

## Capítulo 5

# Mecânica Quântica

Neste capítulo, introduzimos os problemas e as primeiras idéias inovadoras que conduziram aos primórdios da Física Quântica, e permitiram seu posterior desenvolvimento formal.

### 5.1 Modelo de Planck

Em 1900, Max Planck encontrou a solução para o problema da catástrofe do ultra-violeta da radiação térmica. Para isso, Planck propôs a hipótese de que a energia  $\epsilon$  da radiação emitida pelos átomos oscilantes era dada de forma *discretizada* (*quantizada*) em pacotes de energia, os *fótons*, que dependem da frequência  $\nu$  da onda eletromagnética:

$$\epsilon = \epsilon_n(\nu) = nh\nu \quad (5.1)$$

onde  $n$  é um número inteiro, e  $h = 6 \times 10^{-34}$  J.s é a chamada constante de Planck, uma nova constante universal da natureza, que terá grande importância na Física Quântica.

Com esta hipótese, não vale mais o resultado de que a energia média de cada oscilador é  $k_B T$ , já que este resultado foi obtido no espaço de fase contínuo, assumindo que a energia podia ter qualquer valor. Precisamos então, recalculá-la essa energia média.

Como agora temos energia discretas, vamos retomar as expressões para valores médios da distribuição canônica, usando somatórios ao invés de integrais. Temos

$$\bar{\epsilon}(\nu) = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \epsilon_n(\nu) e^{-\beta \epsilon_n(\nu)}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta \epsilon_n(\nu)}} = \frac{h\nu \sum_{n=1}^{\infty} n e^{-n\beta h\nu}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\beta h\nu}} \quad (5.2)$$

Usando  $x = \beta h\nu$ , temos

$$\sum_{n=1}^{\infty} n e^{-n\beta h\nu} = \sum_{n=1}^{\infty} n e^{-nx} = -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} \quad (5.3)$$

e portanto

$$\bar{\epsilon}(\nu) = -h\nu \frac{\frac{\partial}{\partial x} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} = -h\nu \frac{1}{S} \frac{\partial S}{\partial x}, \quad S = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} \quad (5.4)$$

Precisamos calcular o somatório  $S$ :

$$\begin{aligned} S &= 1 + e^{-x} + (e^{-x})^2 + \dots \\ \rightarrow e^{-x} S &= e^{-x} + (e^{-x})^2 + \dots \end{aligned}$$

Subtraindo um resultado do outro:

$$\begin{aligned} S - e^{-x}S &= 1 \\ \rightarrow S &= \frac{1}{1 - e^{-x}} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Portanto

$$\bar{\epsilon}(\nu) = -h\nu \frac{1}{S} \frac{\partial S}{\partial x} = -h\nu(1 - e^{-x}) \frac{-e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} = h\nu \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{h\nu}{e^x - 1} \quad (5.6)$$

ou finalmente,

$$\bar{\epsilon}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (5.7)$$

Essa é a energia média que deve entrar na densidade de energia da radiação, ou seja:

$$u(\nu)d\nu = \bar{\epsilon}(\nu) \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (5.8)$$

$$= \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} d\nu \quad (5.9)$$

ou

$$\boxed{u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu} \quad (\text{Radiação Térmica Quântica}) \quad (5.10)$$

Definindo

$$\eta = h\nu/k_B T, \quad (5.11)$$

de forma que  $\nu = (k_B T/h)\eta$  e  $h\nu^3 = \eta^3 k_B^3 T^3/h^2$  e  $d\nu = (k_B T/h)d\eta$ , temos

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^\eta - 1} = \frac{8\pi k_B^4 T^4}{h^3 c^3} \frac{\eta^3}{e^\eta - 1} \quad (5.12)$$

e definimos

$$u^*(\eta)d\eta = \frac{h^3 c^3}{8\pi k_B^4 T^4} u(\nu)d\nu = \frac{\eta^3}{e^\eta - 1} d\eta \quad (5.13)$$

Lembre que no caso clássico, tínhamos

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi k_B T \nu^2}{c^3} d\nu = \frac{8\pi k_B^4 T^4}{h^3 c^3} \eta^2 d\eta \quad (5.14)$$

e, portanto,

$$u^*(\eta)d\eta = \frac{h^3 c^3}{8\pi k_B^4 T^4} u(\nu)d\nu = \eta^2 d\eta \quad (5.15)$$

Na Fig. 5.1, mostramos a distribuição de radiação térmica *quântica* e a *clássica*. Note que a versão *quântica* elimina a catástrofe do ultra-violeta, e concorda perfeitamente com as observações. Inicialmente não se compreendeu a razão da hipótese inicial de Planck para a quantização da energia dos osciladores. O próprio Planck não gostava deste argumento, e acreditava que era apenas um artifício matemático para chegar à resposta correta. Eventualmente, com o desenvolvimento da Mecânica Quântica, ficou claro que essa quantização era fenômeno recorrente e inerente a sistemas quânticos.

O nascimento da física quântica se deu, portanto, com a quantização da luz, que até então era tida como uma onda eletromagnética. Esse fenômeno mostrou que a luz também tem características corpusculares, i.e. pode se comportar como pacotes de energia, que nada lembram ondas senoidais.

O espectro de radiação térmica aparece em vários sistemas físicos, e.g. o espectro da radiação solar. Curiosamente, o espectro de corpo negro mais perfeito que se conhece na natureza é o da radiação cósmica de fundo (RCF), que foi liberada 300.000 anos após o Big Bang, e pode ser detectada hoje em todas as direções do Universo. Esse espectro corresponde a uma radiação com  $T = 3K$  com pico na região de microondas, e é umas das observações mais importantes em Cosmologia. A detecção desta radiação em 1964 deu a Penzias e Wilson o prêmio Nobel de Física em 1978. Essa medida indicou que, de fato, o Universo foi muito quente no passado e, ao se esfriar, essa radiação se desacoplou da matéria. A detecção de flutuações de temperatura da ordem de uma parte em  $10^{-5}$  nesta radiação, feita em 1992 pelo satélite COBE, deu a Smoot e Mather o prêmio Nobel em 2006. Este feito iniciou a era da cosmologia de precisão.

### 5.1.1 Lei de Deslocamento de Wien

Como  $u(\eta)$  tem um pico sempre em  $\eta_{\max} = \text{const} \approx 2.8$ , temos que

$$\eta_{\max} = \beta h \nu_{\max} = \frac{h \nu_{\max}}{k_B T} = \text{const} \rightarrow \boxed{\frac{\nu_{\max}}{T} = \text{const}} \quad (5.16)$$

Portanto,

$$\frac{\nu_{\max,1}}{T_1} = \frac{\nu_{\max,2}}{T_2} \quad (5.17)$$

Ou seja, a posição do pico  $\nu_{\max}$  é proporcional à temperatura  $T$ . Podemos calcular a posição do pico mais explicitamente, derivando  $u(\nu)$ :

$$\frac{du(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi h}{c^3} \left( \frac{3\nu^2}{e^{\beta h \nu} - 1} - \frac{\beta h \nu^3 e^{\beta h \nu}}{(e^{\beta h \nu} - 1)^2} \right) = 0 \quad \rightarrow \quad 3 = \frac{\beta h \nu_{\max} e^{\beta h \nu_{\max}}}{e^{\beta h \nu_{\max}} - 1} \quad (5.18)$$

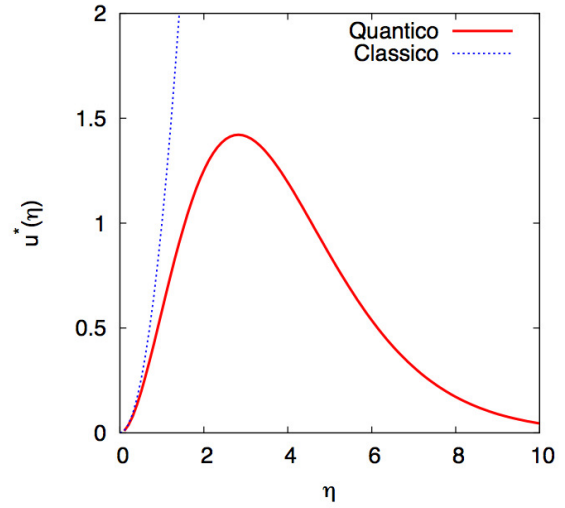


Figura 5.1: Distribuição de energia normalizada  $u^*(\eta) = u(\nu)(h^3 c^3 / 8\pi k_B^4 T^4)$  da radiação de corpo negro em função da frequência normalizada  $\eta = h\nu/k_B T$ , no caso clássico e quântico.

