção, originada nas medidas experimentais e depois justificada pela teoria. Essa regra estabelece que as transições só podem ocorrer quando

$$\Delta m_j = 0, \pm 1 \quad \text{e} \quad \Delta m_\ell = \pm 1 \quad (8.46)$$

Isso significa que ao ocorrer uma transição atômica, ocorre também uma variação no valor de \hbar no momento angular (ao longo do eixo z) total no átomo. Em função do princípio de conservação então, o fóton emitido no processo deverá ter um momento angular (ao longo desse mesmo eixo z) no valor de \hbar , o que foi efetivamente comprovado experimentalmente. Isso significa também que os fótons resultantes são, por conta do seu momento angular intrínseco, circularmente polarizados. É bom lembrar que na Teoria Eletromagética Clássica, o momento angular do campo é uma quantidade que independe do sistema de coordenadas [?] o que está em perfeita harmonia com o fóton ter um momento angular próprio.

8.3 Funções de onda nos átomos

Limitar-nos-emos a descrever algumas funções de onda para um elétron isolado num átomo.

8.3.1 Átomo de Hidrogênio para $n = 1$

No modelo de Bohr para o átomo de H, a energia potencial é eletrostática e representada por

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (8.47)$$

Uma solução possível para a equação de Schrödinger com uma energia potencial dada pela Eq.(8.47) é [?]

$$\psi(r) = A e^{-r/a_0} \quad (8.48)$$

↓

$$\text{pela condição de normalização: } \int_V |\psi(r)|^2 dV = 1 \quad (8.49)$$

↓

$$|A|^2 \int_0^\infty e^{-2r/a_0} 4\pi r^2 dr = 4\pi |A|^2 \int_0^\infty e^{-2r/a_0} r^2 dr = 1 \quad (8.50)$$

$$(8.51)$$

A integral da equação acima se calcula assim

$$\int_0^\infty e^{-ax} x^n dx = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}} \quad (8.52)$$

$$\text{sendo que } \Gamma(n+1) = n! \quad \text{para } n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.53)$$

$$\Downarrow$$

$$\int_V |\psi(r)|^2 dv = A^2 4\pi \frac{2!}{(2/a_o)^3} = 1 \quad (8.54)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_o^3}} \Rightarrow \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_o^3}} e^{-r/a_o} \quad (8.55)$$

A densidade de probabilidade radial para o elétron é então

$$P(r)dr = |\psi(r)|^2 dv \quad (8.56)$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3} e^{-2r/a_o} 4\pi r^2 dr \quad (8.57)$$

$$\Downarrow$$

$$P(r) = \frac{4}{a_o^3} r^2 e^{-2r/a_o} \quad (8.58)$$

A Eq.(8.58) está graficada na Fig.8.4, e esse resultado mostra que não há uma órbita clássica

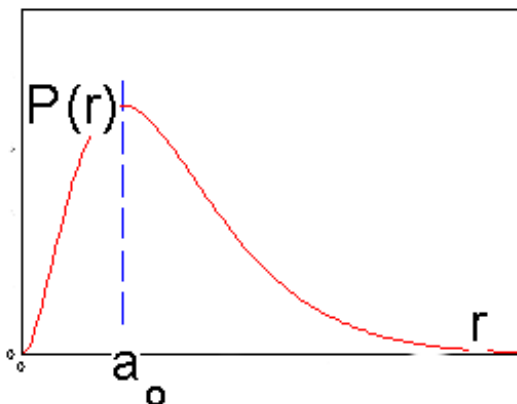


Figura 8.4: Probabilidade radial para a órbita de um elétron no átomo de Hidrogênio, para $n = 1$.

e bem definida como poderia indicar a expressão dos níveis de energia calculados pela teoria de Bohr. Em lugar disso existe uma região de probabilidade para a nuvem de elétrons, com uma posição onde a probabilidade de encontrar esse elétron é máxima

$$\frac{dP(r)}{dr} = \frac{8}{a_o^3} r e^{-2r/a_o} - \frac{8}{a_o^3} \frac{r^2}{a_o} e^{-2r/a_o} = 0 \quad (8.59)$$

e do resultado acima vemos que a máxima probabilidade está em

$$\Downarrow$$

$$\boxed{r = a_o}$$

de acordo com o indicado na Fig.8.4.

Átomos: As energias dos estados quânticos do elétron num átomo de hidrogênio estão dadas por

$$E_n = -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = 13.6eV \quad (8.60)$$

onde r é a coordenada radial e n é o número quântico principal. Sua função de onda para $n=1$ é

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}R_0^{3/2}} e^{-r/R_0} \quad (8.61)$$

Calcule:

1. O comprimento de onda da radiação capaz de ionizar o átomo de hidrogênio no seu estado fundamental (de menor energia).
2. A probabilidade de que, no estado fundamental, o elétron se encontre numa casca esférica de radio $r = R_0 \pm 0.1R_0$

Dica: num intervalo pequeno, podemos aproximar

$$\int_{x_0-\delta x}^{x_0+\delta x} f(x)dx \approx f(x_0)2\delta x \quad (8.62)$$

8.3.1.1 Energia

Substituindo as Eqs.(8.47) e (8.48) na Eq.(8.9), lembrando que para $n = 1$ deve ser $\ell = 0$ e reagrupando termos, chegamos à expressão

$$\left(\frac{\hbar^2}{ma_o} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o} \right) \frac{1}{r} - \frac{\hbar^2}{2ma_o^2} = E \quad (8.63)$$

Sabendo que E deve ser independente de r , chegamos aos seguintes resultados:

$$\left(\frac{\hbar^2}{ma_o} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o} \right) = 0 \Rightarrow a_o = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{me^2} \quad (8.64)$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma_o^2} = -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \quad (8.65)$$

onde as expressões para a_o e para E correspondem exatamente às formulações para r_n e E_n , no caso $n = 1$, no modelo de Bohr, como indicado nas Eqs.(6.36) e (6.37), respectivamente.

8.3.2 Átomo com $Z \neq 1$ e $n = 2$

Para o caso de $Z \neq 1$, $n = 2$, $l = 0$ e $m_\ell = 0$, a função de onda para um elétron (único) num átomo de número atômico Z é da forma

$$\psi_{200} = A(2 - Zr/a_o) e^{-\frac{Zr}{2a_o}} \quad (8.66)$$

Normalizando a função, obtemos o valor de A assim

$$\int_0^{+\infty} |\psi|^2 dV = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^2 \quad (8.67)$$

Substituindo a Eq.(8.66) na equação de Schrödinger onde a energia potencial é [?]

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r} \quad (8.68)$$

chegamos à expressão

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{4Z}{ra_o} + \frac{5Z^2}{2a_o^2} - \frac{Z^3 r}{4a_o^3} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r} \left(2 - \frac{Zr}{a_o}\right) = E \left(2 - \frac{Zr}{a_o}\right) \quad (8.69)$$

Reagrupando termos escrevemos

$$\left[\frac{e^2 Z^2}{4\pi\epsilon_o a_o} - \frac{5\hbar^2 Z^2}{4ma_o^2} \right] + \frac{1}{r} \left[\frac{2\hbar^2 Z}{ma_o} - \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_o} \right] + \frac{\hbar^2 Z^3}{8ma_o^3} r = E \left(2 - \frac{Z}{a_o} r\right) \quad (8.70)$$

e considerando que a energia E não pode depender de r , chegamos às seguintes relações

$$\left[\frac{e^2 Z^2}{4\pi\epsilon_o a_o} - \frac{5\hbar^2 Z^2}{4ma_o^2} \right] = 2E \quad (8.71)$$

$$\left[\frac{2\hbar^2 Z}{ma_o} - \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_o} \right] = 0 \quad (8.72)$$

$$\frac{\hbar^2 Z^3}{8ma_o^3} = -E \frac{Z}{a_o} \quad (8.73)$$

$$\text{Da Eq.(8.73) se obtém a relação } E = -\frac{\hbar^2 Z^2}{8ma_o^2} \quad (8.74)$$

$$\text{e da Eq.(8.72) se obtém a expressão para } a_o : \frac{1}{a_o} = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_o \hbar^2} \quad (8.75)$$

$$\text{que substituída na Eq.(8.74) ou (8.71) resulta em } E = -\frac{e^4 Z^2 m}{8\epsilon_o^2 \hbar^2} \frac{1}{2^2}, \quad (8.76)$$

que é, por sua vez, idêntica à formulação de Bohr para $n = 2$ na Eq.(6.37). Note que a expressão de a_o na Eq.(8.75) corresponde ao raio do nível fundamental para $n = 1$ no modelo de Bohr.

