

## PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS DA MATERIA

De Broglie, em 1924, estende a dualidade onda-partícula a luz e a todos os partículas:

$$\text{ONDA } v, \lambda \rightarrow \text{partícula } E = hv, P = \frac{h}{\lambda}$$

$$\text{partícula } E, P \rightarrow \text{onda } v = E/h; \lambda = h/P$$

### Exemplos

$$1) M = 1.0 \text{ kg} \quad P = mv = 10 \text{ kg m/s} \\ v = 10 \text{ m/s} \quad E = \frac{mv^2}{2} = 50 \text{ J}$$

$$v = \frac{50}{6,63 \times 10^{-34}} = 7,54 \times 10^{34} \text{ Hz} \\ \lambda = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{10} = 6,63 \times 10^{-35} \text{ m} = 6,63 \times 10^{-25} \text{ Å}$$

$$2) \text{ Elétron a } 100 \text{ eV}$$

$$E = 100 \times 1,6 \times 10^{-19} = 1,6 \times 10^{-17} \text{ J} \quad (mc^2 = 0,5 \text{ MeV} \quad p \text{ é o elétron})$$

Como essa energia é não-relativística

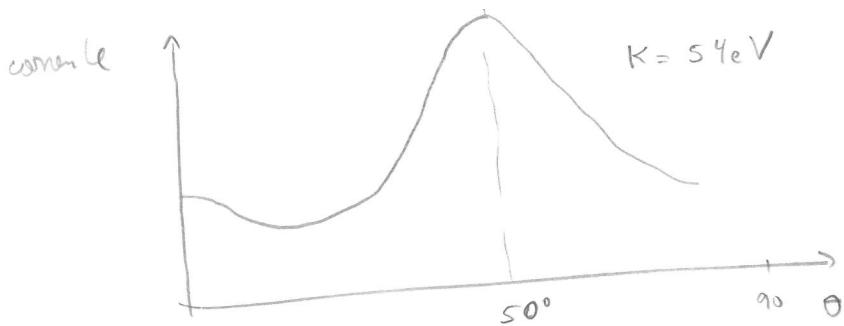
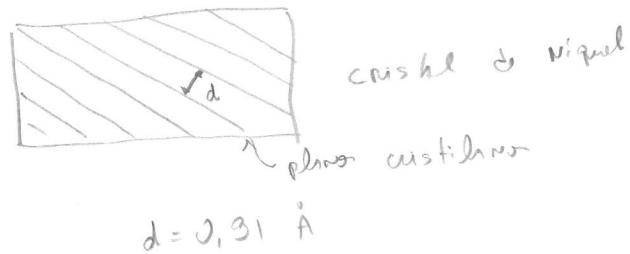
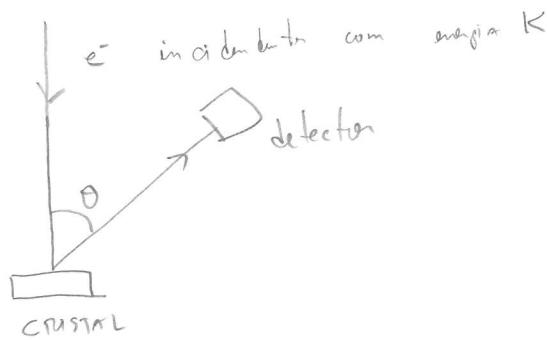
$$E = \frac{P^2}{2m} \quad P = \sqrt{2mE} = \left[ 2 \times (9,1 \times 10^{-31}) (1,6 \times 10^{-17}) \right]^{1/2} = 5,4 \times 10^{-24} \text{ J}$$

$$\lambda = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{5,4 \times 10^{-24}} = 1,2 \times 10^{-10} \text{ m} = 1,2 \text{ Å}$$

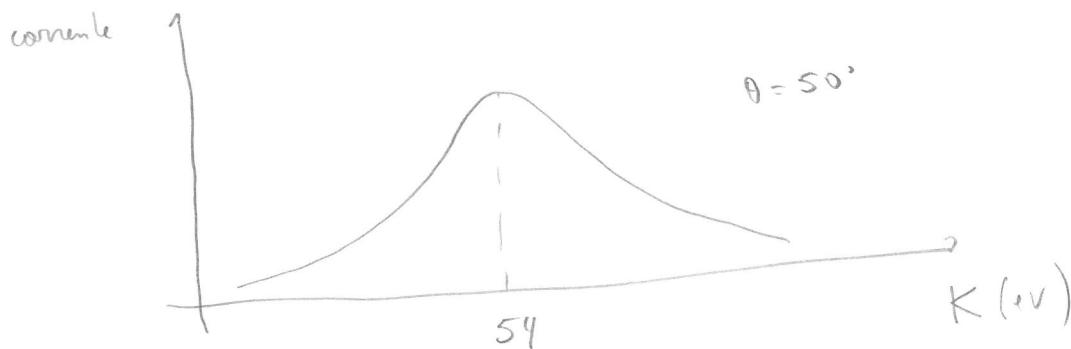
$$v = \frac{5,4 \times 10^{-24}}{6,63 \times 10^{-34}} = 0,81 \times 10^{10} \text{ Hz} = 8,1 \times 10^3 \text{ Hz}$$

O comportamento ondulatório dos elétrons poderia ser observado em experiências de interferência. O tamanho do interferômetro deveria ser da ordem de  $1\text{ \AA}$ .