Esta condição pode ser expressa como:

$$3e^{\beta h\nu_{\max}} - 3 = \beta h\nu_{\max} e^{\beta h\nu} \quad \rightarrow \quad 3 - 3e^{-\beta h\nu_{\max}} = \beta h\nu_{\max}$$

ou

$$\rightarrow e^{-\eta_{\max}} = 1 - \frac{\eta_{\max}}{3}, \quad \text{onde } \eta_{\max} = \beta h\nu_{\max}. \quad (5.19)$$

A solução desta equação dá

$$\eta_{\max} \approx 2.82 \quad \rightarrow \quad \frac{\nu_{\max}}{T} = \frac{\eta_{\max} k_B}{h} = 5.88 \times 10^{10} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1} \quad (5.20)$$

### 5.1.2 Lei de Stefan-Boltzmann

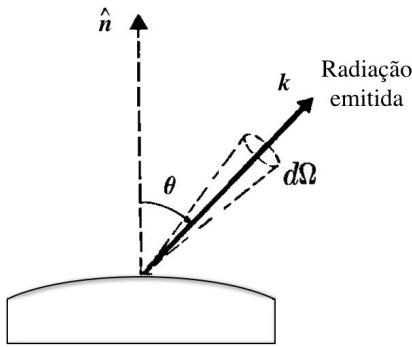


Figura 5.2: Emissão de radiação pela superfície de um corpo negro ideal. A radiação é emitida com vetor de onda  $\hat{k}$  fazendo um ângulo  $\theta$  com a normal ao corpo negro, em um ângulo sólido  $d\Omega$ . (Reif)

Considere a radiação emitida por um corpo negro, com vetor de onda na direção  $\hat{k}$  fazendo ângulo  $\theta$  com a normal  $\hat{n}$  ao corpo e dentro de um ângulo sólido  $d\Omega$ .

Pelas Eqs. 4.100 e 4.101, o número de estados neste ângulo sólido é (agora sem integrar em  $d\Omega$ ):

$$\begin{aligned} \Omega_{\vec{k}} d^3k &= \frac{V}{\pi^3} d^3k \\ \Omega_k dk d\Omega &= \frac{V}{\pi^3} \frac{d\Omega}{8} k^2 dk = \frac{V d\Omega}{8\pi^3} k^2 dk \\ \Omega_\nu d\nu d\Omega &= \frac{V d\Omega}{8\pi^3} \left( \frac{2\pi\nu}{c} \right)^2 \frac{2\pi d\nu}{c} = \frac{V}{c^3} \nu^2 d\nu d\Omega \end{aligned}$$

e a densidade de energia da radiação nesta direção fica

$$u(\nu) d\nu d\Omega = \frac{2h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu d\Omega \quad (5.21)$$

A intensidade da radiação (energia emitida por unidade de tempo por unidade de área do corpo negro, ou fluxo de energia) na frequência  $\nu$  e ângulo sólido  $d\Omega$  fica então:

$$I(\nu) d\nu d\Omega = [\vec{S}(\nu, \hat{k}) \cdot \hat{n}] d\nu d\Omega \quad (5.22)$$

$$= u(\nu) c \cos \theta d\nu d\Omega \quad (5.23)$$

Integrando em todas as direções, temos

$$I(\nu) d\nu = u(\nu) c d\nu \int \cos \theta d\Omega \quad (5.24)$$

e como

$$\int \cos \theta d\Omega = \int_0^\pi d\phi \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta = 2\pi \int_0^1 u du = 2\pi \frac{1}{2} = \pi \quad (5.25)$$

temos

$$\begin{aligned} I(\nu)d\nu &= \pi u(\nu)c d\nu \\ \rightarrow I(\nu)d\nu &= \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu \end{aligned} \quad (5.26)$$

E a intensidade total em todas as frequências fica

$$I = \int I(\nu)d\nu = \int \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu \quad (5.27)$$

Mudando  $x = \beta h\nu$ , i.e.  $\nu = x/h\beta$  e  $d\nu = dx/h\beta$ , temos

$$I = \int \frac{2\pi h(x/h\beta)^3}{c^2} \frac{1}{e^x - 1} \frac{dx}{h\beta} \quad (5.28)$$

$$= \frac{2\pi}{c^2 h^3 \beta^4} \int \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (5.29)$$

Como

$$\int \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} \quad (5.30)$$

temos

$$I = \frac{2\pi k_B^4 T^4}{c^2 h^3} \frac{\pi^4}{15} = \left( \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} \right) T^4$$

$$\boxed{I = \sigma T^4} \quad (5.31)$$

onde

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} = 5.67 \times 10^{-8} \text{ Kg s}^{-3} \text{K}^{-4} \quad (\text{Constante de Stefan-Boltzmann}) \quad (5.32)$$

## 5.2 Efeito Fotoelétrico

Em 1905, Einstein propôs a mesma quantização da energia da radiação eletromagnética para explicar o chamado efeito fotoelétrico. Por esse feito, Einstein ganharia o prêmio Nobel em 1921.

No efeito fotoelétrico, luz de intensidade  $I$  e frequência  $\nu$  incide em uma superfície metálica E, interagindo com elétrons dos átomos da superfície. Os elétrons podem ser ejetados da superfície emissora E e coletados na superfície coletora C.

Fechamos um circuito em E e C, e estabelecemos uma diferença de potencial  $\Delta V$  variável entre E e C, com uma fonte variável, de forma a direcionar os elétrons de E a C e estabelecer uma corrente  $i$  no circuito.

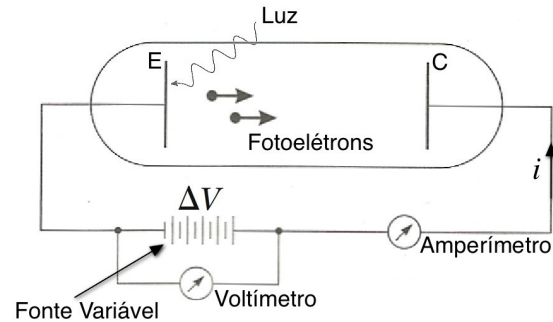


Figura 5.3: Efeito Fotoelétrico. Radiação de intensidade  $I$  e frequência  $\nu$  incide sobre placa de metal E liberando elétrons, coletados na placa C e fazendo uma corrente  $i$ . O potencial de aceleração  $\Delta V$  pode ser invertido para frear os fotoelétrons e fazer  $i = 0$  quando  $\Delta V = -V_F$ . (Nussenzveig)

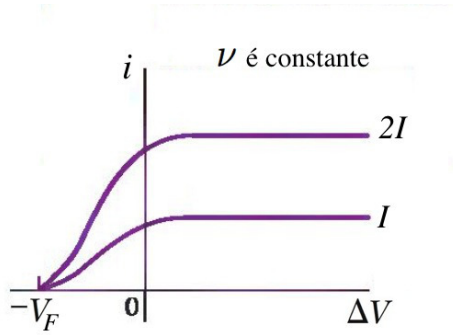


Figura 5.4: Corrente  $i$  em função do potencial de aceleração  $\Delta V$  no efeito fotoelétrico. O valor de saturação de  $i$  depende da intensidade  $I$  da luz. Quando  $i = 0$  quando  $\Delta V = -V_F$ , e esse potencial de freamento não depende da intensidade da luz. (Young)