8.3.2.1 Probabilidade

Para calcular a função densidade de probabilidade $P(r)$ neste caso ($n = 2$ e $l = 0$), procedemos como indicado anteriormente para se chegar à Eq.(8.58), assim:

$$P(r) = \left| \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^2 (2 - Zr/a_o) e^{-\frac{Zr}{2a_o}} \right|^2 4\pi r^2 \quad (8.77)$$

$$\Rightarrow P(r) = \frac{r^2}{8a_o^3} (2 - r/a_o)^2 e^{-r/a_o} \quad (8.78)$$

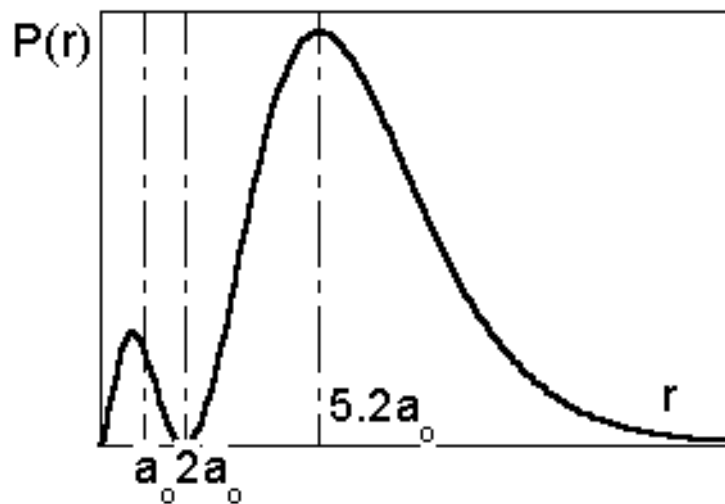


Figura 8.5: Densidade de probabilidade radial para a órbita de um elétron no átomo de Hidrogênio para $n = 2$ e $l = 0$ ($m_l = 0$).

que foi graficada na Fig.8.5.

Capítulo 9

Condução em sólidos

9.1 Sólidos

Num sólido, as distâncias entre os átomos é suficientemente pequena como para poder alterar significativamente as forças internas dentro de cada átomo e neste caso, as propriedades da molécula ou átomo pode ser significativamente alterada pela presença de átomos ou moléculas vizinhas.

Nos chamados *sólidos moleculares* todos os elétrons na molécula estão apareados e por isso não podem formar ligações covalentes ou de qualquer outro tipo com as moléculas vizinhas. A força de ligação intermolecular é fraca e é chamada de “van der Waals”, originando-se em interação entre dipolos. Mesmo que a molécula não tenha momento dipolar permanente, os momentos dipolares instantâneos são suficientes para induzir dipolos na molécula vizinha e assim produzir forças (fracas) de ligação. Estes sólidos são facilmente deformáveis porque a força de ligação intermolecular é fraca e não é direcional. Por não ter elétrons livres, são pouco condutores de calor e de eletricidade.

Os chamados *sólidos iônicos* como no caso do **NaCl**, estão formados por uma rede tridimensional de íons positivos e negativos alternados. A força intermolecular é forte e por isso são duros e com alto ponto de fusão mas são maus condutores térmicos e elétricos porque não têm elétrons livres.

Nos *sólidos covalentes* os átomos estão ligados por elétrons compartilhados na camada externa (de valência) e como essas ligações são direcionais, são difíceis de se deformar. Por não ter elétrons livres, também são maus condutores térmicos e elétricos.

Nesta parte vamos nos concentrar nos *sólidos metálicos* onde os íons positivos estão estreitamente empacotados e os elétrons externos, que estão mais fracamente ligados nos átomos individuais, estão compartilhados pelo conjunto dos íons, circulando livremente entre eles. A ligação entre os íons positivos é resultado da presença dos elétrons entre eles. São, obviamente, bons condutores de eletricidade e de calor.

9.2 Condutividade

Um átomo de metal tem um ou mais elétrons desapareados na camada mais externa (valência) e quando N desses átomos se aproximam suficientemente, o orbital de um se superpõe e é compartilhado com os dos vizinhos ao mesmo tempo que se subdivide em N subníveis energeticamente muito próximos, para alojar (respeitando as regras de seleção) os elétrons dos N

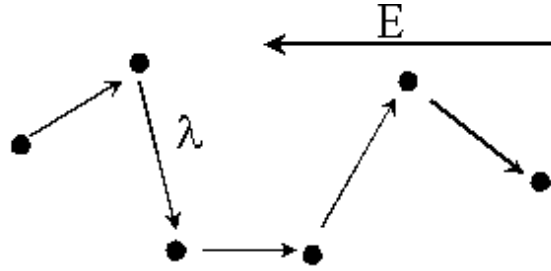


Figura 9.1: Movimento de elétrons num condutor elétrico, sob ação de um campo elétrico E , onde λ é a distância média entre colisões.

átomos participantes da estrutura. No desenvolvimento matemático que segue veremos que a largura de cada banda contendo os N subníveis não depende do número de átomos mas da distância entre eles na estrutura. Como o número N pode ser muito grande (da ordem do número de Avogadro, 10^{23} átomos/mol) e a largura da banda é fixa (de uns poucos eV), fica evidente que a estrutura de subníveis em cada banda é praticamente energeticamente contínua.

A Fig.9.1 representa o movimento de um elétron sob a ação de um campo elétrico. Esses elétrons têm uma velocidade média, com direção aleatória, por estarem em equilíbrio a uma temperatura T . Sob ação de um campo elétrico externo E , eles sofrem um efeito de arraste em consequência do qual adquirem uma velocidade de arraste, pequena comparada com a sua velocidade média (de equilíbrio térmico), na direção desse campo. Vamos definir as seguintes quantidades:

$$\text{aceleração entre colisões: } a = Ee/m \quad (9.1)$$

$$\text{velocidade média dos elétrons: } \bar{v}$$

$$\text{caminho livre médio entre colisões } \lambda$$

$$\text{velocidade de arraste } v_d = at = a\lambda/\bar{v} \ll \bar{v}$$

$$\text{tempo entre colisões: } t$$

$$\text{corrente } i = snev_d \quad (9.2)$$

$$\text{densidade de corrente } j = i/s = nev_d = nea\lambda/\bar{v} = ne\frac{\lambda Ee}{\bar{v} m} = \frac{ne^2\lambda}{m\bar{v}}E \quad (9.3)$$

$$\text{condutividade: } \sigma = j/E = \frac{ne^2\lambda}{m\bar{v}} \quad (9.4)$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma = ne\mu \geq 0} \quad \mu \equiv v_d/E \quad (9.5)$$

onde n é a densidade volumétrica de elétrons e s a área da seção transversal. Para o caso de termos elétrons e buracos, a condutividade é somada assim

$$\sigma = n_e q_e \mu_e + n_h q_h \mu_h \quad (9.6)$$

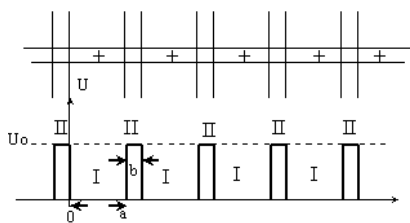


Figura 9.2: Representação simplificada (modelo de Kronig-Penney) do potencial elétrico periódico U numa rede cristalina formada por íons fixos e elétrons movendo-se livremente: Estado sólido.

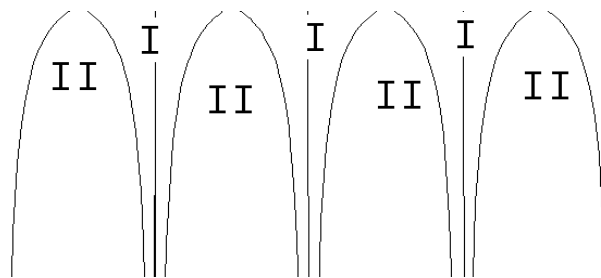


Figura 9.3: Representação do potencial exato para uma rede cristalina

9.3 Elétron no campo periódico de um cristal: Estado sólido

Numa estrutura cristalina onde os átomos estão estreitamente “empacotados”, os elétrons na camada mais externa de cada átomo (elétrons de valência) sofrem forte interação dos átomos vizinhos. O presente modelo simplificado [?] destina-se a descrever justamente estes elétrons mais externos. A Fig.9.2 mostra o modelo simplificado do potencial periódico num cristal, onde se move um elétron. O potencial periódico está indicado por barreiras de potencial de largura b e altura U_0 separados de uma distância a . Se levássemos em conta que o potencial elétrico varia como $1/r$ perto do núcleo atômico, a forma do potencial periódico seria a da Fig.9.3, mas isso é demasiado complicado para calcular e, por isso, aceita-se o modelo simplificado da Fig.9.2

9.4 Equação de Schrödinger

Vamos escrever a equação de Schrödinger nas duas diferentes regiões indicadas na Fig.9.2. Na região I temos que

$$U_0 = 0 \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + 0\psi = E\psi \tag{9.7}$$

Na região II temos

$$U_0 \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi \tag{9.8}$$

Vamos definir as seguintes quantidades:

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} E \tag{9.9}$$

$$\gamma^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \tag{9.10}$$

O sistema de equações Eqs.(9.7) e (9.8) foi resolvido por Bloch, que propôs a solução

$$\psi(x) = u(x) e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} \quad (9.11)$$

A amplitude dessa função não é constante, diferentemente do caso do poço de potencial infinito, mas uma função $u(x)$ que se supõe ser periódica com a mesma periodicidade da rede. Explicitando a derivada segunda