### Experimento de Davisson - Germer

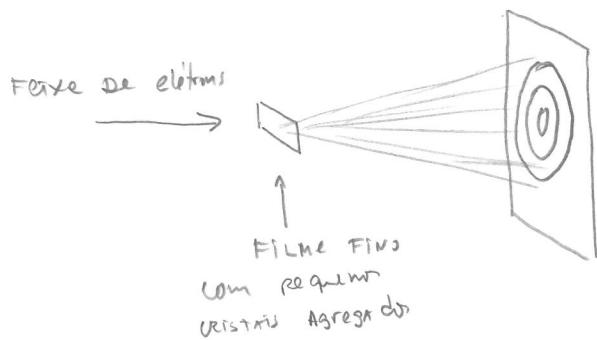


MUDAR DO SIGNIFICATIVAMENTE  
 $K$ , o pico desaparece.



## Outros Experimentos

- G.P. Thomson, 1927

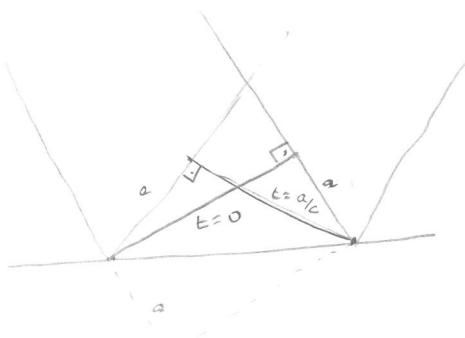
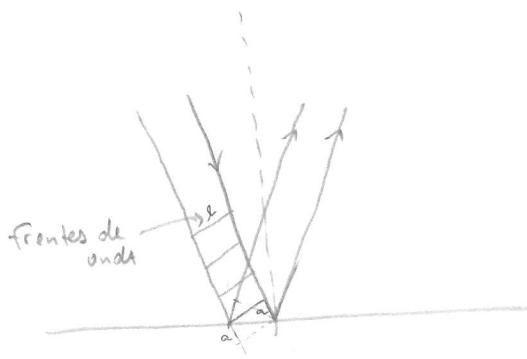


- Difra o de neutrons por cristais de fluoreto de lito  
(Estermann, Stern, Frisch)

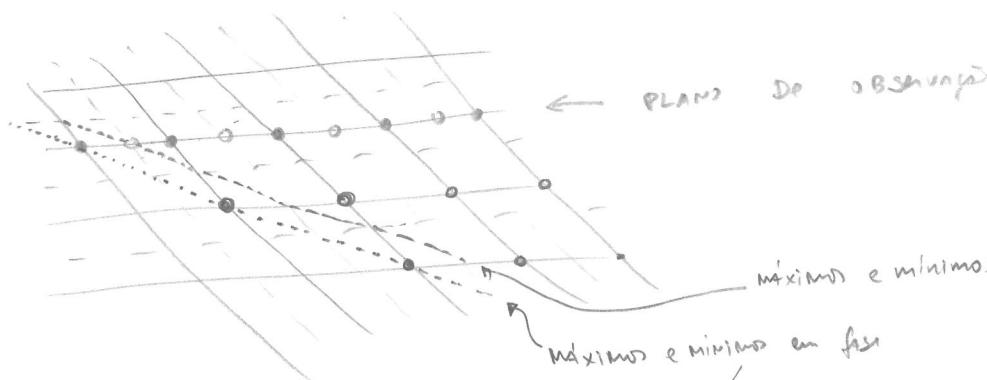
- Interfer ncias de neutrons  
(Fermi, Marshall, Zinn)

ENTENDENDO O experimento : reflexão de Bragg

A) Reflexões sobre 1 único plano - frontes de onda são refletidos em fase.



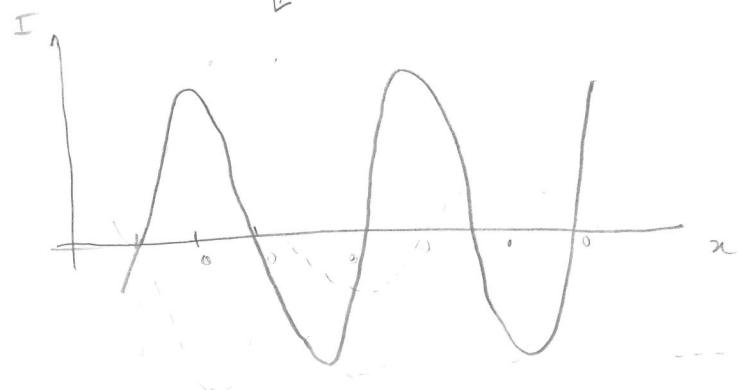
B) Interferência entre duas ondas planas



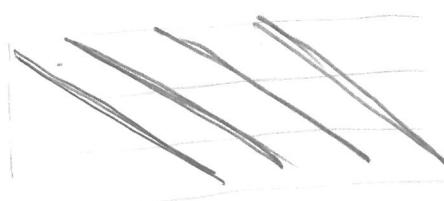
máximos e mínimos formam fase, amplitude total é nula

máximos e mínimos em fase

NOTAÇÕES



Em média

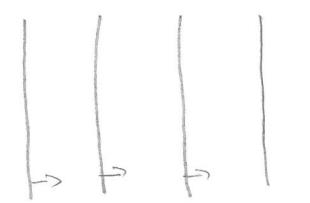


FUNDAS

Exemplo

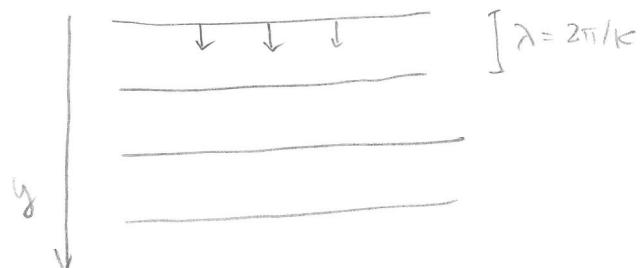
$$\Psi_1(x, y, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