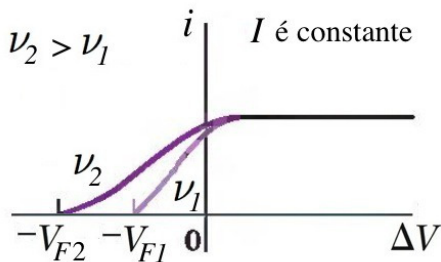


Figura 5.5: Corrente  $i$  em função do potencial de aceleração  $\Delta V$  no efeito fotoelétrico para radiações de mesma intensidade  $I$  e valores diferentes de frequência  $\nu$ . Vemos que  $V_F$  depende de  $\nu$ . (Young)

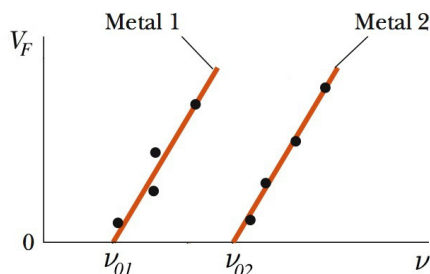


Figura 5.6: Potencial de freamento  $V_F$  em função da frequência  $\nu$  da radiação para dois metais de materiais diferentes. (Serway)

Empiricamente, uma série de fatos são observados em um experimento como esse. A Fig. 5.4 mostra a corrente do circuito  $i$  em função do potencial  $\Delta V$  para luzes de intensidades  $I_1$  e  $I_2 = 2I_1$  e mesma frequência  $\nu_1 = \nu_2$ . Para  $\Delta V$  muito grande, todos os elétrons liberados dos átomos em E são direcionados a C, e obtém-se uma corrente máxima de saturação. Já quando  $\Delta V$  fica menor, a corrente observada diminui. Mudando o sinal de  $\Delta V$ , o potencial passa a *frear* os elétrons no caminho de E a C, e para um valor  $\Delta V = -V_F$  (potencial de freamento), os elétrons são todos freados (inclusive os mais energéticos) e a corrente observada é nula ( $i = 0$ ). Observa-se que utilizando uma radiação de intensidade diferente, apenas o valor da corrente de saturação muda, mas o valor de  $V_F$  permanece o mesmo.

Por outro lado, utilizando radiações de frequência diferente, e.g.  $\nu_2 > \nu_1$  mas mesma intensidade  $I_1 = I_2$ , como mostrado na Fig. 5.5, observa-se que a corrente de saturação é a mesma, enquanto o valor de  $V_F$  muda com a frequência e  $V_{F2} > V_{F1}$ , i.e.  $V_F$  diminui com  $\nu$ . Existe um valor mínimo que  $\nu$  deve ter, para que exista corrente não-nula. Este valor mínimo é definido como  $\nu_0$  tal que  $V_F = 0$ . Para radiação com  $\nu < \nu_0$ ,  $i = 0$ , mesmo se a intensidade da radiação for muito alta (infinita).

Podemos então fazer o gráfico de  $V_F$  em função de  $\nu$  para 2 diferentes materiais da superfície metálica, como na Fig. 5.6. Nota-se que  $V_F$  muda linearmente com a frequência, e também depende do tipo de material da superfície. Os valores mínimos de frequência  $\nu_{0,1}$  e  $\nu_{0,2}$  também dependem do material.

Podemos tentar entender esses fatos com o balanço energético de um elétron assim que ele sae de E (momento 1), e assim que ele chega em C (momento 2):

$$\begin{aligned}
E_1 &= E_2 \\
K_1 + U_1 &= K_2 + U_2 \\
\rightarrow K_1 &= K_2 - (U_2 - U_1)
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Mas a diferença de energia potencial do elétron é simplesmente  $U_2 - U_1 = -e\Delta V$ , portanto

$$K_1 = K_2 - e\Delta V \tag{5.34}$$

Vamos agora considerar a situação limite em que o elétron tem energia cinética máxima em 1 (i.e. velocidade totalmente horizontal), ou seja  $K_1 = K_{max}$ . Vamos supor também que o elétron chega em  $C$  com energia cinética nula, i.e.  $K_2 = 0$ . Como o elétron mais energético acaba não chegando em  $C$ , nenhum outro elétron chega, e portanto  $i = 0$ , ou seja  $\Delta V = -V_F$ . Assim temos

$$K_{max} = eV_F \tag{5.35}$$

Por outro lado, a energia da radiação  $E_{rad}$  é usada para i) liberar o elétron do átomo e ii) dar essa energia cinética  $K_{max}$  ao elétron. A energia necessária para quebrar a ligação do elétron ao átomo é denotada  $W$  e chama-se *função trabalho*. Portanto, temos  $E_{rad} = W + K_{max}$ , ou seja

$$K_{max} = E_{rad} - W \tag{5.36}$$

Combinando essas equações, temos:

$$eV_F = E_{rad} - W \tag{5.37}$$

Podemos então confrontar as expectativas baseadas na teoria clássica da radiação, com o que se observa de fato:

Classicamente, como  $E_{rad}$  cresce com  $I$ , espera-se que  $V_F$  também cresça com  $I$ . Além disso, como  $E_{rad}$  depende apenas de  $I$ , mudando a frequência  $\nu$ , nada deveria ocorrer com  $V_F$ . Ademais, qualquer que fosse a frequência, aumentando  $I$ , eventualmente  $E_{rad} > W$  e haveria corrente.

Entretanto, como vimos, o que se observa é que  $V_F$  não depende de  $I$  e depende de  $\nu$ . E existe um valor mínimo  $\nu_0$  tal que, para haver corrente, é preciso que  $\nu > \nu_0$ .

Para explicar os fatos observados, Einstein retomou a hipótese de Planck da quantização da radiação, supondo que ela é formada por fótons, i.e. pacotes de luz. A energia de cada fóton da radiação é dada por

$$E_{rad} = h\nu \tag{5.38}$$

e uma radiação com maior intensidade tem maior número de fótons.

Assim, a equação fica

$$eV_F = h\nu - W \tag{5.39}$$

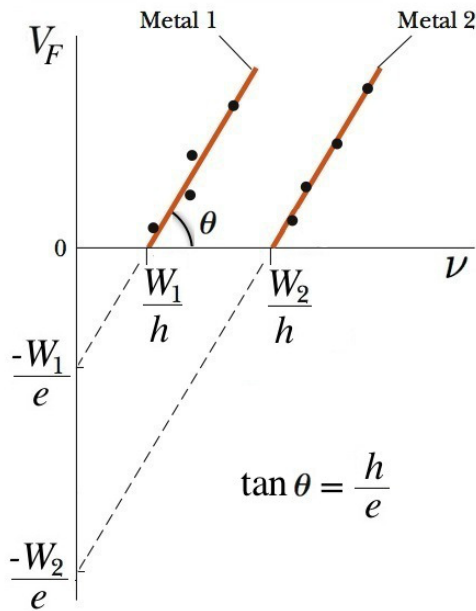


Figura 5.7: Potencial de freamento  $V_F$  em função da frequência  $\nu$  da radiação para dois metais de materiais diferentes. (Serway)

Esta equação explica todos os fatos observados. Primeiramente, aumentando a intensidade, estamos aumentando o número de fótons da radiação, e portanto mais elétrons serão libertados dos átomos da superfície e farão parte da corrente de saturação, que aumenta. Entretanto, a energia de cada foton individual não muda, e a condição para o elétron parar continua a mesma, i.e.  $V_F$  é o mesmo.

A equação indica ainda que  $V_F$  cresce linearmente com  $\nu$ . E para que haja corrente,  $V_F > 0$ , o que implica  $h\nu > W$ , ou seja é preciso que  $\nu > \nu_0 = W/h$ . Cada elétron precisa ganhar energia suficiente do fóton para sair do material. Não adianta mandar muitos fótons poucos energéticos, pois somente um fóton interage com o elétron de cada vez.

Temos que

$$V_F = \left(\frac{h}{e}\right)\nu - \left(\frac{W}{e}\right) \quad (5.40)$$

Portanto, medindo  $V_F$  em função de  $\nu$ , temos que a inclinação do gráfico é  $\tan\theta = h/e$ , i.e. pode ser usada para medir a constante de Planck.

Por outro lado, a interseção com o eixo x ocorre em  $V_F = 0$ , i.e. em  $\nu_0 = W/h$ , e pode ser usada para medir a função trabalho  $W$  do material. Além disso, a projeção da reta ocorre em  $V_F = -W/e$  e também dá a função trabalho.