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{d^2u}{dx^2} + i2k \frac{du}{dx} - k^2u \right) e^{ikx} \quad (9.12)$$

e substituindo essa expressão na Eqs.(9.7) e (9.8) teremos respectivamente

$$\text{na região I } \frac{d^2u}{dx^2} + i2k \frac{du}{dx} - (k^2 - \alpha^2)u = 0 \quad (9.13)$$

$$\text{na região II } \frac{d^2u}{dx^2} + i2k \frac{du}{dx} - (k^2 + \gamma^2)u = 0 \quad (9.14)$$

As soluções das Eqs.(9.13) e (9.14) são vibrações amortecidas do tipo:

$$\text{região I } u_I = e^{-ikx} (A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x}) \quad (9.15)$$

$$\text{região II } u_{II} = e^{-ikx} (C e^{-\gamma x} + D e^{\gamma x}) \quad (9.16)$$

Para eliminar as constantes A , B , C , e D usamos as condições de contorno, considerando que ψ e $d\psi/dx$ são contínuas na interface entre I e II:

1.

$$u_I(0) = u_{II}(0) \Rightarrow A + B = C + D \quad (9.17)$$

2.

$$\left. \frac{du_I}{dx} \right]_{x=0} = \left. \frac{du_{II}}{dx} \right]_{x=0} \quad (9.18)$$

↓

$$A(i\alpha - ik) + B(-i\alpha - ik) = C(-ik - \gamma) + D(\gamma - ik) \quad (9.19)$$

3.

$$u_I(a) = u_{II}(-b) \quad (9.20)$$

↓

$$A e^{(i\alpha - ik)a} + B e^{(-i\alpha - ik)a} = C e^{(ik + \gamma)b} + D e^{(ik - \gamma)b} \quad (9.21)$$

4.

$$\left. \frac{du_I}{dx} \right]_{x=a} = \left. \frac{du_{II}}{dx} \right]_{x=-b} \quad (9.22)$$

↓

$$\begin{aligned} A i(\alpha - k) e^{ia(\alpha - k)} - B i(\alpha + k) e^{-ia(\alpha + k)} = \\ -C(\gamma + ik) e^{(ik + \gamma)b} + D(\gamma - ik) e^{(ik - \gamma)b} \end{aligned} \quad (9.23)$$

Utilizando as 4 equações acima podemos eliminar as 4 constantes, resultando a relação

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sinh(\gamma b) \sin(\alpha a) + \cosh(\gamma b) \cos(\alpha a) = \cos k(a + b) \quad (9.24)$$

Podemos ainda fazer algumas simplificações:

- A barreira de potencial é finita

$$U_0 b \rightarrow \text{finito} \quad (9.25)$$

- A energia da barreira é muito maior que a energia do elétron

$$U_0 \gg E \Rightarrow \gamma^2 \approx \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \Rightarrow \alpha \ll \gamma \quad (9.26)$$

- A largura da barreira é muito pequena

$$\gamma b = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sqrt{(U_0 b) b} \rightarrow \text{muito pequeno pois } b \rightarrow 0 \quad (9.27)$$

$$\downarrow$$

$$\sinh(\gamma b) \approx \gamma b \quad (9.28)$$

$$\cosh(\gamma b) \approx 1 \quad (9.29)$$

- Os átomos estão estreitamente “empacotados”, ou seja

$$b \ll a \quad (9.30)$$

Com as simplificações indicadas, a Eq.(9.24) fica assim

$$\frac{m}{\alpha \hbar^2} U_0 b \sin \alpha a + \cos \alpha a = \cos ka \quad (9.31)$$

$$\downarrow$$

$$\mathcal{P} \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka \quad \mathcal{P} \equiv \frac{maU_0 b}{\hbar^2} \quad (9.32)$$

A Eq.(9.32) está resolvida graficamente na Fig.9.4, onde temos $\alpha a = a\sqrt{2mE}/(\hbar^2)$ em abscissas. A energia E só pode ocupar as bandas “permitidas” indicadas na Fig.9.4 pelas flechas, e separadas pelas bandas “proibidas”.

9.5 Conclusões

- A largura das bandas permitidas vai aumentando quando aumenta $\alpha \propto \sqrt{E}$.

- A largura das bandas depende de $\mathcal{P} = \frac{ma}{\hbar^2} U_0 b$ sendo que:

1. Se $U_0 b$ é grande $\Rightarrow \mathcal{P}$ fica grande também, as curvas são mais verticais e as larguras das bandas permitidas ficam mais estreitas

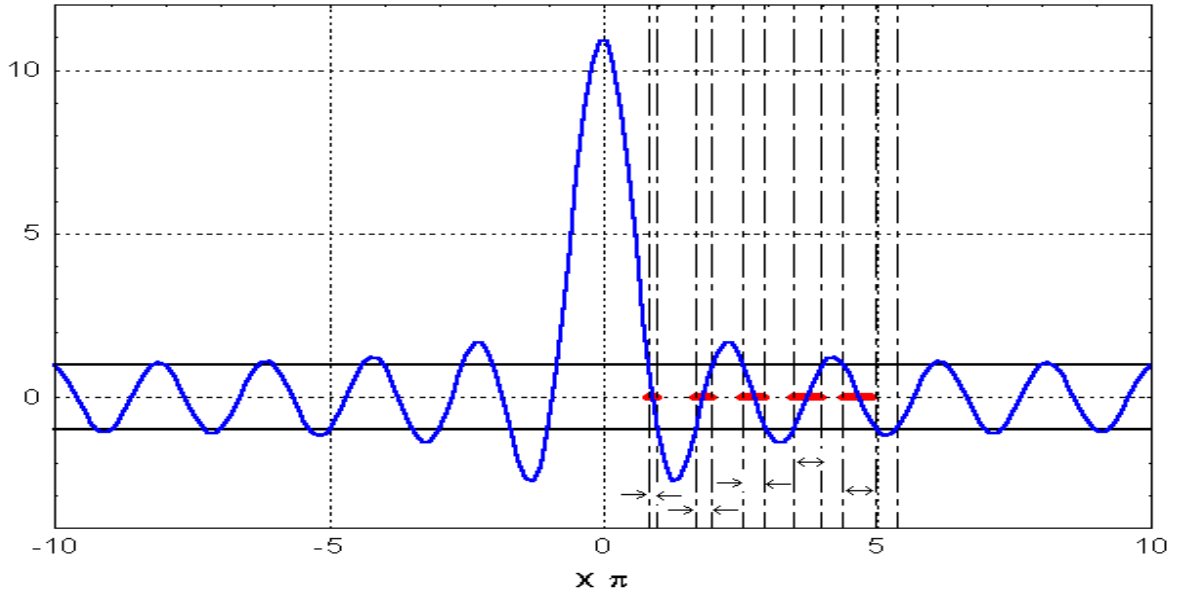


Figura 9.4: Bandas discretas para a energia num campo periódico de um cristal: A curva azul oscilante representa a função $10(\sin \pi x / \pi x) + \cos \pi x$ onde $x\pi \equiv \alpha a$ (proporcional a \sqrt{E}) e onde foi arbitrariamente adotado o valor $\mathcal{P} = 10$, que é proporcional a $U_0 b$. Ela intercepta os valores $+1$ e -1 , sinalizando assim a posição das bandas permitidas para a energia, indicadas pelas flechinhas no gráfico

2. Se $U_0 b$ é pequeno \Rightarrow as bandas permitidas são mais largas
3. Se

$$\mathcal{P} \rightarrow 0 \Rightarrow \cos \alpha a = \cos ka \Rightarrow \alpha = k \quad (9.33)$$

$$\begin{aligned} &\Downarrow \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (9.34) \\ &\Downarrow \end{aligned}$$

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m} \quad \text{elétron livre} \quad (9.35)$$

4. Se

$$\mathcal{P} \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} \rightarrow 0 \Rightarrow \alpha a = n\pi \quad (9.36)$$

$$\begin{aligned} &\Downarrow \\ \alpha^2 &= \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (9.37) \\ &\Downarrow \end{aligned}$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (9.38)$$

que é a mesma equação que descreve o movimento de um elétron num poço de potencial infinito. Isso significa que temos as condições que descrevem um átomo isolado.

