

Cap. 3 – O Postulado de de Broglie – Propriedades ondulatórias das partículas.



Em sua tese de doutorado, apresentada à Faculdade de Ciência da Universidade de Paris, Louis de Broglie propôs a existência de ondas de matéria.

Qualquer partícula possui uma onda associada que governa o seu movimento, tal que:

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

Louis de Broglie em 1924

Comprimento de onda de de Broglie.

“Se a luz é uma onda, mas transfere energia e momento através dos fótons, porque que os elétrons ou qualquer partícula não podem se comportar como ondas?”

Cap. 3 – O Postulado de de Broglie – Propriedades ondulatórias das partículas.



O comprimento de onda de de Broglie:

1) Para uma bola de beisebol ($m = 0.5 \text{ kg}$) com $v = 10 \text{ m/s}$.



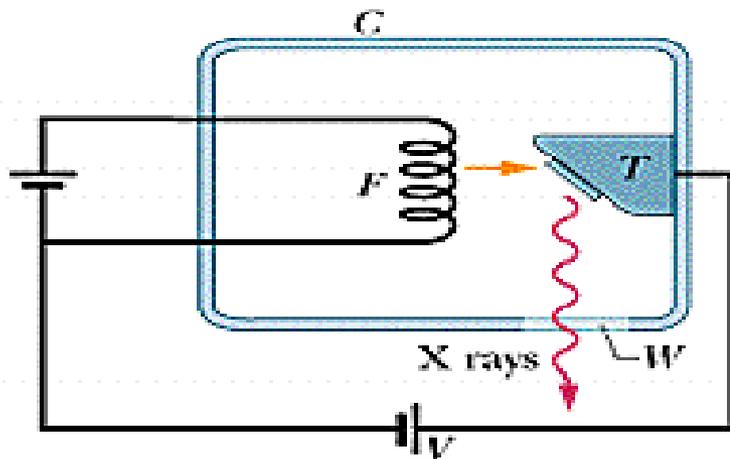
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{0,5 \times 10} = 3,3 \times 10^{-25} \text{ \AA}$$

Louis de Broglie em 1924

2) Para um elétron com energia cinética de 100 eV

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{(2,9,11 \times 10^{-31} \cdot 100 \cdot 1,60 \times 10^{-19})^{1/2}} = 1,2 \text{ \AA}$$

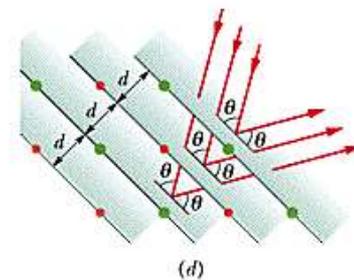
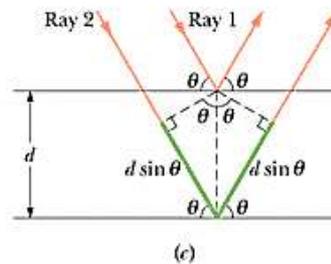
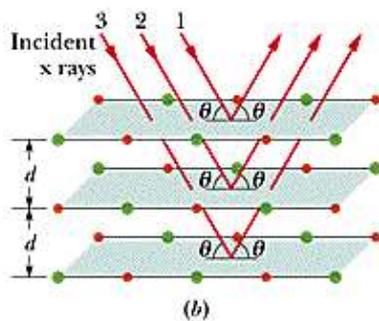
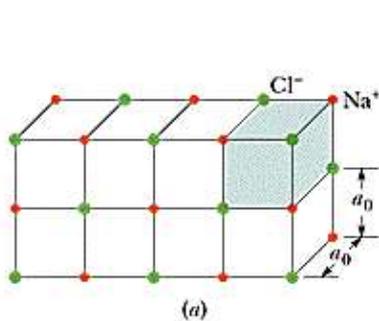
Difração de raios-x



$\lambda \sim 1$ Angstrom

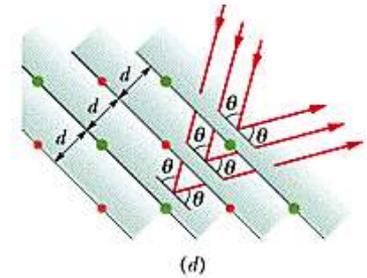
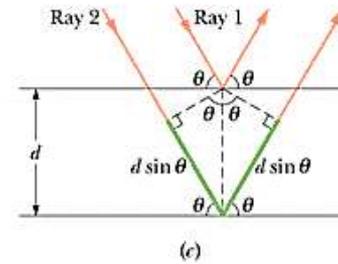
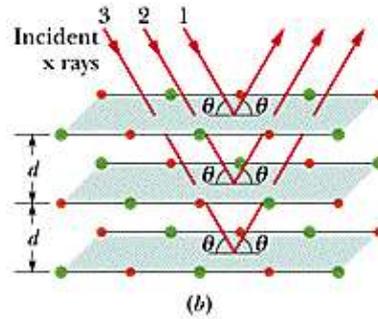
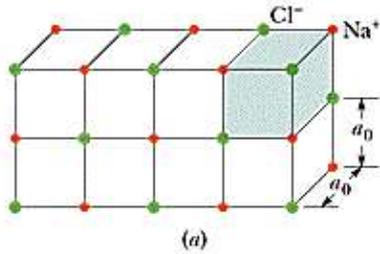
$$\theta = \sin^{-1} \frac{m\lambda}{d} = \sin^{-1} \frac{(1)(0.1 \text{ nm})}{3000 \text{ nm}} = 0.0019^\circ.$$

Diagrama esquemático de um tubo gerador de raios-X.