### 5.3 Átomo de Bohr

Em 1913, Bohr propôs um modelo para o átomo de Hidrogênio que explicava porque os átomos emitiam e absorviam radiação de forma quantizada, i.e. por fótons.

O modelo de Bohr tinha os seguintes postulados:

1) O elétron no átomo permanece em órbitas estacionárias com energia  $E$ , e nessas órbitas, não emite radiação.

2) O átomo so irradia, i.e. o elétron emite radiação quando transita de uma órbita com energia  $E_i$  para outra órbita menos energética com energia  $E_f < E_i$ , emitindo um fóton de energia  $E_\gamma = h\nu = E_i - E_f$ . O elétron também pode absorver um fóton de energia  $E_\gamma = h\nu$  indo de  $E_i$  para  $E_f$ , tal que  $h\nu = E_f - E_i$ .

4) As órbitas estacionárias possíveis são determinadas pela quantização do momento angular do elétron, que deve satisfazer:

$$L = mvr = n\frac{h}{2\pi}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.41)$$

onde  $h$  é a constante de Planck. Lembre-se que  $h$  de fato tem unidade de momento angular. Com esse modelo, podemos calcular as orbitas possíveis do eletron, bem como as energias nessas orbitas, como faremos a seguir. Bohr também ganharia o prêmio Nobel em 1922 por esse modelo atômico.



### 5.3.1 Órbitas

Vemos acima que também  $v$  e  $r$  dependem do inteiro  $n$ , e portanto denotamos  $v_n$  e  $r_n$  para as órbitas possíveis. Temos

$$mv_nr_n = n\frac{h}{2\pi} \quad \rightarrow \quad v_n = \frac{nh}{2\pi mr_n} \quad (5.42)$$

Classicamente, o elétron sofre a Força de Coulomb da atração com o próton, que também deve ser a força centrípeta da órbita:

$$F_{\text{Coul}} = F_{\text{cent}} \quad (5.43)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{mv_n^2}{r_n} \quad (5.44)$$

Usando a equação, temos

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{m}{r_n} \left( \frac{nh}{2\pi mr_n} \right)^2 \quad (5.45)$$

da qual podemos extrair  $r_n$ :

$$\boxed{r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m e^2}} \quad \text{Raios orbitais} \quad (5.46)$$

O primeiro nível energético  $n = 1$ , define o raio de Bohr  $a_0 = r_1$ :

$$\boxed{a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 5.29 \times 10^{-11} \text{m}} \quad (\text{Raio de Bohr}) \quad (5.47)$$

Em termos do raio de Bohr, temos

$$r_n = n^2 a_0 \quad (5.48)$$

Substituindo esta equação nos níveis da velocidade, temos

$$\boxed{v_n = \frac{e^2}{\epsilon_0 2n h}} \quad (5.49)$$

### 5.3.2 Energias

O elétron tem energia cinética e potencial enquanto se move ao redor do núcleo. Estas também serão quantizadas devido às quantizações de  $v_n$  e  $r_n$ :

$$K_n = \frac{1}{2} m v_n^2 = \frac{1}{2} m \left( \frac{e^2}{\epsilon_0 2n h} \right)^2 \rightarrow K_n = \frac{m e^4}{8 n^2 h^2 \epsilon_0^2} \quad (\text{Cinética}) \quad (5.50)$$

$$U_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{\pi m e^2}{\epsilon_0 n^2 h^2} \right) \rightarrow U_n = -\frac{m e^4}{4 n^2 h^2 \epsilon_0^2} \quad (\text{Potencial}) \quad (5.51)$$

Portanto, a energia total fica

$$E_n = K_n + U_n \quad \rightarrow \quad \boxed{E_n = -\frac{me^4}{8n^2h^2\epsilon_0^2}} \quad \text{Níveis Energéticos} \quad (5.52)$$

Podemos então calcular a diferença de energia entre estados energéticos  $n = i$  e  $n = j$ :

$$\Delta E_{ij} = E_i - E_j = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^2} \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right) \quad (5.53)$$

Como essa energia deve corresponder à energia do fóton emitido/absorvida, temos  $\Delta E_{ij} = h\nu = hc/\lambda$  e portanto, podemos obter os possíveis comprimentos de onda dos fótons emitidos/absorvidos:

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &= \frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^2} \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right) \\ \rightarrow \frac{1}{\lambda_{ij}} &= \frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^3c} \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right) \end{aligned} \quad (5.54)$$

Definimos a constante de Rydberg:

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^3c} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (5.55)$$

em termos da qual, temos

$$\rightarrow \frac{1}{\lambda_{ij}} = R \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right) \quad (5.56)$$

## 5.4 Efeito Compton

Em 1923, Compton usou novamente a quantização da luz para explicar a mudança no comprimento de onda de raios X ao serem espalhados por elétrons *livres* em grafita. Compton ganharia o prêmio Nobel em 1927 por esse estudo.

Nesta época, a relatividade especial já havia se desenvolvido, segunda a qual a energia de uma partícula é dada por

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2 \quad (5.57)$$

onde  $m$  é a massa e  $p$  é o momento. Para uma partícula parada  $p = 0$  e a energia é simplesmente a energia de repouso dada pela fórmula de Einstein  $E = mc^2$ . Para a radiação (fótons),  $m_\gamma = 0$  e portanto  $E_\gamma = p_\gamma c$ . Assumindo a energia de fótons dada por  $E_\gamma = h\nu$ , temos  $p_\gamma c = h\nu$  e o momento do fóton fica  $p_\gamma = h\nu/c$  ou ainda

$$p_\gamma = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{fóton}) \quad (5.58)$$

Considere a Fig. 5.8, onde o efeito Compton é ilustrado. Um fóton de comprimento de onda  $\lambda_0$  e momento  $p_{\gamma 0}$  colide com um elétron inicialmente em repouso. Após a colisão, ambos se espalham fazendo ângulos  $\theta$  e  $\phi$  com a direção de colisão original.

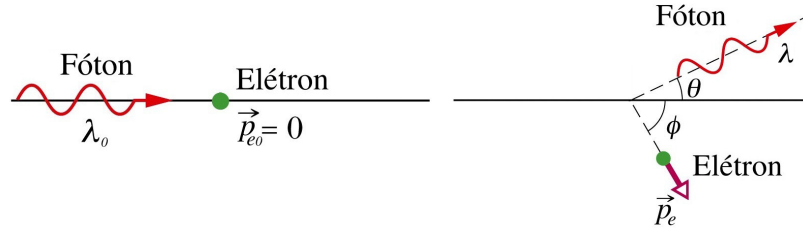


Figura 5.8: Efeito Compton. Um fóton de comprimento de onda  $\lambda_0$  se espalha ao colidir com um elétron, transmitindo a este parte de sua energia e passando a ter um comprimento de onda  $\lambda$ . (Halliday)

Vamos primeiro assumir que o elétron está livre, o que é aproximadamente válido para os elétrons em camadas superficiais do átomo. Usamos então as leis de conservação para o sistema isolado fóton-elétron:

Conservação do momento (direção vertical):

$$\begin{aligned}
 0 &= p_\gamma \sin \theta - p_e \sin \phi \\
 0 &= \frac{E_\gamma}{c} \sin \theta - p_e \sin \phi \\
 \rightarrow \sin \phi &= \frac{E_\gamma}{p_e c} \sin \theta
 \end{aligned} \tag{5.59}$$