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

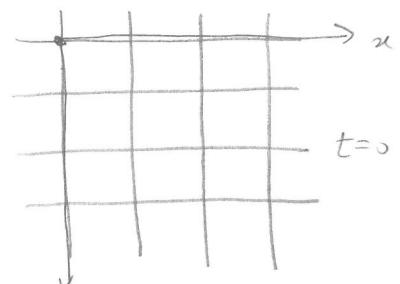


Velocidade da fase =  $\frac{\omega}{k}$

$$\Psi_2(x, y, t) = A \cos(ky - \omega t)$$



$$\Psi(x, y, t) = \Psi_1 + \Psi_2 = 2A \cos\left[k\left(\frac{x+y}{2}\right) - \omega t\right] \cos\left[k\left(\frac{x-y}{2}\right)\right]$$



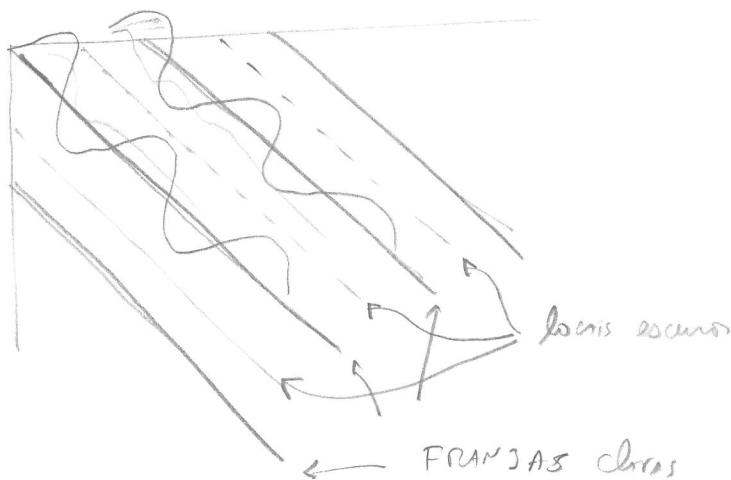
NA linhas onde  $y = x + \frac{2n\pi}{k} = x + n\lambda$

os termos

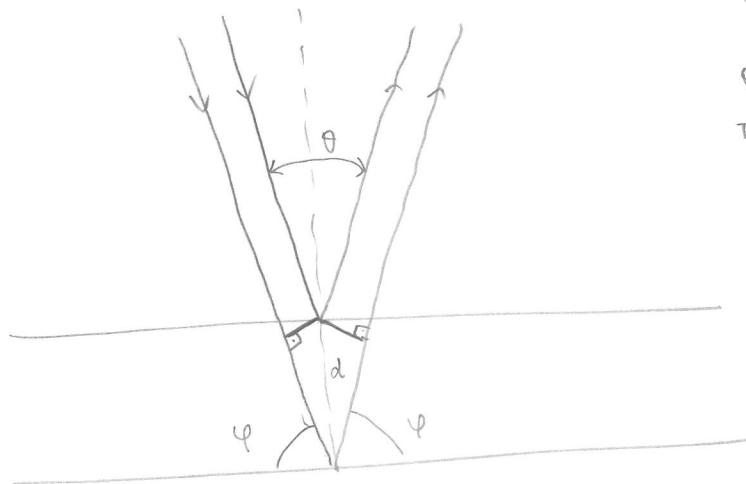
$$\Psi = 2A \cos\left[kx - \omega t + n\pi\right] \cos(n\pi) = 2A \cos(kx - \omega t)$$

NA linhas alternadas  $y = x + \frac{n\pi}{k} = x + \frac{n\lambda}{2}$ ,  $\cos\left(\frac{k(x-y)}{2}\right) = \cos(n\pi/2) = 0$   
p/  $n=1, 3, 5$

$$\Psi = 0$$



c) Reflexões em dois planos



$\varphi$  = ângulo entre a incidência e os planos do cristal.

$\theta$  = ângulo entre a incidência e a reflexão

$\pi - \theta$  = ângulo de espalhamento h. =  $2\varphi$

$$2\varphi + \theta = \pi$$

$$\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{2} - \varphi$$

diferença de caminho óptico é  $2d \cos(\pi/2 + \varphi) = 2d \sin \varphi$   
fronteira da onda em fase se  $\boxed{2d \sin \varphi = n\lambda}$

Para  $n=1$ ,  $d = 0.91 \text{ \AA}$  e  $\theta = 50^\circ$  tem que

$$\varphi = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} = 90 - 25 = 65^\circ$$

$$\lambda = 2 \times 0.91 \text{ \AA} \times \sin 65 = 1.65 \text{ \AA}$$

i.e., onda com  $1.65 \text{ \AA}$  terá interferência construtiva à  $65^\circ$ .

Os elétrons do experimento tem  $K = 54 \text{ eV} \Rightarrow$

$$P = \sqrt{2mK} = \left[ 2 \times 3,1 \times 10^{-31} \times 54 \times 1,6 \times 10^{19} \right]^{1/2}$$

$$= 3,97 \times 10^{-25} \approx 4 \times 10^{-24} \text{ Kq m/s}$$

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{4 \times 10^{-24}} \approx 1,66 \times 10^{-10} \text{ m} = 1,66 \text{ \AA}$$

De Broglie ganhou o Nobel em 1924 e

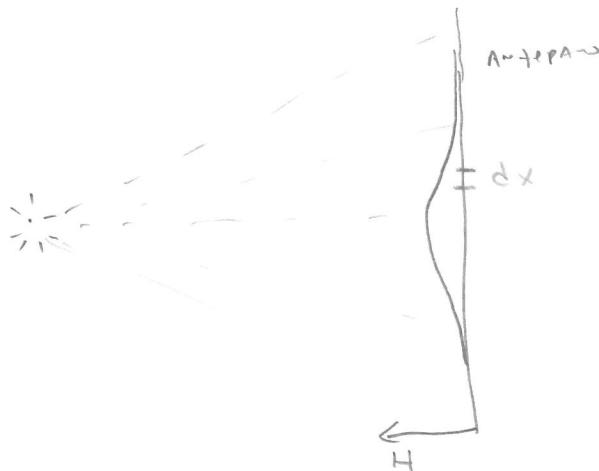
Davission e Thomson em 1937

## Interpretação de Einstein, Born, Bohr, Heisenberg

No caso de fótons, a intensidade da luz é dada por

$$\frac{1}{4\pi} \langle \varepsilon^2 \rangle ; \quad \varepsilon = \text{campo elétrico}$$