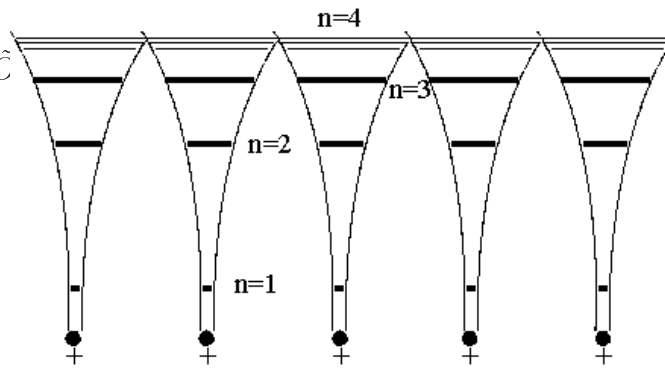
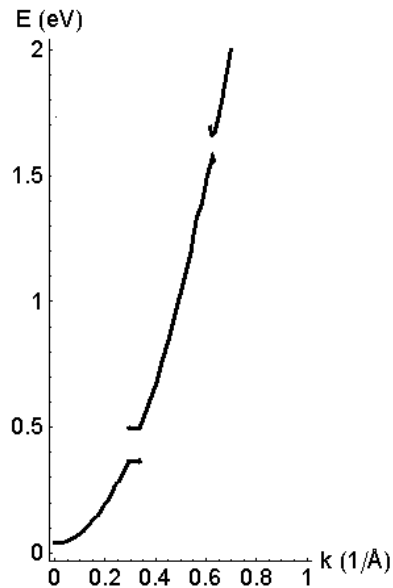


Figura 9.5: Estrutura de bandas para o cobre onde estão representados os primeiros 3 níveis quânticos principais ligados a cada um dos átomos, e o nível mais externo ($n=4$) compartilhado com as átomos vizinhos e por isso subdividido em numerosos estados quânticos formando a banda de condução



A Eq.(9.32) pode ser graficada de forma de mostrar a relação entre o parâmetro k (em abscissas) e a energia E (em ordenadas), como aparece na figura ao lado, que foi calculada para os seguintes parâmetros:

$$a = 9.77 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (9.39)$$

$$\frac{U_0}{q} b = 3.9 \times 10^{-11} \text{ eV m} \quad (9.40)$$

Note a presença de bandas “proibidas” na faixa de 0.4eV e 1.6eV.

estimativa da largura da banda ΔE :

$$\Delta E = (2 \times 1 - 1) \pi^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \approx 3\text{eV} \quad (9.41)$$

9.5.1 Resumo

Elétrons fortemente ligados:
 $U_0 \rightarrow \infty$

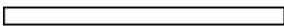
↓

Elétron ligado num único
 átomo ou íon

↓

Estrutura de bandas muito
 estreitas com energias disc-
 retas da forma

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

 n=4

Elétron se movendo num
 potencial periódico: Estado
 sólido

↓

Bandas com larguras cres-
 centes com a energia da
 banda.

 n=4


Elétron não ligado: livre

$$U_0 b \rightarrow 0$$


↓


Banda infinitamente larga

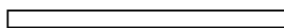


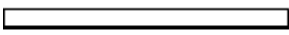
 n=3

 n=3

 n=2

 n=2

 n=1

 n=1

9.6 Isolantes, metais e semicondutores

A Fig.9.6 mostra a estrutura de bandas de um isolante típico como o diamante, onde o último nível ocupado está cheio e muito separado (energia de “band-gap” grande) do próximo nível que o elétron poderia ocupar. Isso torna impossível movimentar um elétron da banda ocupada, pela ação de um campo elétrico: Não há como lhe ceder um adicional de energia (cinética) para movimentá-lo. Já o caso do condutor na Fig.9.7 é diferente pois o último nível ocupado está na verdade semi-ocupado e assim é possível que qualquer elétron adquira um excedente de energia cinética (sob ação de um campo elétrico por exemplo) para se movimentar. A Fig.9.8 mostra a estrutura típica de um semicondutor como no caso do Ge. Neste caso o último nível ocupado está cheio como no caso de um isolante, mas a distância (“band-gap”) até o próximo nível superior disponível para receber um eletron é muito pequena: $E_g = 0.7$ eV e pode ser facilmente superado, inclusive sob ação da luz visível.

A Fig.9.9 ainda mostra o caso de um semi-metal como o Mg que deveria ser isolante mas

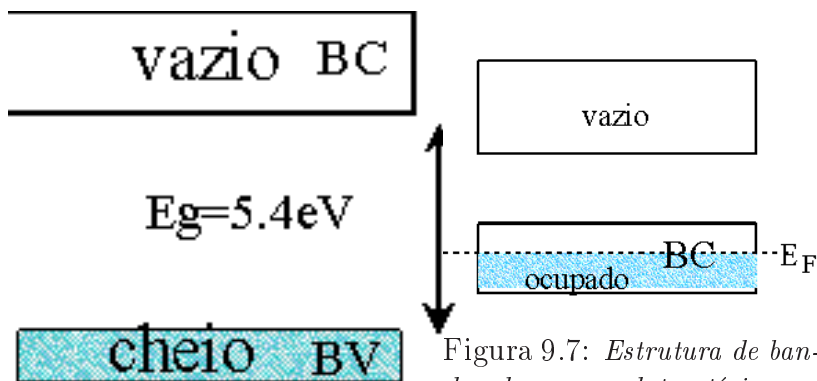


Figura 9.6: Estrutura de bandas de um isolante típico como o diamante, mostrando a banda de valência BV, a de condução (completamente vazia) e a banda proibida entre ambas.

Figura 9.7: Estrutura de bandas de um condutor típico como o cobre onde $E_F = 7\text{ eV}$, mostrando a BC parcialmente ocupada.

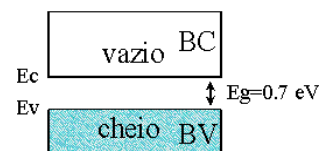


Figura 9.8: Estrutura de bandas de um semiconductor típico como o Ge onde $E_g = E_C - E_V = 0.7\text{ eV}$, onde E_C é o valor da energia na base da BC e E_V é a energia no topo da BV

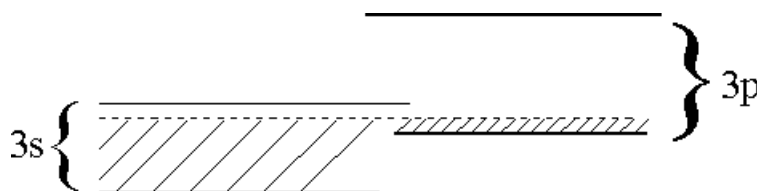


Figura 9.9: Estrutura de bandas de um semimetal como o Mg onde a banda superior (3p) se superpõe parcialmente à banda inferior (3s), fazendo com que ambas fiquem parcialmente ocupadas. Por isso o material apresenta um comportamento condutor apesar de ter 2 elétrons no nível 3s e por isso, o nível estando completo, deveria apresentar um comportamento típico de material isolante.

é condutor, devido à superposição das bandas 3s e 3p, como ilustrado na figura.

9.7 Energia de Fermi

Queremos estudar como se distribuem os níveis de energia dentro de uma banda parcialmente ocupada, o que caracteriza um condutor.

9.7.1 Densidade de estados quânticos

Vamos nos limitar aos elétrons da banda de condução onde eles estão fracamente ligados e por isso podem ser considerados praticamente livres. Assim esses elétrons livres podem ser considerados confinados num poço de potencial infinito cujas dimensões são as do próprio cristal. A energia de um elétron num poço de potencial infinito e largura L está dada pela Eq.(7.53)

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

Para o caso tridimensional (cubo de arestas $L \times L \times L$) podemos escrever

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (9.42)$$

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad (9.43)$$

Considerando que $L \gg h/\sqrt{m}$, a quantização da energia é muito pequena (como no caso de um oscilador mola-massa macroscópico) e nesse caso a expressão da energia E_n na Eq.(9.47) é praticamente uma função contínua, mesmo que consideremos só valores inteiros para n_x , n_y e n_z . Cada ponto (n_x, n_y, n_z) corresponde assim a um estado de energia E_n . Uma casca esférica de raio n é o lugar dos pontos que representam estados de energia E_n e dentro da esfera limitada por essa casca esférica estão inclusos os estados de energias menores que E_n . O número de estados com energia igual ou menor que E_n é proporcional ao volume dessa esfera. Como os números quânticos devem ser positivos, os números n só podem ser definidos no octante positivo. Assim o número de estados com energia igual ou menor que $E = E_n$ está dado por

$$N(E) = \frac{1}{8} 4\pi n^3 / 3 \quad (9.44)$$

$$\text{da Eq.(9.47): } n = \frac{2L}{h} \sqrt{2mE} \quad (9.45)$$

$$\Rightarrow N(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi L^3}{3h^3} m^{3/2} E^{3/2} \quad (9.46)$$

O número de estados com energia entre E e $E + dE$, por unidade de volume (L^3) e por unidade de energia (dE) chama-se de densidade de estados e vale

$$Z(E) = 2 \frac{1}{L^3} \frac{dN(E)}{dE} = \frac{3}{2} \sqrt{E} \frac{8\sqrt{2}\pi}{3h^3} m^{3/2} \times 2 = \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m^{3/2} \sqrt{E} \quad (9.47)$$

onde o fator “2” representa os dois estados de spin possíveis: $+1/2, -1/2$. Assim cabem 2 elétrons em cada estado de energia.

9.7.2 Distribuição de Fermi

A distribuição de energias num conjunto de partículas de spin $1/2$ como os elétrons e sua dependência com a temperatura está descrita pela distribuição de Fermi-Dirac $F(E)$ (vide Fig.9.12) que indica a probabilidade que o nível de energia E esteja ocupado por elétrons

$$F(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/k_B T}} \quad (9.48)$$

onde E_F é a chamada energia de Fermi.