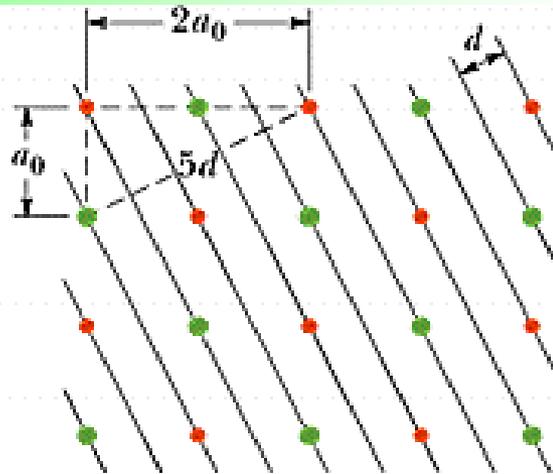


$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad \text{for } m = 1, 2, 3, \dots \text{ (Bragg's Law)} \quad (37-34)$$

Difração de raios-x



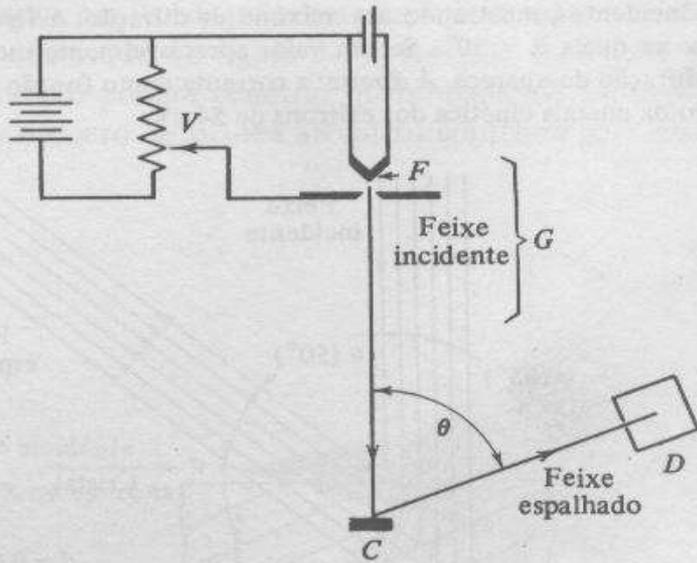
$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad \text{for } m = 1, 2, 3, \dots \text{ (Bragg's Law)} \quad (37-34)$$



$$5d = \sqrt{5}a_0,$$

$$d = \frac{a_0}{\sqrt{5}}$$

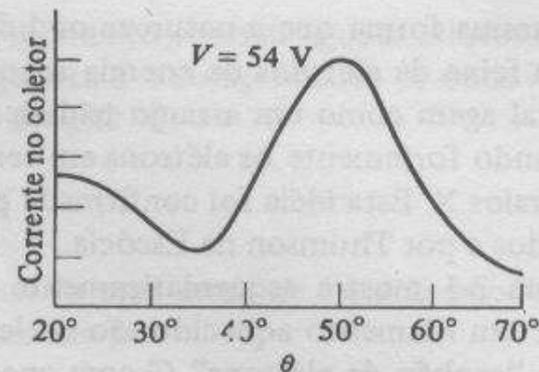
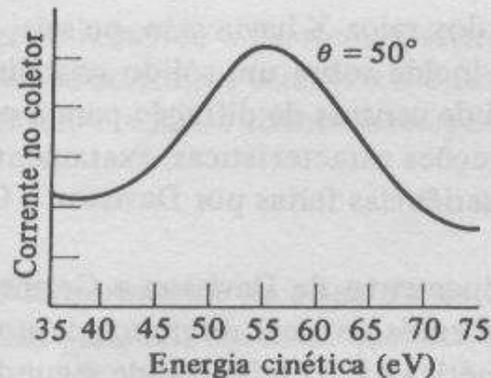
O Experimento de Davisson e Germer (1927)



Elétrons emitidos por um filamento aquecido são acelerados através de uma diferença de potencial e emergem de um canhão de elétrons com energia cinética eV .