Interpretando a luz como fótons,  $I = N h\nu$ ,  $N = \text{nº de fótons}$ . Se um feixe emite luz,  $\varepsilon \sim 1/r \Rightarrow \langle \varepsilon^2 \rangle \sim 1/r^2$ . Se a fonte emite  $N$  fótons por segundo em todos os direções, o número de fótons/m² também  $\sim 1/r^2$ :



Valor médio de  $\varepsilon^2$  no intervalo  $dx$  = número de fótons/segundo que atingem  $dx$ .

Se a fonte é bem fraca, de forma que um fôton de cada vez chega ao Antevisão, o quadro de intensidade é obtido depois de muito tempo. Interpretarmos  $I = \langle \varepsilon^2 \rangle / 4\pi$  como a probabilidade de um fôton atingir o Antevisão.

A cada partícula com E, P ASSOCIAMOS uma onda com

$$\nu = E/h, \quad \lambda = h/p$$

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= A \sin 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \\ &= A \sin (kx - \omega t) \quad k = 2\pi/\lambda \\ & \quad \omega = 2\pi\nu\end{aligned}$$

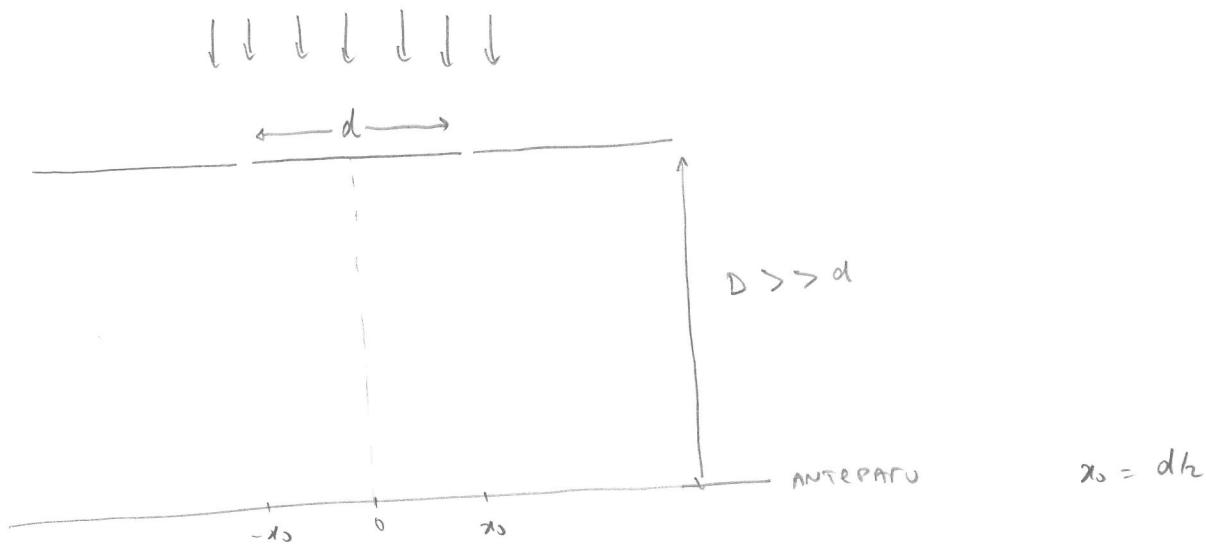
tal que

$|\psi(x, t)|^2$  = prob de se encontrar a partícula no ponto x e no instante t

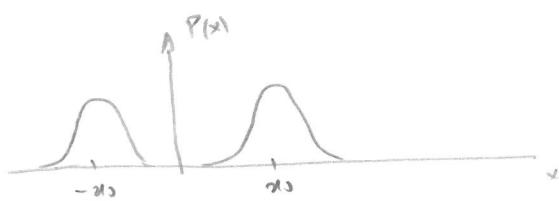
### Princípio da complementariedade de Bohr

Uma entidade (radiação ou matéria) apresenta-se em uma dada medida ou como onda ou como partícula. As duas manifestações são complementares e não podem ser observadas simultaneamente.

# A EXPERIÊNCIA DA FENDA DUPLA



(A) Segundo os principios das fendas esperamos obter um perfil



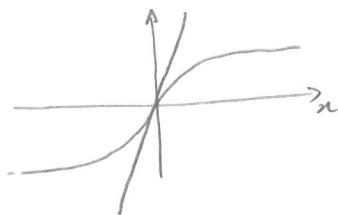
$$P(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}b} e^{-(x+x_0)^2/b^2} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}b} e^{-(x-x_0)^2/b^2}$$