- Se o nível E está totalmente ocupado por elétrons então $F(E)=1$, para $T = 0$.

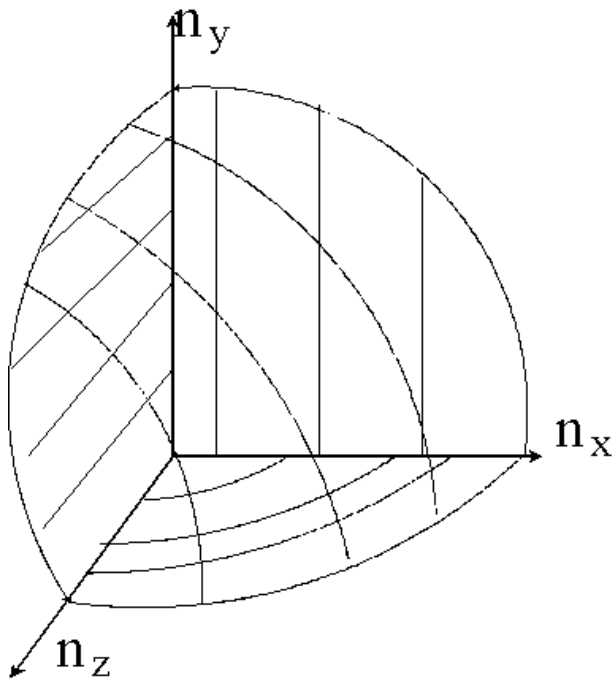


Figura 9.10: *Octante positivo do espaço (n_x, n_y, n_z) para o cálculo do número de estados de energia*

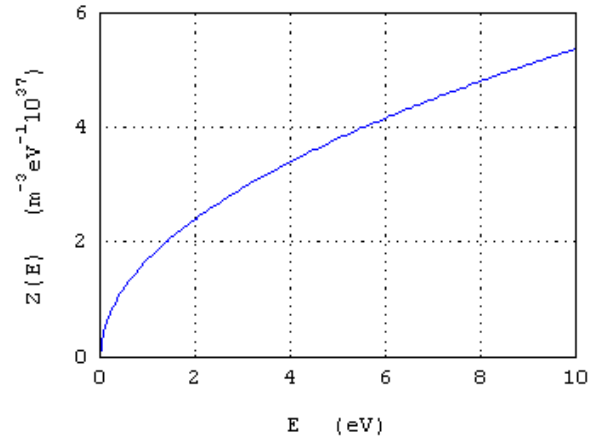


Figura 9.11: *Gráfico da Eq.(9.52)*

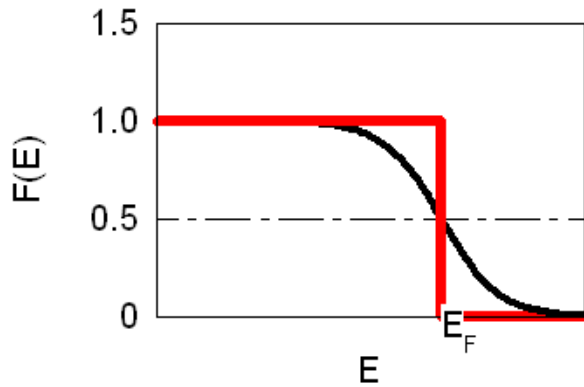


Figura 9.12: *Função $F(E)$ para $T = 0$ (curva vermelha) e para $T \gg 0$ (curva preta)*

- Se esse nível estiver vazio, então $F(E) = 0$ para $T = 0$.
- Para $E = E_F$, $F(E) = 1/2$, para qualquer $T > 0$.

Qual é a probabilidade de que um estado $0.1eV$ acima da energia de Fermi esteja ocupado para $T = 800K$?

$$F(E - E_F = 0.1eV) = \frac{1}{1 + e^{\frac{0.1 \times 1.6 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 800}}} = 0.19 \quad (9.49)$$

E qual a probabilidade de um estado $0.1V$ abaixo de E_F estar ocupado, nessa mesma temperatura?

$$F(E - E_F = -0.1eV) = \frac{1}{1 + e^{\frac{-0.1 \times 1.6 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 800}}} = 0.81 \quad (9.50)$$

Qual é a probabilidade de um estado $0.1V$ abaixo de E_F não estar ocupado? $\Rightarrow 1 - 0.81 = 0.19$, que é justamente a probabilidade de existirem buracos. O buraco é justamente um estado vazio numa faixa de energia em que a maioria dos estados está ocupada.

Das considerações acima fica claro que o nível dado pela energia de Fermi representa o nível preenchido pelos elétrons na banda de condução, para $T = 0$.

9.7.2.1 Cálculo de E_F

O número total de estados ocupados corresponde ao número total n de elétrons livres por unidade de volume na banda de condução

$$n = \int_0^{+\infty} Z(E)F(E)dE \quad (9.51)$$

$$\approx \int_0^{E_F} Z(E)dE \quad (9.52)$$

e substituindo $Z(E)$ pela sua expressão em Eq.(9.52) resulta

$$n = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m^{3/2} \frac{2}{3} E_F^{3/2} \quad (9.53)$$

$$\Rightarrow E_F = \left(\frac{3}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m} n^{2/3} \quad (9.54)$$

Exemplo: O número de elétrons livres (por unidade de volume) no cobre é igual ao número de átomos de cobre:

$$n = N_A d/A = \frac{6.02 \times 10^{23} (at/mol) 8900 Kg/m^3}{0.06357 Kg/mol} = 8.4 \times 10^{28} \text{elétrons}/m^3 \quad (9.55)$$

A energia de Fermi (Eq.(9.59)) para o cobre será então

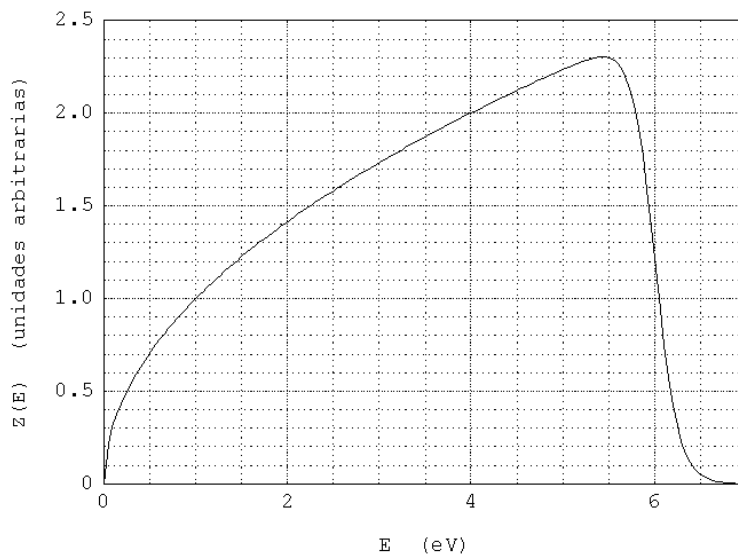
$$E_F = \left(\frac{3}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3} \frac{6.63^2 \times 10^{-68}}{9.11 \times 10^{-31}} (8.4 \times 10^{28})^{2/3} \frac{1}{1.6 \times 10^{-19}} = 7.0eV \quad (9.56)$$

que está de acordo com o valor indicado na literatura [?].

Exemplo: Energia de Fermi e largura de banda O sódio é um metal monovalente com densidade 1.013g/cm^3 e massa molar de 22.99g/mol .

1. Calcule sua energia de Fermi
2. Estime a largura de sua banda de condução no estado fundamental. Lembre que o *Na* está na primeira coluna da Tabela Periódica dos Elementos. Se ele estivesse na segunda coluna ele não seria, em princípio, um condutor por ter o nível atômico s^2 completo com dois elétrons.

Condutores



A figura ao lado representa a densidade de estados ocupados $Z(E)F(E)$ em função da energia, para $T > 0K$, sendo esta energia medida a partir da base da banda de condução (BC), num metal que, como no caso do Cu, libera 1 elétron por átomo para a BC; se em lugar de 1 fossem 2 elétrons por átomo, ele seria um isolante e não um condutor.

Calcule aproximadamente:

1. A energia de Fermi E_F
2. A largura da BC
3. A fração de elétrons na BC que estão acima da E_F nessa temperatura $T > 0K$. Você pode estimar as integrais graficamente, se auxiliando com os pequenos retângulos que formam o fundo da figura.
4. Qual seria a forma do gráfico para $T=0K$? Desenhe por cima da figura.

Poço de potencial e energia de Fermi

Considere um poço de potencial infinito onde colocamos 10 elétrons. Lembrando a regra de exclusão de Pauli (em cada estado não pode haver mais de um elétron com o mesmo número quântico de spin), calcule:

- O nível de Fermi
- A energia total desses elétrons

9.7.3 Semicondutor

Chamam-se intrínsecos os semicondutores puros e extrínsecos aqueles dopados com algum tipo de impureza.