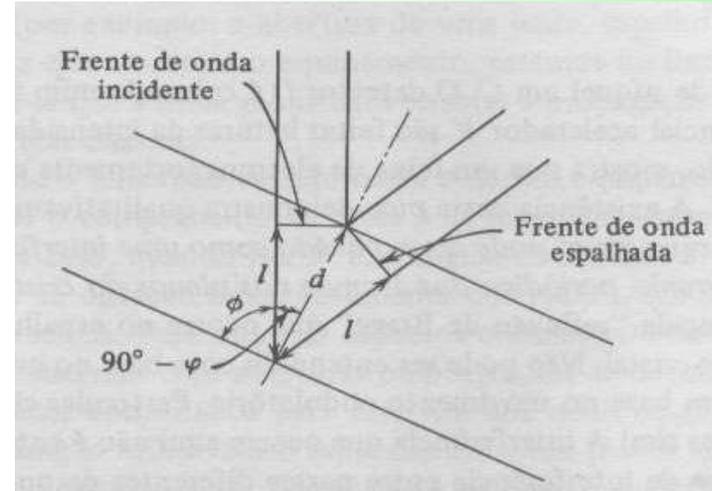
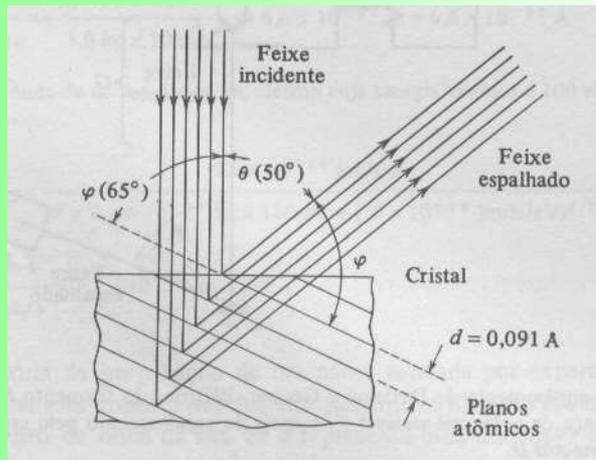
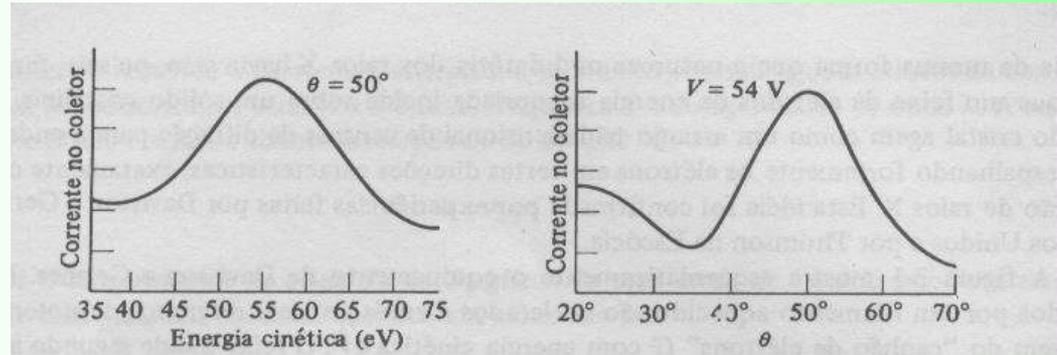
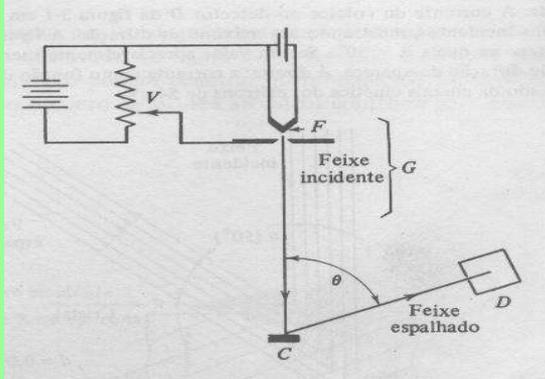
O feixe de elétrons incide segundo a normal sobre um monocristal de níquel.

O detector D é colocado em um ângulo particular θ e para vários valores de V são coletados a intensidade do feixe espalhado.



Um pico de difração análogo às reflexões de Bragg para raios-x ocorrem para certos valores de V e θ .

O Experimento de Davisson e Germer.