$$\frac{x}{x_0} = \tanh(2x_0/b^2)$$

A condição  $\frac{\partial P}{\partial x} = 0$  resulta em

1 máximos se  $b > \sqrt{2}x_0 = d/\sqrt{2}$

2 máximos e um mínimo se  $b < \sqrt{2}x_0 = \frac{d}{\sqrt{2}}$

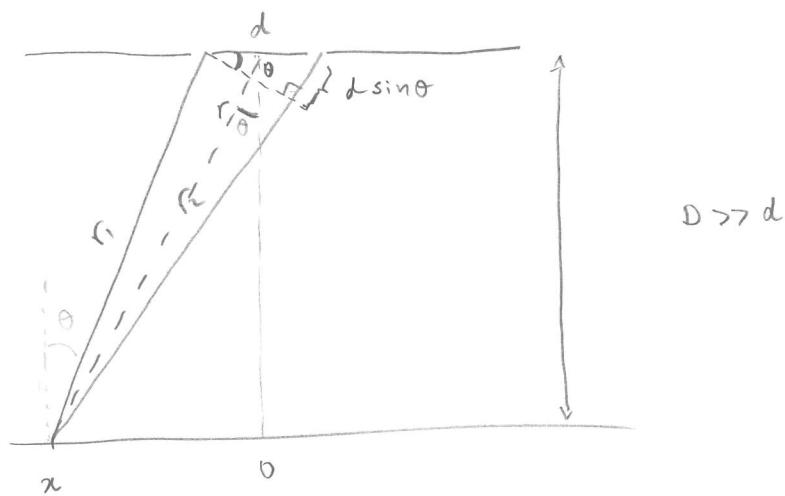


(B) Segundo ondas podemos escrever

$$\psi_1(x, t) = \frac{1}{r_1} \omega (kr_1 - wt)$$

$$\psi_2(x, t) = \frac{1}{r_2} \omega (kr_2 - wt)$$

Onde



$$D^2 + x^2 = r^2$$

$$\sin \theta = \frac{x}{\sqrt{D^2 + x^2}}$$

A diferença de fase entre as ondas no ponto x é:

$$\Delta\phi = (kr_2 - wt) - (kr_1 - wt) = k(r_2 - r_1) \approx kd \sin \theta$$

Interferência construtiva ocorre quando  $\Delta\phi = 2n\pi \Rightarrow d \sin \theta = n\lambda$

Então, a onda resultante no ponto x é:

$$\Psi(x, t) = \Psi_1 + \Psi_2 = \frac{1}{r_1} w(kr_1 - wt) + \frac{1}{r_2} w(kr_2 - wt)$$

Usando  $r_1 \approx r$ ,  $r_2 \approx r$ ,  $r = \frac{r_1 + r_2}{2}$  obtemos

$$\Psi = \frac{1}{r} w(kr - wt) w\left(\frac{k(r_2 - r_1)}{2}\right)$$

$$= \frac{2}{r} w(kr - wt) w\left(\frac{kd \sin \theta}{2}\right)$$

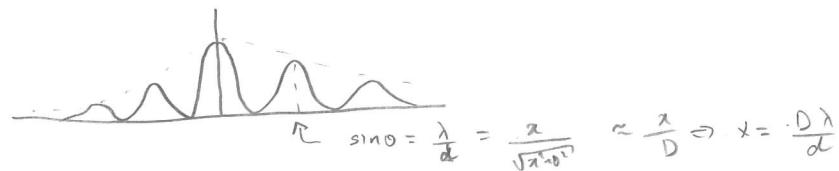
$$\cos A + \cos B = 2 \cos\left(\frac{A+B}{2}\right) \cos\left(\frac{A-B}{2}\right)$$

A intensidade da luz será dada por  $\langle \Psi^2 \rangle$ :

$$I = \frac{1}{r^2} w^2 \left( \frac{kd \sin \theta}{2} \right)^2 = \frac{1}{x^2 + D^2} w^2 \left( \frac{kd x}{2\sqrt{x^2 + D^2}} \right)^2 \approx \frac{1}{x^2 + D^2} w^2 \left( \frac{kd x}{2D} \right)^2$$