9.7.3.1 Semicondutor intrínseco

Devido ao baixo valor da energia de separação (band gap E_g na Fig.9.8) entre a banda de valência (BV) e banda de condução, mesmo à temperatura ambiente, sempre temos alguns poucos elétrons na banda de condução (BC) e, conseqüentemente, o mesmo número de buracos deixados para trás na banda de valência (BV). Vamos calcular primeiro o número de elétrons livres na banda de condução, isto é, tomando como referência zero para a energia, o valor E_C do nível inferior da BC. Utilizando a integral na Eq.(9.56) e fazendo a aproximação

$$F(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} \approx e^{-\frac{E - E_F}{k_B T}} \quad \text{para } E - E_F \gg k_B T \quad (9.57)$$

escrevemos

$$n_i = \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_e^{3/2} \int_{E_C}^{+\infty} \sqrt{E - E_C} e^{-\frac{E - E_F}{k_B T}} dE \quad (9.58)$$

$$= \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_e^{3/2} e^{E_F/(k_B T)} \int_{E_C}^{+\infty} \sqrt{E - E_C} e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \quad (9.59)$$

$$= \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_e^{3/2} e^{\frac{E_F - E_C}{k_B T}} \int_0^{+\infty} \sqrt{E - E_C} e^{-\frac{E - E_C}{k_B T}} d(E - E_C) \quad (9.60)$$

Sabendo que

$$\int_0^{+\infty} \sqrt{x} e^{-ax} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (9.61)$$

a equação acima fica

$$n_i = \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_e^{3/2} e^{\frac{E_F - E_C}{k_B T}} \frac{k_B T}{2} \sqrt{\pi k_B T} \quad (9.62)$$

$$= N_C e^{\frac{E_F - E_C}{k_B T}} \quad N_C \equiv \frac{4\sqrt{2}\pi^{3/2} k_B^{3/2}}{h^3} m_e^{3/2} T^{3/2} \quad (9.63)$$

Para o caso de elétrons e $T = 300K$ podemos calcular

$$N_C \approx 2.51 \times 10^{25} \text{ m}^{-3} \quad (9.64)$$

$$n_i = 2.51 \times 10^{25} e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}} \text{ m}^{-3} \quad (9.65)$$

onde N_C é a "densidade de estados equivalente" calculada na base da BC e que foi suposta aproximadamente igual para o resto da BC. Procedendo similarmente para o número de buracos no topo da BV, e sabendo que para os buracos temos que substituir $F(E)$ por

$$1 - F(E) \approx e^{\frac{E - E_F}{k_B T}},$$

$$p_i = \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_h^{3/2} \int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} e^{\frac{E - E_F}{k_B T}} dE \quad (9.66)$$

$$= \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_h^{3/2} e^{-E_F/(k_B T)} \int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} e^{\frac{E}{k_B T}} dE \quad (9.67)$$

$$= \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_h^{3/2} e^{\frac{E_V - E_F}{k_B T}} \int_0^{+\infty} \sqrt{E_V - E} e^{-\frac{E_V - E}{k_B T}} d(E_V - E) \quad (9.68)$$

$$= N_V e^{\frac{E_V - E_F}{k_B T}} \quad N_V \equiv \frac{4\sqrt{2}\pi^{3/2} k_B^{3/2}}{h^3} m_h^{3/2} T^{3/2} \quad (9.69)$$

onde N_V é a densidade de estados no topo da BV, similarmente ao raciocínio acima para os elétrons.

Fazendo o produto das Eq.(9.68) e (9.74) achamos

$$n_i = p_i = \sqrt{np} = \frac{4\sqrt{2}\pi^{3/2} k_B^{3/2}}{h^3} \sqrt{m_h m_e}^{3/2} T^{3/2} e^{\frac{E_V - E_C}{2k_B T}} \quad (9.70)$$

Comparando Eq.(9.75) com (9.74) ou (9.68) e supondo $m_h \approx m_e$ chegamos ao resultado

$$\boxed{E_C - E_F \approx (E_C - E_V)/2 = E_g/2}$$

O que significa que o nível de Fermi está aproximadamente no meio do gap.

Exemplo Calcular o número de elétrons livres na BC e a condutividade, do Germânio puro à temperatura ambiente.

- Número de elétrons livres na BC:

– Vamos utilizar a Eq.(9.75) supondo

$$m_h \approx m_e \approx 9.11 \times 10^{-31} \text{Kg} \quad (9.71)$$

– e utilizando o valor [?]

$$E_g = 0.66 \text{eV} \quad \text{para } T = 300\text{K} \quad (9.72)$$

$$n_i \approx p_i \approx \frac{4\sqrt{2}\pi^{3/2} k_B^{3/2}}{h^3} \sqrt{m_h m_e}^{3/2} T^{3/2} e^{\frac{-0.33}{0.0255}} \approx 6 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$$

Note que num condutor metálico $n \approx 10^{28} \text{m}^{-3}$

- Condutividade: Sabendo que para o Ge [?]: $\mu_e = 0.39 \text{m}^2 \text{s}^{-1} \text{V}^{-1}$ e $\mu_h = 0.19 \text{m}^2 \text{s}^{-1} \text{V}^{-1}$ então:

$$\sigma = n_i e \mu_e + p_i e \mu_h \approx 6 \times 10^{19} 1.6 \times 10^{-19} (0.39 + 0.19) = 5.57 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$$

Para metais temos $\sigma \approx 10^7 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$

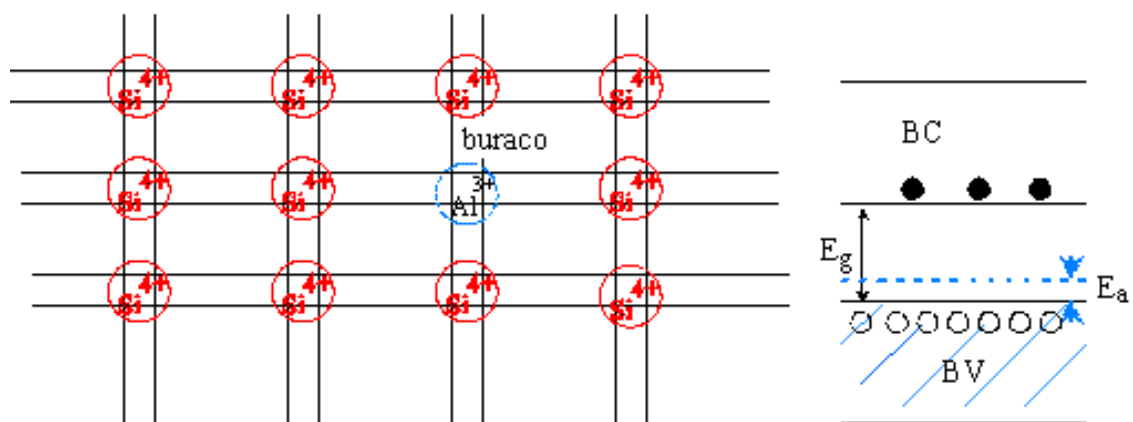


Figura 9.13: Representação de um semicondutor de Si tipo P, dopado com Al. Os centros aceitadores de elétrons (Al^{3+}) estão um pouco acima do nível da BV ($E_a \ll E_g$) e o resultado disso é um excesso de buracos na BV.

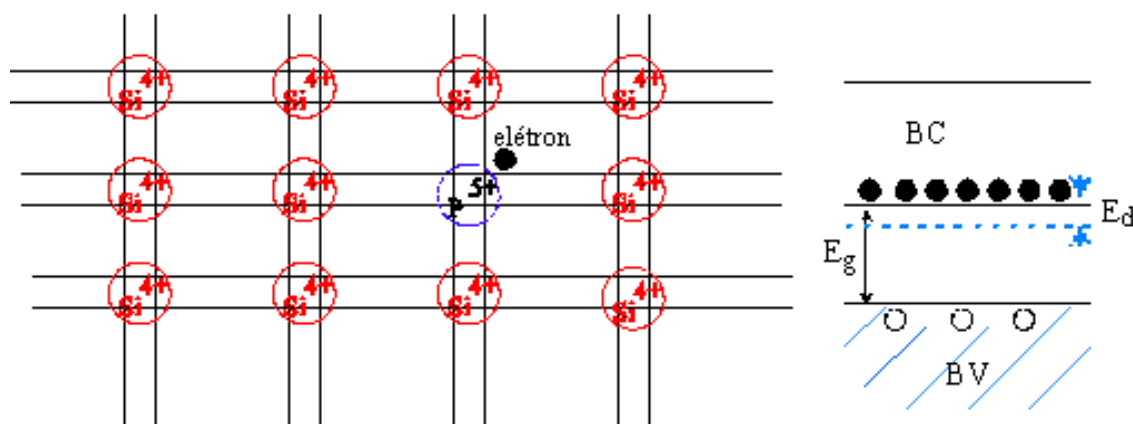


Figura 9.14: Representação de um semicondutor de Si tipo N, dopado com P. Os centros doadores de elétrons (P^{5+}) estão um pouco abaixo do nível da BC ($E_d \ll E_g$) e o resultado disso é um excesso de elétrons na BC.