Para termos interferência construtiva:

$$\lambda = 2d \sin \phi = 2d \sin(90^\circ - 50^\circ / 2) = 2d \sin 65^\circ$$

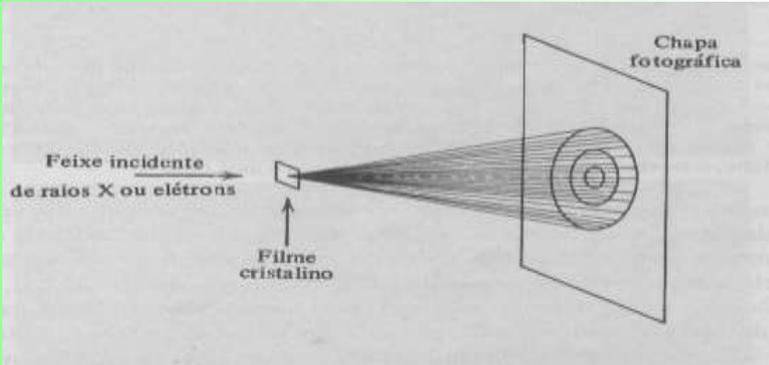
$$\lambda = 2 \times 0,91 \text{ \AA} \times \sin 65^\circ = 1,65 \text{ \AA}$$

Pelo postulado de de Broglie:

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

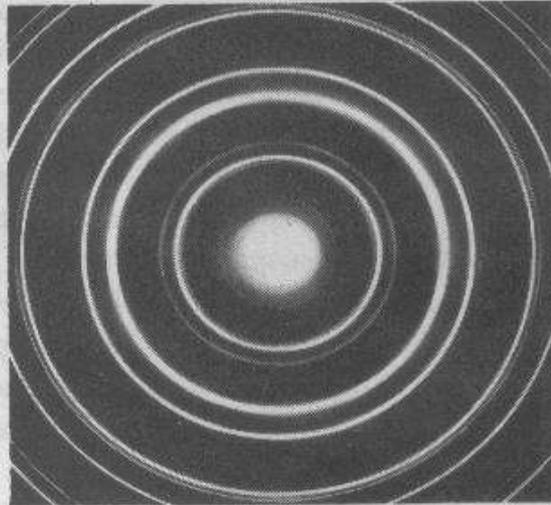
$$\lambda = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{(2,9,11 \times 10^{-31} \cdot 54 \cdot 1,60 \times 10^{-19})^{1/2}} = 1,65 \text{ \AA}$$

O Experimento de G. P. Thomson (1927)

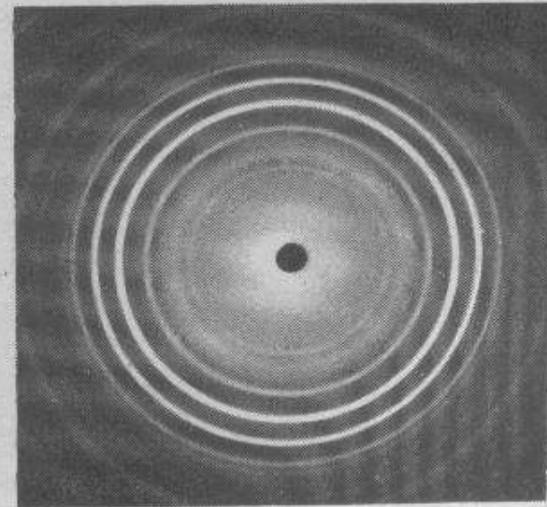


G. P. Thomson utilizou elétrons de alta energia para conseguir a contribuição de centenas de planos atômicos da na onda difratada.

G. P. Thomson mediu a difração de elétrons em filmes finos.



Difração de raios-x de policristais de óxido de zircônio.



Difração de elétrons por policristais de ouro.

J. J. Thomson (pai), em 1897, descobriu o elétron como uma partícula de razão q/m definida. Em 1927, G. P. Thomson (filho), descobriu experimentalmente a difração de elétrons que revela o comportamento ondulatório do elétrons.

Cap. 3 – O Postulado de de Broglie – Propriedades ondulatórias das partículas.

Posteriormente foram realizados experimentos de difração com feixes de nêutrons, feixes moleculares de hidrogênio e feixes atômicos de hélio.

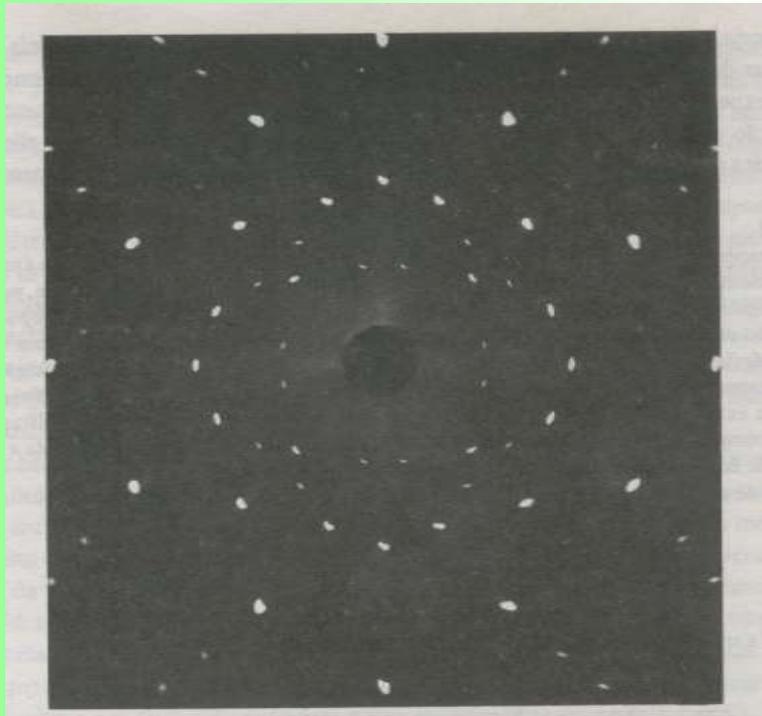


Figura de Laue de Difração de raios-x para um monocristal de cloreto de sódio.