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

$$\frac{kd \sin \theta}{2} = \frac{\pi d \sin \theta}{\lambda}$$



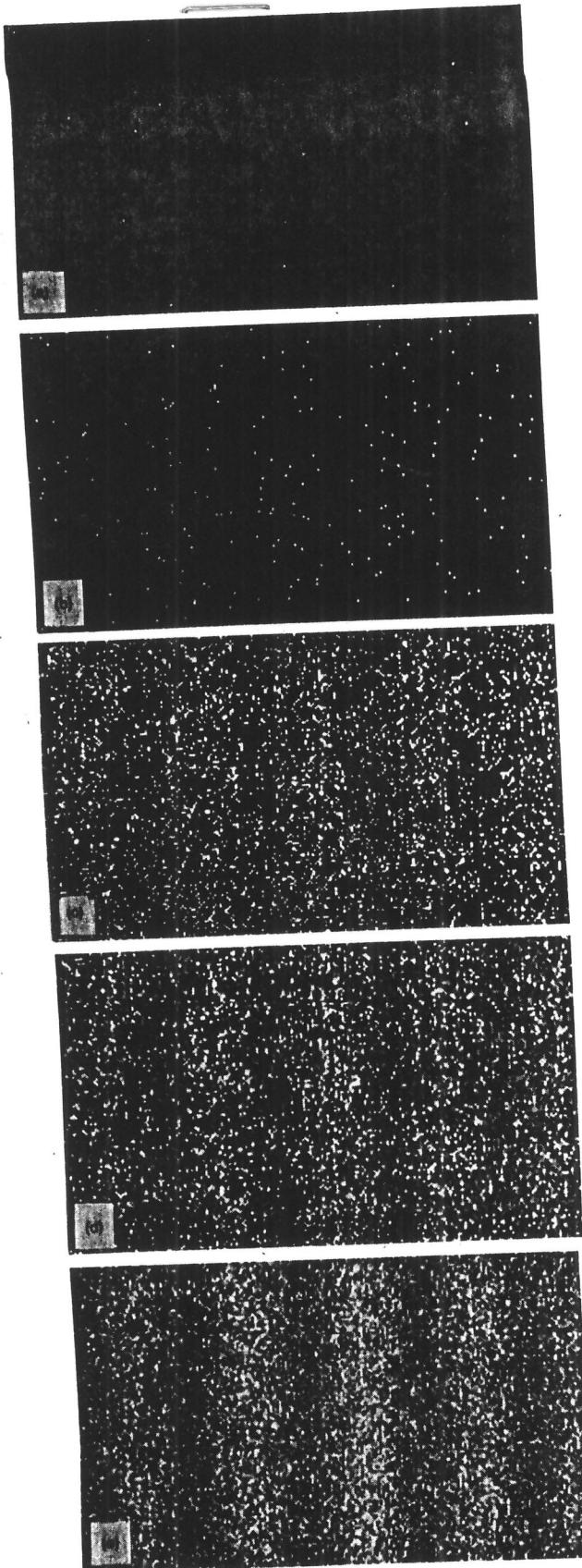


Fig. 5. Buildup of the electron interference pattern. The central field of view,  $\frac{1}{2}$  width and  $\frac{1}{2}$  length, of the whole field of the detector plane is shown here. The picture extends similarly to the whole field: (a) Number of electrons = 10; (b) Number of electrons = 100; (c) Number of electrons = 3000; (d) Number of electrons = 20 000; and (e) Number of electrons = 70 000.

A. Tonomura, J. Endo,  
T. Matsuda, T. Kawasaki

Am. J. Phys. 57(2), 1989,  
117

## O PRINCIPIO DA INCERTEZA

A mecânica clássica é determinística e o estado de uma partícula é dado por sua posição e velocidade,  $r(t)$  e  $v(t)$ . A mecânica estatística é usada por conveniência, não por princípio.

A mecânica quântica também é determinística, mas seu intervalo é intrinsecamente probabilístico.

Heisenberg, entre outros, notou que sistemas microscópicos sofrem alterações apreciáveis quando são mediados. O processo de medida afeta o sistema que se quer medir.

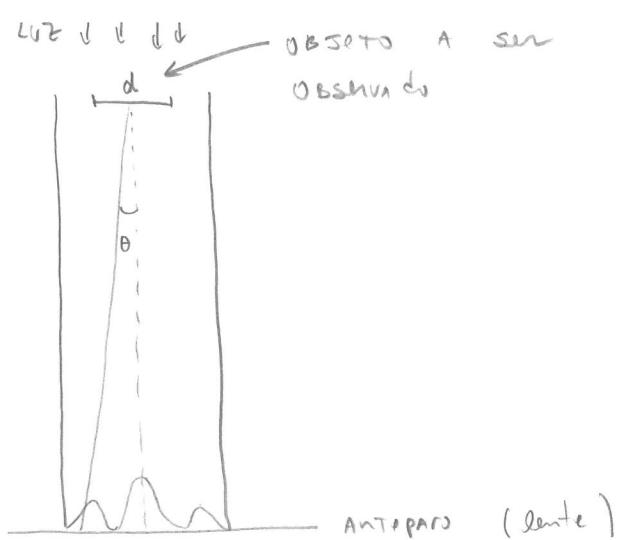
Não se pode medir algumas variáveis simultaneamente com precisão. Se mede a posição e momento linear, os erros totais. Em uma medida da posição e momento linear, as medidas satisfazem

$$\Delta x \Delta p_x \gg \hbar/h$$

$$\hbar = h/2\pi \approx 1.05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Uma ilustração clássica é dada por Bohr com seu microscópio.

Antes de vermos como a ideia de Bohr se aplica, vamos nos lembrar do conceito de resolução de um microscópio.



A luz passando pelas frestas do objeto é como uma fonte dupla. O pico de interferência ocorre em  $x=0$  e quando  $d\sin\theta = n\lambda$ . Para  $n=1$

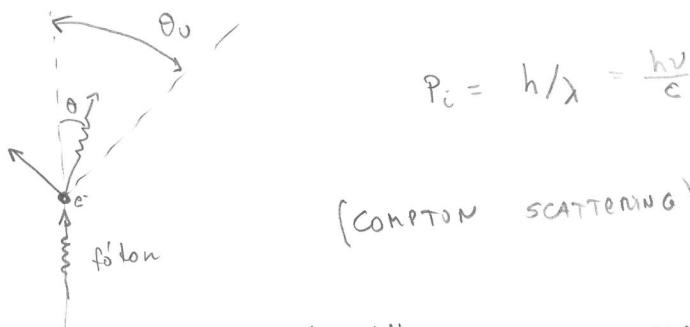
$$\sin\theta = \lambda/d$$

O microscópio tem um ângulo máximo  $\theta_0$ . Seja  $d_0 = \lambda/\sin\theta_0$ .  
Se  $d < d_0$ ,  $\theta > \theta_0$  e não vermos a interferência. Não sabemos dizer se os detalhes do objeto serão observados, pois veremos um único borrão de luz.

$$d_0 = \lambda/\sin\theta_0 = \text{resolução do microscópio}$$

Poderemos ver objetos menores se diminuirmos  $\lambda$ .

Vamos agora observar uma partícula, como um elétron:



O elétron adquire momento devido à colisão.

O fóton encontra no microscópio, possuindo a componente x de seu momento podendo ser  $-\frac{h}{\lambda} \sin\theta$  ou  $+\frac{h}{\lambda} \sin\theta$ . O elítron deve carregar a mesma quantidade de momento (com sinal oposto):

$$\Delta P_x = \frac{2h}{\lambda} \sin\theta$$

Como a resolução do microscópio é  $\lambda/\sin\theta$ , a posição do elítron é incerta e