9.7.3.2 Semicondutor dopado

Num material dopado, alguns átomos do semicondutor (p.ex. Si) na rede cristalina são substituídos por átomos com menor (p.ex. Al) ou com maior (p.ex. P) número de elétrons na camada de valência, como ilustrado nas Fig.9.13 e Fig.9.14, respectivamente. No caso da impureza de Al^{3+} por exemplo, aparece o defeito (buraco) de um elétron numa das ligações e isso faz com que apareçam buracos na BV, na mesma proporção dos átomos de Al^{3+} adicionados no cristal de Si. A energia para aceitar um elétron nesse defeito é $E_a \ll E_g$ e por isso os elétrons se movem facilmente de buraco em buraco. O resultado é como se os buracos se deslocassem pela BV. Uma situação similar mas inversa acontece para a impureza de P^{5+} onde um dos elétrons do P não entra nas ligações com os átomos vizinhos de Si e por isso fica muito fracamente ligado dando lugar a elétrons que passam facilmente à BC com uma energia $E_d \ll E_g$.

Exemplo Para o caso de Ge dopado com As na concentração de $N_D = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ e sabendo que a energia necessária para arrancar um elétron do As é de $E_C - E_d = 12.7 \text{ meV}$ [?], calcular, para a temperatura ambiente $T \approx 300 \text{ K}$:

- O nível de Fermi:

Podemos utilizar a Eq.(9.70) para descrever a densidade de elétrons livres na BC

$$n = N_c e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}} \quad (9.73)$$

onde $N_c = 2.51 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ para elétrons e para $T=300 \text{ K}$. Uma equação similar pode ser utilizada para descrever a densidade de doadores ionizados (N_D^+), isto é, que liberaram um elétron

$$N_D^+ = N_D e^{-\frac{E_F - E_d}{k_B T}} \quad (9.74)$$

onde $N_D = 5 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ é a densidade de defeitos (átomos de As). Vamos supor que o número de elétrons intrínsecos na BC é desprezível comparado com os (extrínsecos) liberados pelo doador. Nesse caso e para garantir a neutralidade elétrica deve ser $n = N_D^+$ e então temos

$$N_c e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}} = N_D e^{-\frac{E_F - E_d}{k_B T}} \quad (9.75)$$

$$E_C - E_F = \frac{E_C - E_d}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_c}{N_D} \quad (9.76)$$

A Eq.(9.81) mostra um resultado geral: que o nível de Fermi encontra-se no meio entre a BC e a energia do dopante (doador) a menos de uma correção dada pelo último termo da direita que representa a relação de densidade de estados entre a BC e o nível doador. Para o nosso caso concreto temos

$$E_C - E_F = \frac{0.0127}{2} + 0.0255/2 \ln \frac{2.51 \times 10^{25}}{5 \times 10^{22}} \quad (9.77)$$

$$E_C - E_F = \frac{E_C - E_d}{2} + 0.079 = 0.086 \text{ eV} \quad (9.78)$$

o que significa que o nível de Fermi está a 86 meV abaixo da BC e, conseqüentemente, por debaixo do nível E_d . Isso não é possível pois sendo $E_F - E_D < 0$, a Eq.(9.79) resulta em $N_D^+ > N_D$ o que é impossível. Nesse caso temos que reexaminar nossas hipóteses: já que os doadores poderiam estar acima do nível de Fermi, poderíamos então supor que estão todos ionizados, isto é que $N_D^+ \approx N_D$. Substituindo $N_D = n$ (neutralidade elétrica) na Eq.(9.78)

$$n = N_D = 5 \times 10^{22} = N_c e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}} \quad (9.79)$$

$$E_C - E_F = k_B T \ln(N_c/N_D) = 0.15 \text{ eV} \quad (9.80)$$

o que coloca E_F a 0.15 eV abaixo da BC. Precisamos ainda verificar a hipótese de que os elétrons na BC são amplamente extrínsecos com contribuição quase nula da excitação

intrínseca. Para isso calculamos a densidade de elétrons (n_i) gerada intrinsecamente e a comparamos com $n = N_D$:

$$n_i = N_c e^{-\frac{E_C - E_V}{2k_B T}} \quad (9.81)$$

$$n \approx N_D \quad (9.82)$$

$$n_i/n = \frac{N_c}{N_D} e^{-\frac{0.33}{k_B T}} \approx 1.2 \times 10^{-3} \quad (9.83)$$

o que verifica nossa hipótese.

- A condutividade:

Sabendo que para o Ge é $\mu_e = 0.39 m^2 s^{-1} V^{-1}$ [?]

$$\sigma = n e \mu_e \approx 5 \times 10^{22} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 0.39 = 3120 \Omega^{-1} m^{-1}$$

- A a probabilidade de que um estado na base da BC esteja ocupado, para os casos:

– o Ge dopado

$$F(E_C)_{\text{dop}} = \frac{1}{1 + e^{(E_C - E_F)/k_B T}} = \frac{1}{1 + e^{0.15/0.0255}} \approx 2.8 \times 10^{-3}$$

– o Ge puro

$$F(E_C)_{\text{puro}} = \frac{1}{1 + e^{(E_C - E_F)/k_B T}} = \frac{1}{1 + e^{0.33/0.0255}} \approx 2.4 \times 10^{-6}$$

- A probabilidade de que um doador não esteja ionizado

$$F(E_d) = \frac{1}{1 + e^{(E_d - E_F)/k_B T}} = \frac{1}{1 + e^{(0.138)/0.0255}} \approx 4.5 \times 10^{-3}$$

o que significa que praticamente todos os átomos de As estão ionizados e verifica nossa hipótese anterior de que $n = N_D^+ = N_D$.

9.7.4 Contatos ôhmicos e contatos retificantes

9.7.4.1 Contato metal-semicondutor

A Fig.9.15 mostra um esquema de um metal M com função de trabalho ϕ_M (a energia necessária para arrancar um elétron desde o nível de Fermi) e um semicondutor tipo N, com função de trabalho ϕ_S , sendo que $\phi_M > \phi_S$. Ao se colocar ambos em contato elétrico, elétrons fluem do semicondutor ao metal, deixando para trás uma zona (de depleção) com falta de elétrons (e carga positiva) no semicondutor. No lado do metal, devido à grande quantidade de elétrons livres nele, os elétrons que ingressam pela interface não podem penetrar no seu volume e apenas se depositam na interface: não há zona de depleção no metal. Essa distribuição de cargas cria uma barreira de potencial $\Delta V \approx \phi_M - \phi_S$ para levar assim o fluxo

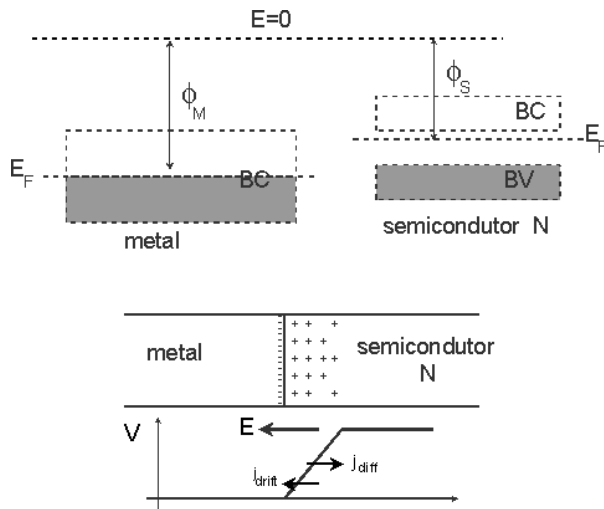


Figura 9.15: *Contato retificador metal-semicondutor tipo N: Neste caso a função de trabalho do metal ϕ_M é maior que a do semicondutor ϕ_S e por isso, ao se pôr ambos elementos em contato elétrico, os elétrons fluem inicialmente do semicondutor para o metal até formar uma barreira de potencial que compense a diferença de função de trabalho. No equilíbrio, a barreira de potencial faz com que $j_{diff} + j_{drift} = 0$*