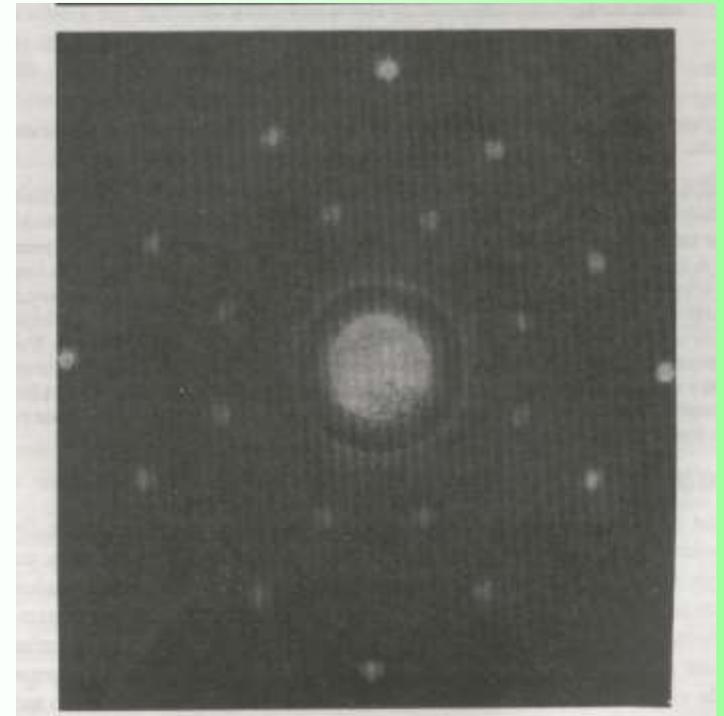


Figura de Laue de Difração de nêutrons para um monocristal de cloreto de sódio.

Função de onda de matéria

Onda luminosa : $E_0 \text{sen}(kx - \omega t)$

$$I = \left(\frac{1}{\mu_0 c}\right) E^2 = N h \nu$$

Onde N é um número médio que reflete a probabilidade de que um fóton atravessasse uma unidade de área em uma unidade de tempo.

Onda de matéria : $\Psi = \psi_0 \text{sen}(kx - \omega t)$

A probabilidade (por unidade de tempo) de que uma partícula seja detectada em um pequeno volume com centro em um dado ponto em um dado t é proporcional ao valor de ψ_0^2 .

Vamos explorar os detalhes desta função de onda de matéria no quadro.

Interpretação probabilística da Mecânica Quântica

$$\text{Onda de matéria : } \Psi = \psi_0 \text{sen}(kx - \omega t)$$

Max Born introduziu a interpretação física para a função de onda $\Psi(x,t)$:

$$dP(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 dx$$

é a probabilidade de se encontrar a partícula descrita por $\Psi(x,t)$ no instante t entre x e $x+dx$.

Em três dimensões:

$$dP(x,y,z,t) = |\Psi(x,y,z,t)|^2 dx dy dz$$

é a probabilidade de se encontrar a partícula descrita por $\Psi(x,t)$ no instante t no volume $dx dy dz$.

Nesse caso:

$$|\Psi(x,y,z,t)|^2$$

tem dimensão de $1/V$ (densidade de probabilidade).

Interpretação probabilística da Mecânica Quântica

Como veremos, a função de onda $\Psi(x,t)$ satisfaz o princípio da superposição:

$$\Psi(x,t) = \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)$$

é uma solução válida quando $\Psi_1(x,t)$ e $\Psi_2(x,t)$ são soluções válidas de uma equação diferencial linear.

Sendo $\Psi_1(x,t)$ e $\Psi_2(x,t)$ as “ondas de matéria” difratada pelas fendas 1 e 2 em um experimento de fenda dupla:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)|^2 = |\Psi_1(x,t)|^2 + |\Psi_2(x,t)|^2 + 2\Psi_1^*(x,t)\Psi_2(x,t)$$

o termo $2\Psi_1^*(x,t)\Psi_2(x,t)$ é o termo de interferência.

Sendo $\Psi_1(x,t) = \Psi_2(x,t) = A$ em um determinado ponto do anteparo:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 + |A|^2 + 2A^*A = 4|A|^2$$

maior probabilidade de se encontrar um elétron.