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

Desse forma, se diminuirmos  $\lambda$  para melhorar a resolução espacial,

aumentamos  $\Delta x$  e vice-versa, pois

$$\Delta P_x \Delta x = 2h = 4\pi\hbar$$

### RELAÇÃO ENERGIA - TEMPO



Para uma partícula livre

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

Se jogarmos um fó-

ton para medir a energia produzimos uma variação  $\Delta E$  no momento e

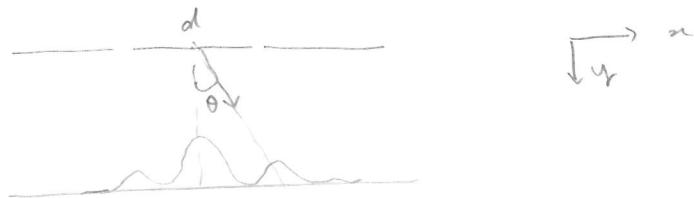
$$\Delta E = \frac{(p_x + \Delta p_x)^2}{2m} - \frac{p_x^2}{2m} = \frac{\Delta p_x \Delta p_x}{m} = \sqrt{n} \Delta p_x$$

Se a medida demorou um tempo  $\Delta t$ , nesse intervalo a partícula andou, de forma que  $\Delta x = \Delta t \sqrt{n}$ ; ou  $\Delta t = \Delta x / \sqrt{n}$ . Assim

$$\Delta E \Delta t = \sqrt{n} \Delta p_x \cdot \frac{\Delta x}{\sqrt{n}} = \Delta p_x \Delta x \Rightarrow \Delta E \Delta t > \frac{\hbar}{2}$$

Uma outra maneira de se verificar o princípio da incerteza é através da propria experiência da fenda dupla (MAX BORN - FÍSICA ATÔMICA , cap. 4-7).

Se o elétron atinge o anteparo, ele passou por um das fendas. O erro na determinação da sua posição é



$$\Delta x = d \cdot \tan \theta$$

Como ele pode atingir o alvo em qualquer posição, a incerteza em seu momento é

$$\Delta p_x = p \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \sin \theta$$

A região mais provável do elétron bateu é até o  $2^\circ$  piez, onde  $\sin \theta = \lambda/d$ . Assim,

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d} = \frac{h}{\Delta x}$$

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

e temos

## VELOCIDADES DE FASE e DE GRUPO : PACOTES DE ONDA

Para um partícula livre, a velocidade de onda

$$\psi(x,t) = A \sin(2\pi x/\lambda - 2\pi v t) ; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad w = 2\pi v$$

e

$$v_f = \lambda v = \frac{h}{p} \frac{E}{h} = \frac{h}{p} \frac{p^2/2m}{h} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

Essa velocidade é chamada de velocidade de fase, e não representa a velocidade dos partículas. Note que  $\psi(x,t)$  acima é totalmente delocalizada, portanto não podemos dizer que  $v_f$  seja o

Para construir um  $\psi(x,t)$  localizado temos que combinar várias ondas simples:

$$\psi(x,t) = \sum_n A_n \cos(k_n x - \omega_n t)$$

onda

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{2\pi}{h} p_n = p_n/h \quad \rightarrow$$

$$p_n = \hbar k_n$$

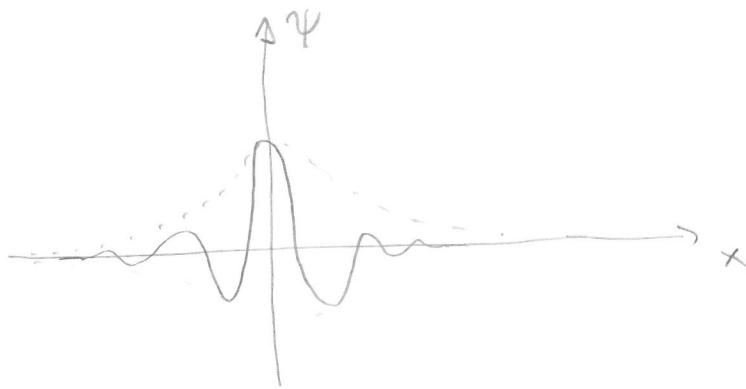
$$\omega_n = 2\pi v_n = \frac{2\pi E_n}{h} = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{p_n^2/2m}{\hbar} = \frac{\hbar k_n^2}{2m}$$

Se temos um contínuo de  $k_n$ 's escrevemos

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \cos(kx - \omega(k)t) dk$$

$$\omega(k) = \hbar k^2/2m$$

A esperança é que consigamos construir  $\Psi(x,t)$  tal que



- 1) os nodos andem com a velocidade da fase, não necessariamente igual a  $v$ .
- 2) o pacote se move como um todo com velocidade  $v$ .

### Exemplo 1

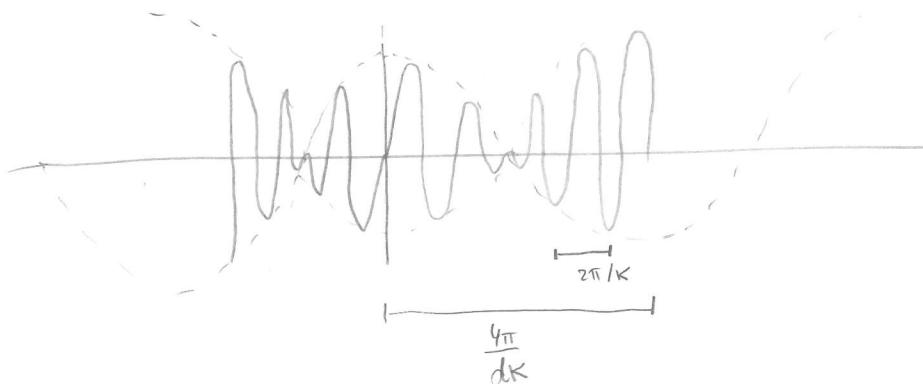
$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$\Psi_1 = \sin(kx - wt)$$

$$\Psi_2 = \sin((k + dk)x - (w + dw)t)$$

$$\text{Usando } \sin A + \sin B = 2 \cos\left(\frac{A-B}{2}\right) \sin\left(\frac{A+B}{2}\right) \quad \text{obtemos}$$