Conservação do momento (direção horizontal):

$$\begin{aligned}
 p_{\gamma 0} &= p_\gamma \cos \theta + p_e \cos \phi \\
 \rightarrow \frac{E_{\gamma 0}}{c} &= \frac{E_\gamma}{c} \cos \theta + p_e \sqrt{1 - \sin^2 \phi} \\
 \rightarrow E_{\gamma 0} &= E_\gamma \cos \theta + p_e c \sqrt{1 - \frac{E_\gamma^2}{p_e^2 c^2} \sin^2 \theta} \\
 \rightarrow (E_{\gamma 0} - E_\gamma \cos \theta)^2 &= p_e^2 c^2 \left( 1 - \frac{E_\gamma^2}{p_e^2 c^2} \sin^2 \theta \right) \\
 \rightarrow E_{\gamma 0}^2 - 2E_{\gamma 0} E_\gamma \cos \theta + E_\gamma^2 \cos^2 \theta &= p_e^2 c^2 - E_\gamma^2 \sin^2 \theta \\
 \rightarrow p_e^2 c^2 &= E_{\gamma 0}^2 - 2E_{\gamma 0} E_\gamma \cos \theta + E_\gamma^2
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

Conservação da energia:

$$\begin{aligned}
E_{\gamma 0} + E_{e0} &= E_{\gamma} + E_e \\
E_{\gamma 0} + m_e c^2 &= E_{\gamma} + \sqrt{m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2} \\
(E_{\gamma 0} + m_e c^2 - E_{\gamma})^2 &= m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2 \\
E_{\gamma 0}^2 + m_e^2 c^4 + E_{\gamma}^2 + 2E_{\gamma 0} m_e c^2 - 2E_{\gamma 0} E_{\gamma} - 2m_e c^2 E_{\gamma} &= m_e^2 c^4 + E_{\gamma 0}^2 - 2E_{\gamma 0} E_{\gamma} \cos \theta + E_{\gamma}^2 \\
2E_{\gamma 0} m_e c^2 - 2E_{\gamma 0} E_{\gamma} - 2m_e c^2 E_{\gamma} &= -2E_{\gamma 0} E_{\gamma} \cos \theta \\
E_{\gamma 0} m_e c^2 &= E_{\gamma} [E_{\gamma 0} (1 - \cos \theta) + m_e c^2] \\
\rightarrow E_{\gamma} &= \frac{E_{\gamma 0} m_e c^2}{E_{\gamma 0} (1 - \cos \theta) + m_e c^2} \\
\rightarrow E_{\gamma} &= \frac{1}{(1 - \cos \theta)/m_e c^2 + 1/E_{\gamma 0}} \quad (5.61)
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\frac{1}{E_{\gamma}} - \frac{1}{E_{\gamma 0}} = \frac{1}{m_e c^2} (1 - \cos \theta) \quad (5.62)$$

Finalmente, usando  $E_{\gamma} = h\nu = hc/\lambda$ , temos

$$\boxed{\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)} \quad (\text{Efeito Compton}) \quad (5.63)$$

Por outro lado, se o elétron estiver preso ao átomo, o fóton terá que transmitir seu momento a todo o átomo, não apenas o elétron. Desta forma, a massa do elétron acima  $m_e$  deve ser substituída pela massa do átomo  $m_a$ , que é muito maior do que a massa de um único elétron. Mesmo para o átomo de hidrogênio, com apenas um próton no núcleo, temos  $m_a = 1800m_e$ . Portanto, quando o espalhamento acontece nesses elétrons, temos uma variação  $\Delta\lambda$  muito menor do que no caso de elétron livre. De fato podemos aproximar

$$\Delta\lambda \approx 0 \rightarrow \lambda \approx \lambda_0 \quad (\text{Elétron preso ao átomo}) \quad (5.64)$$

Portanto, ao observar os fótons espalhados, esperamos alguns deles com o mesmo comprimento de onda incidente, e outros com o comprimento diferindo do incidente pela Eq. 5.63. Foi exatamente isso que Compton observou.

## 5.5 Ondas de de Broglie

Por volta de 1920's, estava então claro que a radiação, até então vista classicamente como uma onda, apresentava propriedades corpusculares, com energia que depende de sua frequência e, similarmente momento linear que depende de seu comprimento de onda:

$$E_{\gamma} = h\nu \quad \text{e} \quad p_{\gamma} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{Fótons}) \quad (5.65)$$

Em 1924, de Broglie propôs que, similarmente, partículas como elétrons, até então vistos classicamente como corpúsculos, deveriam apresentar propriedades ondulatórias, tendo associados um

comprimento de onda que depende de seu momento linear, com exatamente a mesma relação que relaciona momento e comprimento de onda da radiação.

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{Partículas}) \quad (5.66)$$

Essa proposta foi verificada experimentalmente, e deu a de Broglie o prêmio Nobel em 1929. Ou seja, de Broglie ganhou o prêmio Nobel por converter a equação  $p = h/\lambda$  em  $\lambda = h/p$  e interpretar isso de maneira correta !

### Exemplo 1

Considere um fóton de radiação visível, e.g. vermelha e  $\lambda = 700\text{nm} = 7.0 \times 10^{-7}\text{m}$ . Temos

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}}{7 \times 10^{-7}\text{m}} = 9.47 \times 10^{-28} \text{ Kg m/s} \quad (5.67)$$

### Exemplo 2

Considere um elétron ( $m_e = 9.11 \times 10^{-31}\text{Kg}$ ) com uma velocidade  $v_e = 2 \times 10^8\text{m/s} = 2c/3$ . Este elétron tem velocidade comparável à da luz e é portanto relativístico. Vamos usar as expressões relativísticas para calcular sua energia e seu momento. Temos

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \text{ ou } E = mc^2\gamma \quad (5.68)$$

$$p = m\gamma v \quad (5.69)$$

$$K = E - mc^2 = mc^2(\gamma - 1) \quad (5.70)$$

$$\text{onde } \gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2} \text{ e } \beta = v/c \quad (5.71)$$

Para  $\beta = 2/3$ , temos  $\gamma \approx 1.34$ . E para o elétron, temos

$$m_e c^2 = 8.18 \times 10^{-14}\text{J} = 5.11 \times 10^5\text{eV} = 511 \text{ keV}. \quad (5.72)$$

$$E = 1.1 \times 10^{-13}\text{J} = 684 \text{ keV} \quad (5.73)$$

$$p = m\gamma v = 1.8 \times 10^{-22}\text{kg m/s} \quad (5.74)$$

$$K = 2.74 \times 10^{-14}\text{J} = 174\text{keV} \quad (5.75)$$

Note que o momento do elétron é muito menor do que o de um fóton de luz vermelha. Temos então o comprimento de onda

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}}{1.8 \times 10^{-22} \text{ kg m/s}} = 3.7 \times 10^{-12} \text{ m} = 3.7 \times 10^{-3}\text{nm} \quad (5.76)$$

De fato, esse comprimento de onda é 100 vezes menor do que o raio de Bohr

### Exemplo 3

Considere agora um elétron com energia cinética  $K = 54\text{eV}$ . Como essa energia é muito menor que a energia de repouso do elétron, ele é não-relativístico, i.e.  $v \ll c$ . Quando este é o caso, temos  $\beta \approx 0$ ,  $\gamma \approx 1 + \beta^2/2$ , e as expressões se reduzem às clássicas:

$$p \approx mv \quad (5.77)$$

$$K \approx \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad (5.78)$$

$$E \approx mc^2 + \frac{mv^2}{2} \approx mc^2 \quad (5.79)$$

das quais temos

$$p = \sqrt{2mK} \quad (5.80)$$

Portanto, para o elétron, temos

$$p = 3.82 \times 10^{-24} \text{kg m/s} \quad (5.81)$$

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{J.s}}{3.82 \times 10^{-24} \text{kg m/s}} = 1.68 \times 10^{-10} \text{m} = 0.168 \text{nm} \quad (5.82)$$

#### Exemplo 4

Considere agora uma pessoa de massa 70 kg andando a 10 m/s. Temos

$$p = mv = 700 \text{ kg m/s} \quad (5.83)$$

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{J.s}}{700 \text{kg m/s}} = 9.5 \times 10^{-37} \text{m} \quad (5.84)$$

### 5.5.1 Átomo de Bohr Revisitado

Com o comprimento de onda de de Broglie associado a partículas, podemos re-interpretar a condição de quantização do átomo de Bohr.