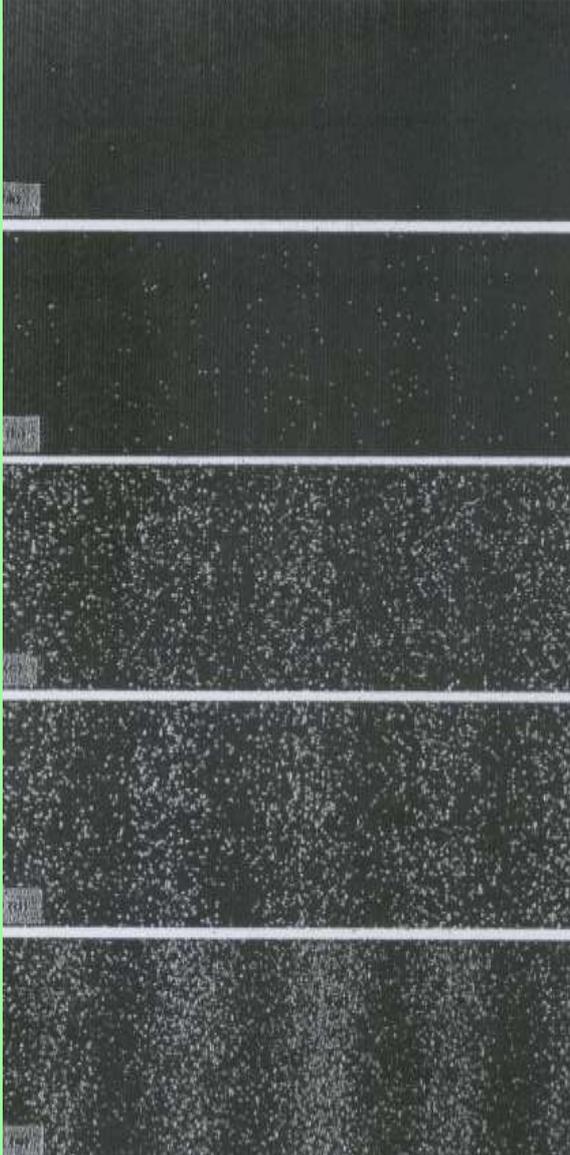
No entanto, se $\Psi_1(x,t) = -\Psi_2(x,t) = -A$

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 + |A|^2 - 2A^*A = 0$$

nenhuma probabilidade de se encontrar um elétron.

Interpretação probabilística da Mecânica Quântica

Uma ilustração clara da interpretação probabilística de $\Psi(x,t)$ é dada por uma análise dos experimentos de Tonomura et al. (1989):



Quando o número de elétrons N no experimento vai aumentando (painéis inferiores da figura) o padrão de interferência vai se formando, onde as regiões claras e escuras representam, respectivamente, pontos do anteparo com maior e menor probabilidade de se detectar um elétron.

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 + |A|^2 + 2A^*A = 4|A|^2$$

maior probabilidade de se encontrar um elétron.

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 + |A|^2 - 2A^*A = 0$$

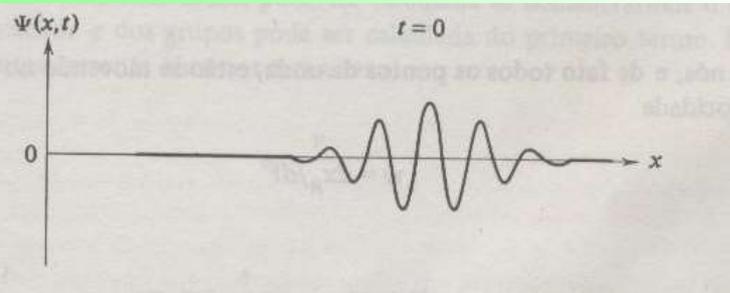
menor probabilidade de se encontrar um elétron.

Ondas de de Broglie: velocidade de fase e velocidade de grupo

Nós discutimos no quadro que para a onda de de Broglie de uma partícula:

$$\lambda v \neq v(\text{vel. da partícula})$$
$$\lambda v = \frac{E}{p} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1/2mv^2}{mv} = \frac{v}{2} \text{ caso não - relativístico} \\ \frac{\gamma mc^2}{\gamma mv} = \frac{c^2}{v} \text{ caso relativístico} \end{array} \right\}$$

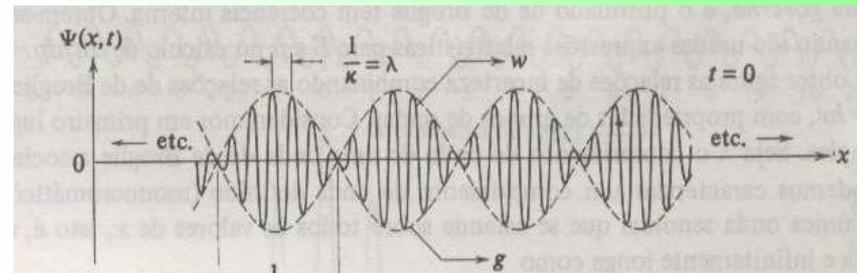
Isso é porque o produto λv ou ω/k nos dá a velocidade de fase da onda. Nós vimos que uma partícula material está associada com uma superposição de ondas com várias freqüências de tal forma que onda total seja localizada espacialmente (pacote de ondas). O pacote irá se mover com uma velocidade que não é igual a velocidade de fase, e que é chamada de velocidade de grupo.