$$\Psi(x,t) = 2 \cos\left(\frac{dk}{2}x - \frac{dw}{2}t\right) \sin(kx - wt)$$



Velocidade de fase

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{v}{2}$$

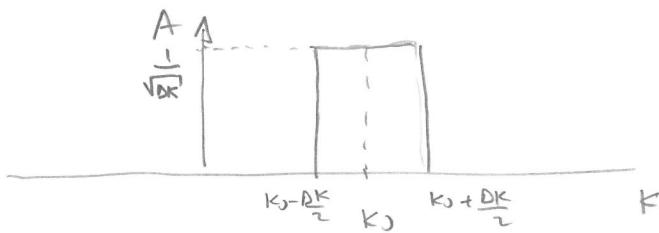
Velocidade de grupo

$$(do envelope) \quad v_g = \frac{dw/k}{dk/2} = \frac{dw}{dk}$$

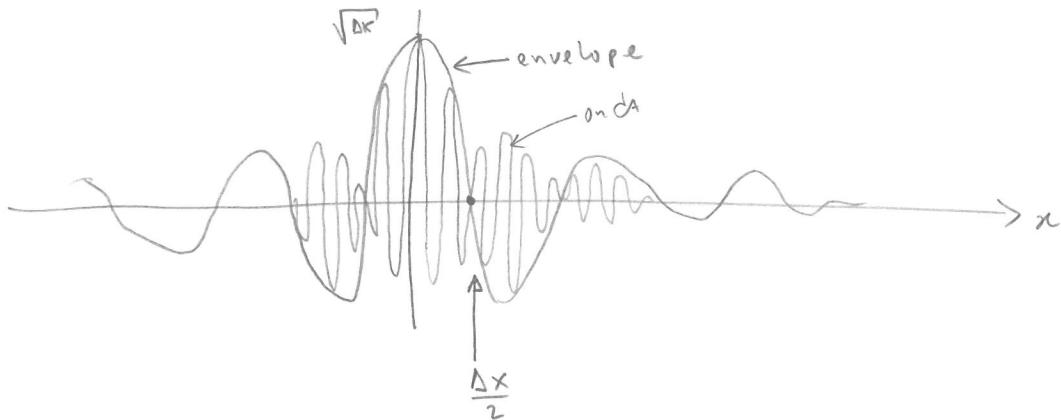
$$\text{com } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \frac{dw}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v.$$

Exemplo 2

Fixando  $t=0$



$$\begin{aligned} \psi(x,0) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \cos kx \, dk = \frac{1}{\pi \sqrt{\Delta k}} \sin kx \Big|_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \\ &= \frac{1}{\pi \sqrt{\Delta k}} \left[ \sin \left( (k_0 + \frac{\Delta k}{2})x \right) - \sin \left( (k_0 - \frac{\Delta k}{2})x \right) \right] \\ &= \cos k_0 x \left( \frac{\sin(\frac{\Delta k x}{2})}{\pi \Delta k / 2} \cdot \sqrt{\Delta k} \right) \end{aligned}$$



Definindo o 1º modo do envelope como  $\frac{\Delta x}{2}$  temos

$$\sin\left(\frac{\Delta k \Delta x}{2}\right) = 0 \quad \frac{\Delta k \Delta x}{2} = \pi$$

$$\frac{1}{2h} \Delta p \Delta x = \pi \quad \Delta p \Delta x = h$$

$$-(k - k_0)^2 / 4 \Delta k^2$$

Exemplo 3

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \Delta k} (2\pi)^{1/4}} e$$

$$(veja que \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)^2 dk = 1)$$

$$\Psi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \Delta k}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{2\sqrt{2\pi \Delta k} (2\pi)^{1/4}} \left[ \int e^{-u^2/(4\Delta k^2) + iux + ik_0 x} + c.c. \right]$$

$$-\frac{u^2}{4\Delta k^2} + iux = -\frac{1}{4\Delta k^2} (u - 2ix\Delta k)^2 - x^2\Delta k^2$$

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi \Delta k} (2\pi)^{1/4}} \sqrt{4\pi} \Delta k \left[ e^{-x^2/\Delta k^2 + ik_0 x} + c.c. \right]$$

$$= \frac{\sqrt{2\Delta k}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-x^2/\Delta k^2} e^{ik_0 x} = \frac{1}{\sqrt{\Delta x} (2\pi)^{1/4}} e^{-x^2/(4\Delta x)} e^{ik_0 x}$$

$$4 \Delta x^2 = \frac{1}{\Delta k^2} \quad \text{ou} \quad \Delta x \Delta k = \frac{\Delta x \Delta p}{h} = 1/h \quad e$$

$$\Delta x \Delta p = \hbar/2$$

Vejá que  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$  para  $K_0=0$ . A função  $A(k)$  representa

o peso de cada momento  $p = \hbar k$  no ponto final. Sua interpretação é que  $|A(k)|^2 dk$  = probabilidade da partícula ter momento entre  $k$  e  $k + dk$ . É como se fosse a função de onda na representação de momento. Mostre que, para  $K_0 \neq 0$ , onde  $\int |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{2}(1 + e^{-K_0^2/2\hbar^2})$ .

As definições precisas das incógnitas é:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} ; \quad \Delta p = \hbar \Delta k$$

onde

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx / \int |\psi(x)|^2 dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 |\psi(x)|^2 dx / \int |\psi(x)|^2 dx$$

$$\langle k \rangle = \int k |A(k)|^2 dk$$

$$\langle k^2 \rangle = \int k^2 |A(k)|^2 dk$$

Exercício: verifique para o exemplo 3 que

$$\langle x \rangle = 0$$

$$\langle k \rangle = K_0$$

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \Delta x$$

$$\sqrt{\langle k^2 \rangle - K_0^2} = \Delta k$$