Tínhamos visto que a quantização das energias no átomo resultava da quantização do momento angular do elétron em órbita  $L = mvr = n\hbar$ . Mas se o elétron tem um comprimento de onda associado  $\lambda = h/p = h/mv$ , por consistência, suas órbitas devem ter uma circunferência que contenha um número inteiro de comprimentos de onda do elétron, ou seja:

$$\begin{aligned} 2\pi r &= n\lambda \quad \text{onde } n \text{ é um inteiro.} \\ &= n \frac{h}{mv} \\ \rightarrow mvr &= n \frac{h}{2\pi} \rightarrow L = n\hbar \end{aligned} \quad (5.85)$$

ou seja, a interpretação de de Broglie, de que podemos associar ondas a partículas, leva à condição de quantização do momento angular que Bohr precisou impor para deduzir as órbitas e energias dos estados estacionários.

## 5.6 Interferência de Elétrons

### 5.6.1 Experimento de Davisson-Germer

Se elétrons têm propriedades ondulatórias e um comprimento de onda associado, eles devem sofrer efeitos de interferência e difração em fendas similares à radiação. No caso da luz, o espaçamento entre os mínimos de difração por uma fenda de tamanho  $a$  era dado por

$$\Delta\theta \approx \frac{\lambda}{a} \quad (5.86)$$

e, portanto, os efeitos de difração só são observados quando  $\lambda \approx a$ , ou seja, quando a largura da fenda é da ordem do comprimento de onda da luz. Para luz vermelha, temos  $\lambda \approx 700 \text{nm} = 7 \times 10^{-7} \text{m}$ .

Por outro lado, para elétrons de energia  $\sim 54$  eV, temos  $\lambda_e \approx 1.7 \times 10^{-10}$  m, ou seja próximo ao tamanho do átomo (lembre raio de Bohr  $a_0 \approx 0.5 \times 10^{-10}$  m). Portanto precisamos de uma "fenda" de largura próxima ao tamanho do átomo para medirmos efeitos de interferência significativos nestes elétrons. Qualquer fenda usual será muito maior do que isso, o que torna essa experiência não tão fácil de se fazer como para a luz. Uma possibilidade é usar cristais, em que os átomos se arranjam de maneira ordenada, e a luz pode "difratar" pelo espaço entre os átomos, que é da ordem de  $10^{-10}$  m.

Em 1927, Davisson e Germer fizeram uma experiência que comprovou o caráter ondulatório de elétrons, usando cristais de níquel. Por esse feito, Davisson ganhou o prêmio Nobel em 1937. O apparatus experimental usado é mostrado na Fig. 5.9

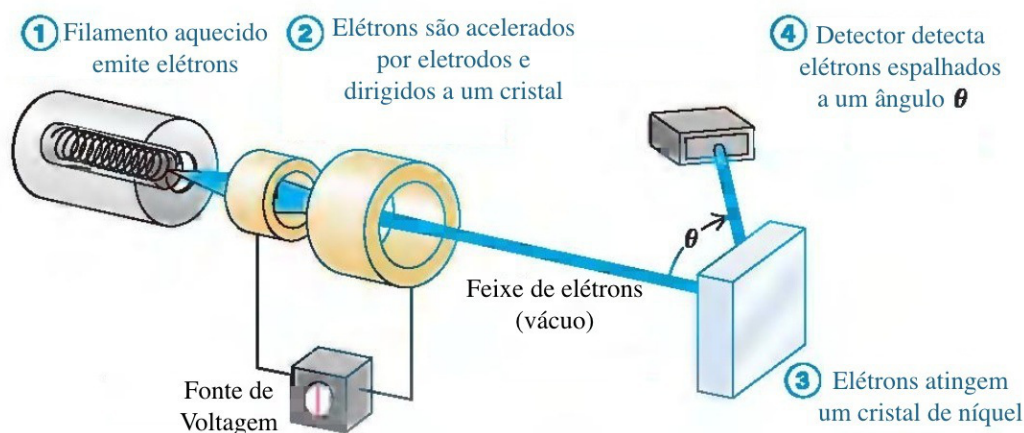


Figura 5.9: Aparato do experimento de Davisson-Germer feito em 1927. (Young)

Um fio de tungstênio aquecido fornece elétrons, que são acelerados em um potencial  $\Delta V$ . Portanto os elétrons têm energia cinética e momento (não-relativístico):

$$K = e\Delta V \quad (5.87)$$

$$p = \sqrt{2mK} = \sqrt{2me\Delta V} \quad (5.88)$$

De acordo com de Broglie, eles têm comprimento de onda

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me\Delta V}} \quad (5.89)$$

Para  $\Delta V = 54$  V, o elétron tem energia  $K = e\Delta V = 54$  eV, e comprimento de onda predito

$$\lambda = 1.68 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (5.90)$$

Esses elétrons colidem com os átomos do cristal de níquel, sendo espalhados em todas as direções. Na Fig. 6.1, mostra-se elétrons espalhados fazendo ângulo de  $\theta = 50^\circ$  com a direção de incidência. Como o cristal tem estrutura relativamente rígida, o elétron incide e se espalha com a mesma energia (e mesmo comprimento de onda).

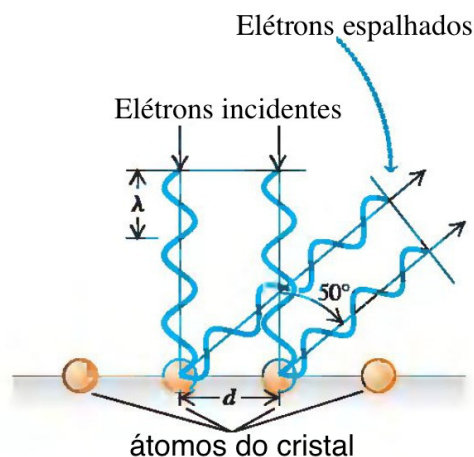


Figura 5.10: Experimento de Davisson-Germer em 1927. Elétrons incidem sobre átomos de cristal de níquel e são espalhados em todas as direções. No ângulo  $\theta = 50^\circ$ , os elétrons interferem construtivamente. (Young)

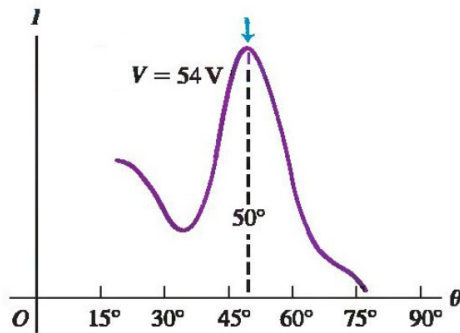


Figura 5.11: Intensidade de elétrons no experimento de Davisson-Germer. O pico em  $\theta = 50^\circ$  é explicado pela interferência construtiva dos elétrons nesse ângulo, e demonstra a sua natureza ondulatória. (Young)

Os átomos funcionam como uma rede de difração. Experimentos anteriores de difração de raios X neste mesmo cristal haviam indicado que o espaçamento entre seus átomos era dado por  $d = 2.15 \times 10^{-10} \text{ m}$ .

Davisson e Germer fizeram então um gráfico da intensidade espalhada dos elétrons ( número de elétrons espalhados) em função do ângulo de espalhamento  $\theta$ , obtendo um pico em  $\theta = 50^\circ$  quando  $\Delta V = 54 \text{ V}$ . Se os elétrons são de fato ondas que interferem, deve ocorrer um máximo no ângulo  $\theta$  tal que:

$$d \sin \theta = \lambda \quad (5.91)$$

ou seja, quando a diferença de caminho entre dois raios espalhados de átomos adjacentes do cristal é igual a um comprimento de onda do elétron.

Para  $d = 2.15 \times 10^{-10} \text{ m}$  e  $\theta = 50^\circ$ , eles obtiveram

$$\lambda = 1.68 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (5.92)$$

em excelente acordo com o valor predito, e mostrando portanto que o pico observado era devido à natureza ondulatoria do elétron.

### 5.6.2 Fenda Dupla com Elétrons

Como os elétrons têm propriedades ondulatórias, o experimento de fenda dupla com incidência de elétrons, ao invés de radiação, deve gerar um padrão de interferência similar.