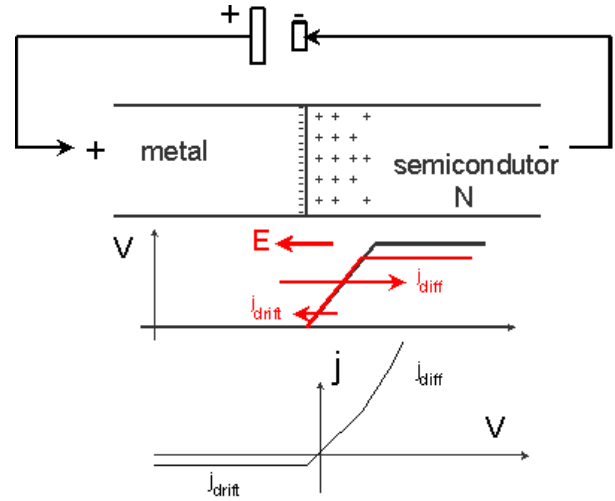


Figura 9.16: *Comportamento do contato retificador da Fig.9.15 sob ação de uma tensão elétrica: ao abaixar artificialmente o potencial da barreira (linha vermelha) e o campo líquido, usando uma bateria, por exemplo, $j_{diff} \gg j_{drift}$ e então aparece uma corrente líquida na direção de j_{diff} . Se a tensão aplicada for invertida, a barreira aumenta e assim $j_{diff} \ll j_{drift}$ sendo que nesse caso predomina uma corrente muito pequena na direção de j_{drift} .*

de elétrons ao equilíbrio, sendo que nesse ponto a corrente de difusão j_{diff} dos elétrons (que vêm do semicondutor tipo N) e a de arraste j_{drift} se equilibram. Esta última é a produzida no interior da zona da barreira de potencial, devido à geração térmica de pares elétron-buraco, que não depende do tamanho da barreira mas da temperatura e a natureza do semicondutor. Ao aplicar um potencial externo sobre o conjunto metal-semicondutor, como indicado na Fig.9.16, a barreira é modificada e, para valores positivos de V , j_{diff} aumenta muito sobre a j_{drift} . Para valores negativos de V , a barreira aumenta muito e por isso j_{diff} diminui de forma que o termo predominante é j_{drift} , que é constante e muito pequeno. Trata-se assim de um contato retificante. Se o semicondutor fosse do tipo “P”, a barreira se formaria na interface igualmente sem, no entanto, se formar uma zona de depleção no semicondutor. A barreira seria muito fina e por isso facilmente tunelável para a passagem dos elétrons de um lado para outro. Formar-se-ia assim um contato ôhmico e não retificante. O mesmo aconteceria para o caso da Fig.9.15 no caso em que ϕ_M fosse menor que ϕ_S . Neste caso os elétrons fluiriam do metal ao semicondutor mas, devido ao excesso de elétrons neste último, eles não formariam uma zona de depleção (carregada negativamente, neste caso). As cargas (positivas no metal e negativas no semicondutor) ficariam apenas numa região muito estreita na interface, para formar a barreira de potencial necessária para contrabalancear a diferença de funções de trabalho de ambos materiais, mas a espessura dessa barreira seria muito fina e assim, facilmente tunelável pelos elétrons. De novo teremos então um contato ôhmico. Com o mesmo raciocínio verifique que para o caso de um semicondutor tipo “P” e com $\phi_M < \phi_S$, teríamos um contato retificante simetricamente invertido em relação ao da Fig.9.16.

9.7.4.2 Diodo retificante

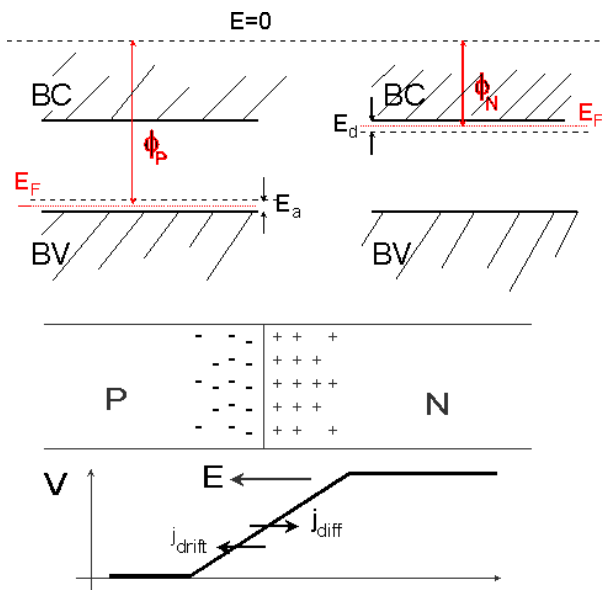


Figura 9.17: Contato retificante numa junção NP entre um semiconductor tipo-N de um lado e tipo-P do outro. Neste caso é necessariamente $\phi_P \gg \phi_N$ e por isso se forma uma zona de depleção e barreira de potencial como indicado, para que $j_{diff} + j_{drift} = 0$. Como no caso da Fig.9.15, ao baixar a barreira de potencial com auxílio de uma fonte externa, aparece uma forte corrente direta $j_{diff} \gg |j_{drift}|$; ao inverter a polaridade predomina a corrente reversa $|j_{drift}| \gg j_{diff}$ que é muito pequena.

Se colocamos em contato um semiconductor dopado “N” com o mesmo dopado “P”, teremos que $\phi_P > \phi_N$ e assim os elétrons vão fluir do tipo-N para o tipo-P criando uma zona de depleção (carregada positivamente no primeiro e negativamente neste último) como indicado na Fig.9.17, produzindo-se assim um contato retificante: Diodo retificante semiconductor.

9.7.4.3 Fotodiodos

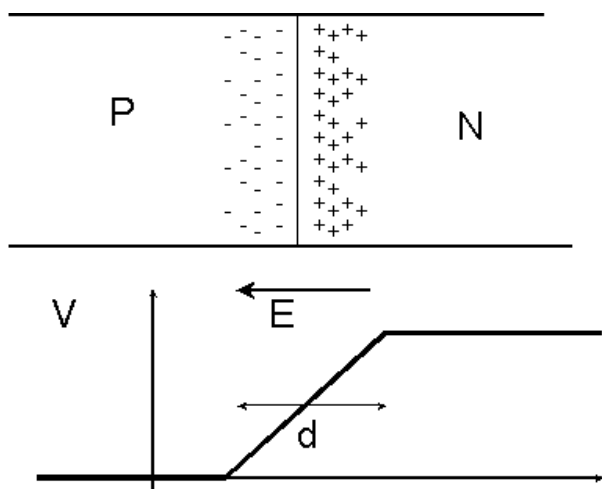


Figura 9.18: Fotodiodo tipo NP

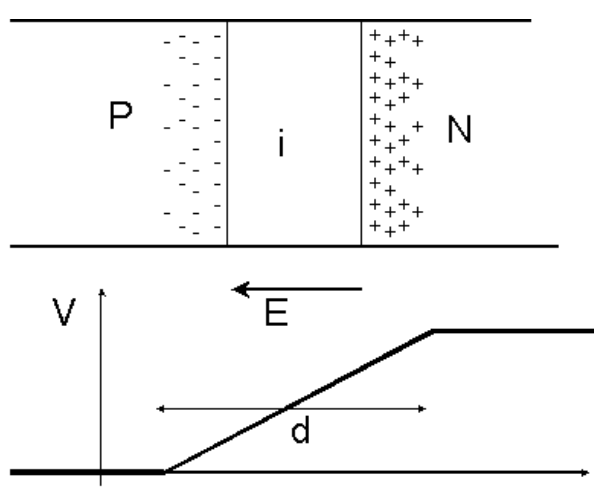


Figura 9.19: Fotodiodo tipo P-i-N

A Fig.9.18 mostra um diodo tipo “NP” utilizado como medidor de luz: os fótons caindo na região de depleção, na interface, produzem pares “elétron-buraco” que, sob ação do potencial imperante nessa região se separam, produzindo uma corrente elétrica que pode ser medida. Já os pares “elétron-buraco” gerados fora dessa região se recombinam facilmente e não geram corrente nenhuma. Se os materiais são fortemente dopados, a barreira de potencial é grande

mas a área (de depleção) útil na interface para detecção efetiva de fótons é estreita. Para aumentar a sensibilidade temos que aumentar essa área e isso é feito com os fotodetetores P-i-N ilustrados na Fig.9.19 onde há uma região de material intrínseco entre o tipo-P e tipo-N, que é a região útil para a detecção. Em ambos os casos, a equação que controla a densidade de corrente gerada no fotodiodo, no escuro, é a chamada equação de Shockley

$$j = j_s \left(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1 \right) \quad \text{onde} \quad j_s \propto T^2 e^{-\frac{\phi_P - \phi_N}{k_B T}} \quad (9.84)$$

$$\text{onde} \quad j_{\text{diff}} = j_s e^{\frac{eV}{k_B T}} \quad \text{e} \quad j_{\text{drift}} = j_s \quad (9.85)$$

9.7.4.4 Exemplo:

Para o caso de uma junção NP, a corrente $i_s = 5nA \propto j_s$. Neste caso, vamos verificar o comportamento retificante do dispositivo, calculando as correntes $i \propto j$ para a polarização direta e inversa onde $V = 0.5V$ e $V = -0.5V$ respectivamente na Eq.(9.89). Assim para a polarização direta temos

$$i = 5 \times 10^{-9} (e^{0.5/0.0255} - 1) = 0.6 \text{ Ampères} \quad (9.86)$$

e para a inversa:

$$i = 5 \times 10^{-9} (e^{-0.5/0.0255} - 1) = -5 \times 10^{-9} \text{ Ampères} \quad (9.87)$$

Ao incidir luz de irradiância I no fotodiodo, aparece um novo termo na Eq.(9.89), dado pela geração de pares elétron-buraco na região “intrínseca” e/ou na zona de depleção, ficando assim

$$j = j_s \left(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1 \right) - j_o \quad \text{onde} \quad j_o \propto I \quad (9.88)$$