pacote de ondas

Nós mostramos, usando a superposição de duas ondas de números de ondas ligeiramente diferentes, que:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$



Pacotes de ondas e o princípio da Incerteza

Nós discutimos no quadro que o princípio da incerteza decorre matematicamente das propriedades gerais de um pacote de ondas. Usando séries de Fourier, escrevemos:

$$\psi(x) = \int_0^{\infty} [a(k) \cos(kx) + b(k) \text{sen}(kx)] dk$$

onde

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \text{ é convergent e}$$

Para um pacote em particular, onde $b(k) = 0$, e $a(k) = 1$ somente para $k \in [k_0 - \Delta k/2, k_0 + \Delta k/2]$ e $a(k) = 0$ do contrário, temos:

$$\psi(x) = \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \cos(kx) dk = \frac{1}{x} \left[\text{sen}\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right) - \text{sen}\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right) \right]$$

e assim:

$$\psi(x) = \frac{2}{x} \text{sen}\left(\frac{\Delta k x}{2}\right) \cos(k_0 x) = M(x) \cos k_0 x$$

onde $M(x)$ é o envelope da função periódica $\cos(k_0 x)$.

Do comportamento de $M(x) \sim \text{sen}x/x$, usando como tamanho do pacote a largura do seu pico central, encontramos:

$$\frac{\Delta k}{2} \Delta x \cong 2\pi \Rightarrow \Delta k \cdot \Delta x \cong 4\pi$$

Um análise mais rigorosa mostra que, de maneira geral:

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

Pacotes de ondas e o princípio da Incerteza

Nós discutimos no quadro que o princípio da incerteza decorre matematicamente das propriedades gerais de um pacote de ondas. Usando séries de Fourier, escrevemos:

$$\psi(x) = \int_0^{\infty} [a(k) \cos(kx) + b(k) \text{sen}(kx)] dk$$

onde

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \text{ é convergent e}$$

Para um pacote em particular, onde $b(k) = 0$, e $a(k) = 1$ somente para $k \in [k_0 - \Delta k/2, k_0 + \Delta k/2]$ e $a(k) = 0$ do contrário, temos:

$$\psi(x) = \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \cos(kx) dk = \frac{1}{x} \left[\text{sen}\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)x - \text{sen}\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)x \right]$$

e assim:

$$\psi(x) = \frac{2}{x} \text{sen}\left(\frac{\Delta k x}{2}\right) \cos(k_0 x) = M(x) \cos k_0 x$$

onde $M(x)$ é o envelope da função periódica $\cos(k_0 x)$.

Do comportamento de $M(x) \sim \text{sen}x/x$, usando como tamanho do pacote a largura do seu pico central, encontramos:

$$\frac{\Delta k}{2} \Delta x \cong 2\pi \Rightarrow \Delta k \cdot \Delta x \cong 4\pi$$

Um análise mais rigorosa mostra que, de maneira geral:

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

O Princípio de Incerteza de Heisenberg



A partir da relação de incerteza obtida para um pacote de onda e do postulado de de Broglie podemos escrever:

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

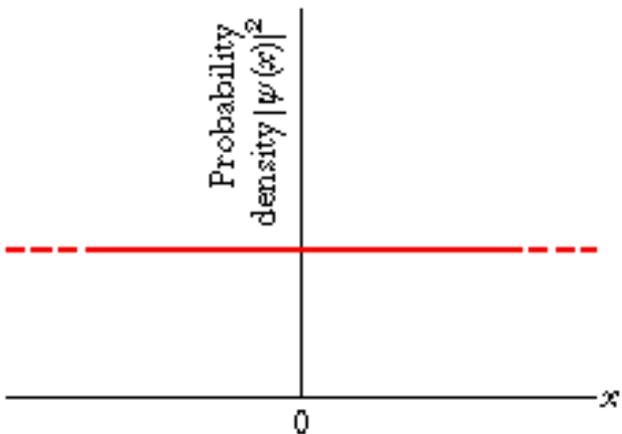
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} p = \frac{p}{\hbar}$$

logo:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta x \frac{\Delta p}{\hbar} \geq \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

O alemão Werner Heisenberg em 1927.

Probability density $|\psi(x)|^2$



Não se pode determinar simultaneamente, com precisão absoluta, a velocidade e a posição de uma partícula.

Não considerada a incerteza no momento, a posição se torna totalmente indefinida.