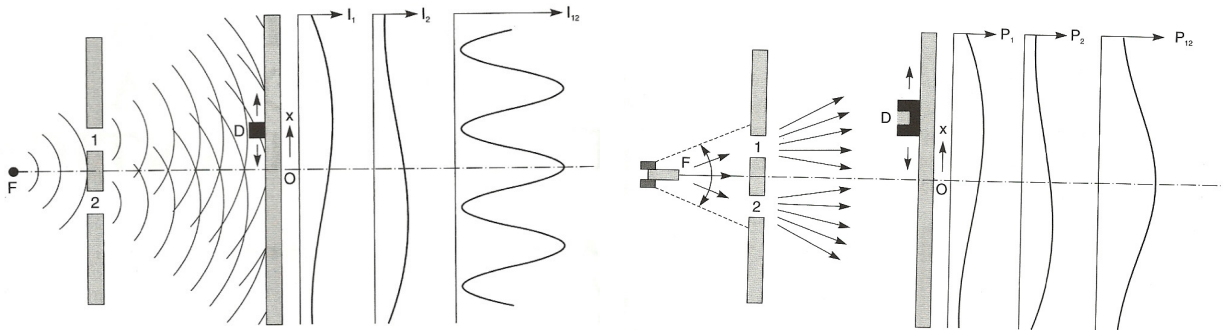


Figura 5.12: Padrão de interferência de uma onda clássica (esquerda) e de uma partícula clássica (direita). Para a onda clássica existe um padrão de interferência na intensidade resultante quando ambas as fendas estão abertas. Já no caso da partícula clássica, a distribuição de partículas é a superposição dos casos de cada fenda individual, não havendo interferência. (Nussenzveig)

Na Fig. 5.12, mostramos a intensidade de ondas clássicas após passarem por uma fenda dupla e a densidade de probabilidade de partículas clássicas ao serem ejetadas sobre a mesma fenda.

No caso de ondas clássicas, quando fechamos e.g a fenda 2, obtemos um padrão de intensidade concentrado na região da fenda 1, e vice-versa. Mas quando abrimos ambas as fendas o padrão



resultante é de interferência:

$$I_1 = E_1^2 \text{ e } I_2 = E_2^2 \quad (5.93)$$

$$I_{12} = (E_1 + E_2)^2 = I_1 + I_2 + 2I_1I_2 \cos \Delta \quad (5.94)$$

É interessante notar que isso acontece mesmo se jogarmos um fóton da radiação por vez. Ou seja, cada fóton interfere consigo mesmo, não necessariamente com outros. Assim, devemos concluir que cada fóton passa por ambas as fendas ao mesmo tempo.

Já no caso de partículas clássicas, podemos falar da distribuição de partículas, ou da probabilidade de elas estarem em certa posição na tela de observação. Neste caso, temos as probabilidades  $P_1$  e  $P_2$  para as fendas individuais. No caso de as duas fendas abertas, a probabilidade resultante é a soma dos padrões de cada fenda:

$$P_{12} = P_1 + P_2 \quad (5.95)$$

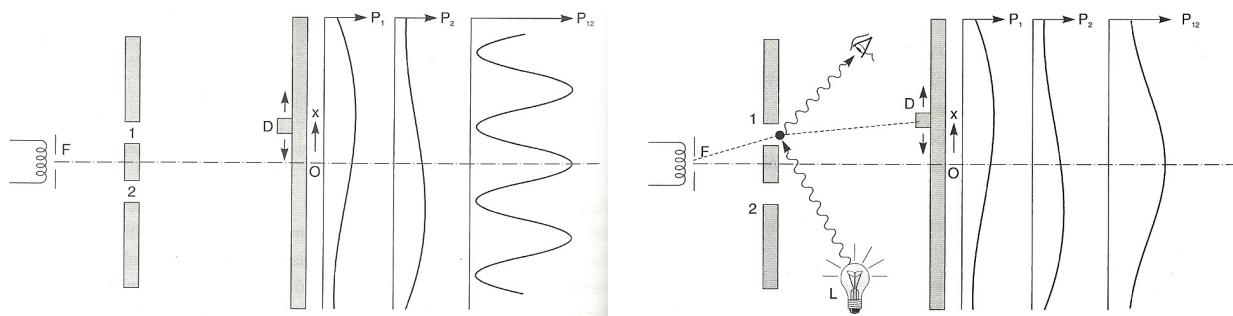


Figura 5.13: Padrão de interferência de um elétron quando ele só é detectado na tela de observação (esquerda) e quando ele é detectado nas fendas para verificar por qual delas ele passou. No primeiro caso o elétron sofre interferência, passando por ambas as fendas exatamente como a radiação. Já no segundo, o elétron age como uma partícula clássica, já que a observação o força a "passar" por apenas uma das fendas. (Nussenzveig)

Na Fig. 5.13, mostramos o experimento de fenda dupla, mas injetando elétrons, produzidos por um fio aquecido.

No primeiro caso (esquerda), os elétrons são detectados apenas na tela de observação, e o resultado para suas probabilidades são idênticos às intensidades de ondas clássicas. Ou seja, com cada uma das fendas abertas, têm-se as probabilidades individuais  $P_1$  e  $P_2$ , enquanto no caso de as duas fendas abertas, ocorre interferência dos elétrons, gerando o padrão de interferência. Novamente isso acontece mesmo que enviemos um elétron de cada vez. Isso implica que o elétron de fato passa por ambas as fendas, pois só assim ele sofreria interferência consigo próprio. Portanto, deve existir uma função  $\psi(x)$  cujo quadrado dá a probabilidade  $P(x)$ , i.e. que faça o papel do campo elétrico das onda eletromagnética, ou seja

$$P_1 = |\psi_1|^2 \text{ e } P_2 = |\psi_2|^2 \quad (5.96)$$

$$P_{12} = |\psi_1 + \psi_2|^2 \neq P_1 + P_2 \quad (5.97)$$

Essa função de onda de fato é o principal objeto de estudo na mecânica quântica. Vamos voltar a ela no próximo capítulo quando iremos introduzir a equação que descreve essa função.

Já no segundo caso (direita), os elétrons são detectados na própria fenda, para sabermos por qual delas ele "passou" antes de que ele chegue à tela de observação final. Neste caso, o que se

verifica é que o padrão de interferência observado anteriormente desaparece, e o que se observa é o padrão de probabilidades de partículas clássicas, i.e.

$$P_{12} = P_1 + P_2 \quad (5.98)$$

A explicação para isso é o chamado colapso da função de onda. No momento em que observamos algo com caráter ondulatório (radiação, elétrons), nós forçamos essa entidade a mostrar o seu caráter corpuscular. Em termos da função de onda, dizemos que a função de onda (que era algo espalhado no espaço) colapsou para a posição de detecção (algo localizado).

Na mecânica quântica, a própria observação "afeta" o resultado do que está sendo observado. As naturezas ondulatórias e corpusculares, tanto de elétrons ou de fótons, se mostram em diferentes situações, mas não ao mesmo tempo.

## 5.7 Princípio de Incerteza de Heisenberg

A interferência de elétrons em fenda dupla mostra claramente que a observação de partículas quânticas afeta suas propriedades, i.e. a observação interfere no observado. A incapacidade de medir sem interferir é um ponto fundamental da teoria quântica, que indica que, em escalas atômicas, dominadas pela Física Quântica, só poderemos fazer uma descrição *estatística* ou *probabilística* das propriedades de uma partícula ou de um sistema.

Enquanto na mecânica clássica podemos sempre encontrar a posição e a velocidade de uma partícula com precisão infinita, na física quântica veremos que isso não é possível. Um exemplo simples dessa limitação é imaginar que temos um elétron "parado" o qual desejamos medir sua posição e velocidade. Para fazer essa medida, devemos jogar um fóton no elétron para "ver" onde ele está. Mas assim que fazemos isso (ou mais geralmente, medimos o elétron de qualquer outra forma, sempre interagindo com ele de alguma forma), mudamos a velocidade do elétron (e também sua posição).

### 5.7.1 Difração de Elétrons

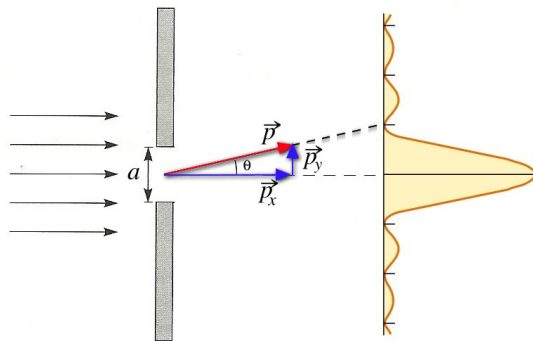


Figura 5.14: Difração de um elétron por uma fenda de largura  $a$ . (Nussenzveig)

Vamos considerar a difração de elétrons por uma fenda de largura  $a$  para ter uma estimativa mais quantitativa desta limitação.

Pela Eq. 3.32, também válida para elétrons, o primeiro mínimo acontece quando

$$\frac{2\pi}{2\lambda} a \sin \theta = \pi \rightarrow \theta \approx \sin \theta = \frac{\lambda}{a} \quad (5.99)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \tan \theta &= \frac{p_y}{p_x} \rightarrow p_y = p_x \tan \theta \approx p_x \theta = p_x \frac{\lambda}{a} \\ \rightarrow p_y &\approx \frac{p_x \lambda}{a} \end{aligned} \quad (5.100)$$

Só podemos ter o padrão de difração se não medirmos a posição por onde o elétron passa na fenda. Assim, mesmo que o elétron tenha inicialmente momento apenas na direção  $x$ , ao passar

pela fenda não sabemos sob qual ângulo  $\theta$  ele irá parar na tela, ou seja, não sabemos o valor de  $p_y$  adquirido ao difratar. Como  $\sim 90\%$  dos elétrons estão dentro do primeiro máximo, a incerteza em  $p_y$  é pelo menos

$$\Delta p_y \geq p_y \approx \frac{p_x \lambda}{a} \quad (5.101)$$

Mas por de Broglie,  $\lambda = h/p_x$ , e portanto

$$\Delta p_y \geq \frac{p_x h}{p_x a} \rightarrow \Delta p_y a \geq h \quad (5.102)$$

Por fim, como a incerteza na coordenada  $y$  é a largura da fenda,  $\Delta y = a$ , temos

$$\Delta p_y \Delta y \geq h \quad (5.103)$$

### 5.7.2 Incerteza Posição-Momento

O princípio de incerteza de Heisenberg generaliza o resultado anterior para qualquer situação e diz que:

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (5.104)$$

ou seja, em qualquer experimento, as incertezas na posição e no momento linear de uma partícula/sistema só podem ter incertezas tais que a desigualdade acima seja válida. Em particular, se medimos a posição com precisão infinita  $\Delta x = 0$  isso implica total desconhecimento do momento  $\Delta p = \infty$  e vice-versa.

### 5.7.3 Incerteza Energia-Tempo

Existe também um princípio de incerteza associada à energia de um sistema e o tempo em que o sistema existe nesta energia. Podemos derivar esta relação de modo eurístico considerando uma partícula livre, para a qual a energia é igual a energia cinética:

$$E = K = \frac{mv^2}{2}, \quad p = mv \quad (5.105)$$

Temos, do princípio de incerteza de Heisenberg

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{\hbar}{2v\Delta t} \quad (5.106)$$

Por outro lado,

$$\Delta E = mv\Delta v = v\Delta p \geq v \frac{\hbar}{2v\Delta t} = \frac{\hbar}{2\Delta t} \quad (5.107)$$

portanto

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (5.108)$$

Interpretação: Não é possível saber a energia de um sistema com precisão  $\Delta E$  maior do que  $\hbar/2\Delta t$  onde  $\Delta t$  é o tempo de existência do sistema.

### 5.7.4 Função de Onda

A natureza ondulatória (que gera efeitos de interferência) e o princípio de incerteza nos dizem que existem incertezas intrínsecas na natureza. Portanto, na descrição fundamental feita pela mecânica quântica não podemos esperar descrever os fenômenos com precisão absoluta, mas apenas de forma estatística.

Como vimos na interferência por fenda dupla de elétrons, a probabilidade  $P(x)$  de o elétron estar em certa posição é o analogo da intensidade  $I(x)$  na interferência de radiação. Como  $I = E^2$  e isso gera interferência, deve haver uma função  $\psi$  que faz o papel do campo elétrico, i.e. uma amplitude de probabilidade, tal que  $P(x) = |\psi(x)|^2$ .

Esta função  $\psi(x)$  é chamada função de onda, e é ela que caracteriza o estado dos sistemas físicos quânticos. Podemos também ter uma função de onda  $\phi(p)$  associada a probabilidades do momento linear. Temos portanto:

- $\psi(x)$ : amplitude de probabilidade de encontrar uma partícula/sistema na posição  $x$ .
- $\phi(p)$ : amplitude de probabilidade de encontrar uma partícula/sistema no momento  $p$ .

Como

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (5.109)$$

podemos associar um vetor de onda  $\vec{k}$  ao momento linear  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

O formalismo da mecânica quântica mostra que essas funções  $\psi(x)$  e  $\phi(p)$  estão relacionadas pela Transformada de Fourier. A idéia é que qualquer função pode ser expandida em senos, cossenos ou  $e^{ikx}$ . Neste sentido,  $\psi(x)$  é uma superposição de  $e^{ikx}$  com coeficientes  $\phi(p)$  de vários  $p$ 's, e vice-versa.

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx, \quad k = p/\hbar \quad (5.110)$$

ou, em termos do momento:

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \quad (5.111)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \phi(p) dp \quad (5.112)$$

**Exemplo:** Onda plana com momento  $p_0$  e comprimento de onda  $\lambda_0$  bem determinados:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ik_0x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \quad (5.113)$$

Neste caso a função de onda no espaço de momentos fica

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(p-p_0)x/\hbar} dx \\ &= \delta(p - p_0) \end{aligned} \quad (5.114)$$

i.e. o momento é bem localizado, mas temos incerteza infinita na posição da partícula, já que  $\psi(x)$  oscila em todo o espaço.

**Exemplo:** Onda localizada com posição  $x_0$  bem determinada:

$$\psi(x) = \delta(x - x_0) \quad (5.115)$$

Neste caso  $\phi(p)$  fica

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \delta(x - x_0) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \end{aligned} \quad (5.116)$$

i.e. a posição é bem localizada, mas temos incerteza infinita no momento da partícula, já que  $\phi(p)$  oscila em todos os momentos.

**Exemplo:** Pacote Gaussiano. Este caso corresponde a uma situação intermediária entre as duas anteriores, em que conhecemos a posição da partícula (e.g.  $x = 0$ ) com incerteza  $\Delta x$  distribuída de acordo com uma distribuição normal (Gaussiana). Portanto

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta x^2}} e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}} \quad (5.117)$$

o que implica

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\Delta x^2}} \quad (5.118)$$

e portanto

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} e^{-ax^2} dx, \quad a = \frac{1}{4\Delta x^2} \end{aligned} \quad (5.119)$$

A integral acima fica

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{k^2}{4a}} \quad (5.120)$$

e como

$$\frac{k^2}{4a} = \frac{p^2/\hbar^2}{\Delta x^2} \quad (5.121)$$

temos

$$\begin{aligned}
\phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{1/4}} \sqrt{\pi(4\Delta x^2)} e^{-\frac{p^2}{(\hbar/\Delta x)^2}} \\
&= \left(\frac{4\Delta x^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{p^2}{4(\hbar/2\Delta x)^2}}
\end{aligned} \tag{5.122}$$

que é uma distribuição normal com incerteza  $\Delta p$  dada por:

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x} \tag{5.123}$$

ou seja,

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \tag{5.124}$$

Ou seja, o pacote Gaussiano satura a desigualdade do princípio de incerteza. Qualquer outra distribuição terá  $\Delta x \Delta p$  necessariamente maior do que  $\hbar/2$ .

Essa é uma propriedade geral de Transformadas de Fourier de funções, i.e. a transformada de uma função bem localizada é deslocalizada e vice-versa. Esse fato permite entender o prin'cípio de incerteza de um ponto de vista mais matemático.