Pacotes de ondas e o princípio da Incerteza

De forma similar, nós mostramos que a partir de séries de Fourier para um função de t :

$$F(t) = \int_0^{\infty} [a(\omega) \cos(\omega t) + b(\omega) \text{sen}(\omega t)] d\omega \quad \text{onde}$$

Seguindo uma dedução similar a anterior, temos:

$$\Delta t \Delta \omega \geq \frac{1}{2} \quad \text{o que, a partir do postulado de de Broglie, leva a:}$$

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

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

Fisicamente, esta relação acopla a incerteza da medida da energia com o intervalo de tempo característico da taxa de variação temporal das propriedades da partícula.

Ou seja, se a energia da partícula é conhecida com precisão ilimitada, a propriedades das partículas não evoluirão no tempo ($\Delta t = \infty$).

O microscópio de Bohr: O processo de medida e o princípio da incerteza

Este experimento mental proposto por Bohr ilustra a interferência do processo de medida na tentativa de se determinar uma propriedade da partícula.

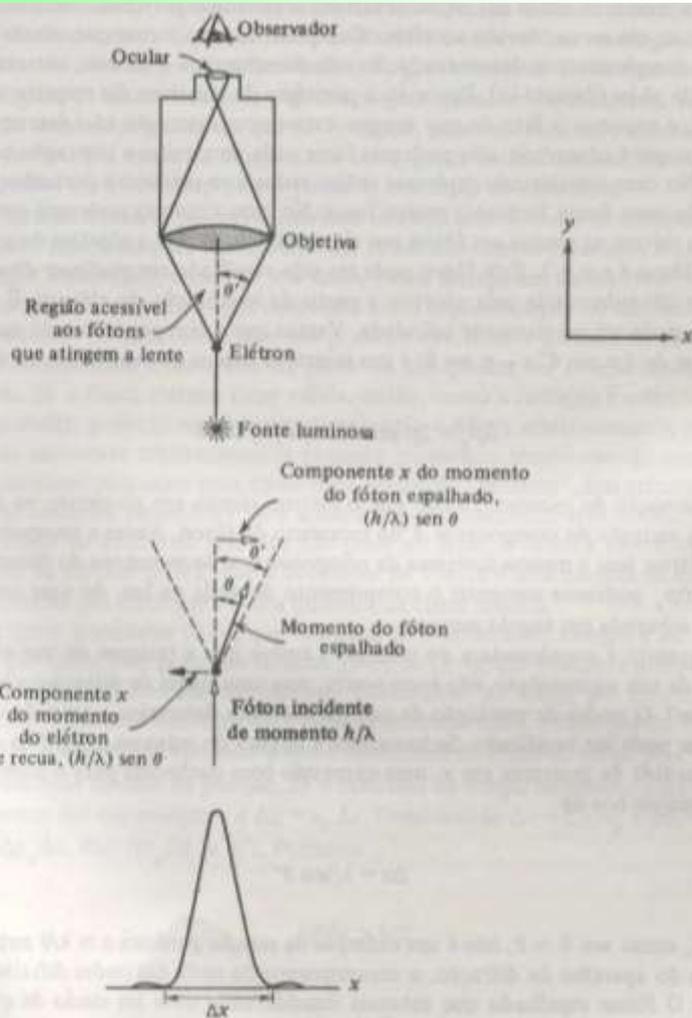


FIGURA 3-6. A experiência imaginária do microscópio de Bohr. *Ao alto*: O equipamento. *No meio*: O espalhamento de um fóton pelo elétron. *Embaixo*: A figura de difração da imagem do elétron vista pelo observador.

Ao se “iluminar” um elétron com um fóton, o fóton é espalhado pelo elétron pelo efeito Compton. Para que os fótons sejam coletados pela objetiva:

$$\Delta p_{x_f} = 2 p \sin \theta' = \frac{2h}{\lambda} \sin \theta'$$

A incerteza do momento do elétron é igual, em módulo, a variação do momento do fóton.

A incerteza da posição do elétron é dada pelo limite de resolução do microscópio.

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

Assim:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{2h}{\lambda} \frac{\lambda}{\sin \theta'} = 2h > \frac{\hbar}{2}$$

A dualidade partícula e o princípio da complementaridade de Bohr:

Uma das peculiaridades da Mecânica Quântica quanto a dualidade onda-partícula é que as propriedades ondulatórias e corpusculares dos entes físicos não podem ser observadas simultaneamente.

A esse fato Bohr deu o nome de princípio da complementaridade, pois são duas naturezas distintas dos entes físicos que se complementam, mas não se apresentam simultaneamente.

Por exemplo, se em um experimento de fenda dupla com elétrons pretendemos determinar a trajetória do elétron como partícula:

Devemos “iluminar” uma fenda com um fóton tal que:

$\lambda_f \ll d$ onde d é a distância entre as fendas.

Mas nesse caso o momento do fóton transferido ao elétron perturba tanto a trajetória do elétron que destrói o padrão de interferência. Mas se:

$\lambda_f \gg d$

O fóton não perturba tanto o elétron, mas continuamos sem saber por qual fenda “o elétron passou” e a figura de interferência permanece.

