
Relatividade Restrita - Mecânica Quântica

Prof Jayme F. M. Mendes

Conteúdo

I Relatividade Restrita	1
1 Relatividade Restrita	2
1.1 Introdução	2
1.2 O experimento de Michelson-Morley	2
1.3 Postulados da Relatividade Restrita	2
1.4 Transformação de Lorentz	2
1.5 Dilatação do tempo e contração dos comprimentos	6
1.6 Efeito Doppler relativístico	9
1.7 Composição de velocidades	11
1.8 Momento e massa relativísticos	15
1.9 Energia relativística	18
II Mecânica Quântica	27
2 O quantum de luz	28
2.1 Radiação de corpo negro	28
2.2 Efeito fotoelétrico	42
2.3 A relatividade e o quantum de luz	46
2.4 Efeito Compton	49
2.5 O modelo atômico de Rutherford	52
2.6 Modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio	57
2.7 Raios-X	61
2.8 Produção de pares	64
3 Ondas de matéria	70
3.1 Introdução	70
3.2 Ondas harmônicas e pacotes de onda	70
3.3 Energia de uma partícula livre	73

4 O princípio da incerteza	77
4.1 O princípio da incerteza de Heisenberg	77
5 Equação de Schrödinger	82
5.1 Introdução	82
5.2 Operadores, autovalores e autofunções na mecânica quântica	82
5.3 Equação de Schrödinger	84
5.4 Superposição de estados quânticos	89
5.5 Regras de seleção	93
5.6 Equação de continuidade para a probabilidade	93
5.7 Colapso da função de onda e realidade na mecânica quântica	95
6 Aplicações da equação de Schrödinger	98
6.1 Introdução	98
6.2 Partícula livre em uma dimensão	98
6.3 Poço de potencial finito unidimensional	99
6.4 Poço de potencial infinito	101
6.5 Barreira de potencial finita - Efeito túnel	104
6.6 Partícula em uma caixa cúbica	110
6.7 Oscilador harmônico simples na mecânica quântica	112
7 Átomo de hidrogênio	127
7.1 Equação diferencial azimutal	128
7.2 Equação diferencial radial	130
7.3 Equação diferencial zenital	136
7.4 Orbitais atômicos	140
7.5 Densidade de probabilidade eletrônica no átomo de hidrogênio	142
7.6 Gráficos polares de distribuição de probabilidade	148
7.7 Momento angular do elétron no átomo de hidrogênio	151
7.8 Momento magnético orbital	153
7.9 Efeito Zeeman	154
7.10 O spin do elétron - Experiência de Stern-Gerlach	157
8 Princípio de Exclusão de Pauli	163
8.1 Princípio de exclusão aplicado ao átomo	164
8.1.1 Regra de Hund	164
8.1.2 Configuração eletrônica	165
Referências	168

Parte I

Relatividade Restrita

Capítulo 1

Relatividade Restrita

1.1 Introdução

1.2 O experimento de Michelson-Morley

1.3 Postulados da Relatividade Restrita

1º postulado: As leis da física são as mesmas em todos os referenciais inerciais.

2º postulado: A velocidade da luz no vácuo é a mesma em todos os referenciais inerciais.

1.4 Transformação de Lorentz

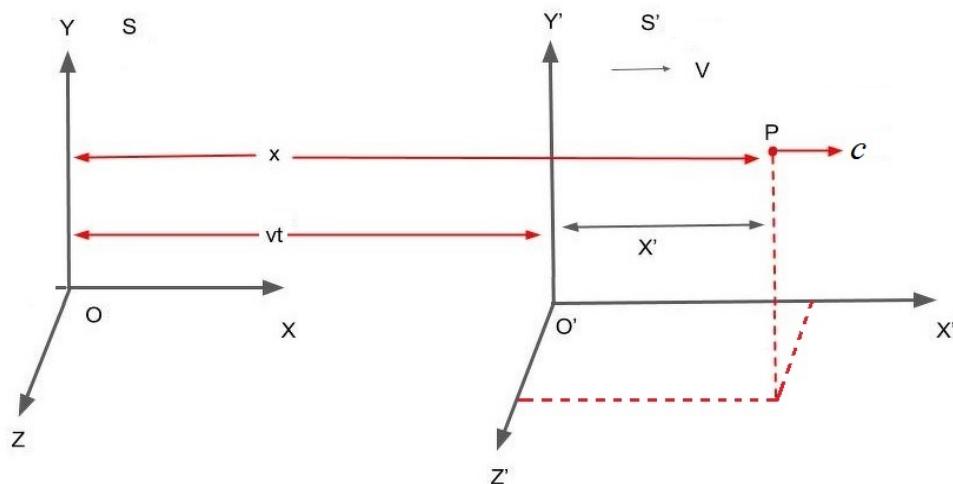


Figura 1.1: Referenciais inerciais S e S' com velocidade relativa v na direção do eixo x .

Considere a Fig.[1.1]. Como só há movimento relativo na direção dos eixos x e x' , então as coordenadas y e y' devem ser iguais, o que vale também para as coordenadas z e z' .

Para as coordenadas x e x' , devemos levar em conta o movimento relativo. Portanto, fica evidente que elas terão valores distintos. Na relatividade de Galileu, a equação que conecta x e x' é obtida da leitura direta da figura:

$$x = vt + x'$$

ou

$$x' = x - vt$$

Entretanto, estamos lidando com um postulado que afirma que a velocidade da luz é a mesma em todos os referenciais. Portanto, devemos ser mais cautelosos com a nossa intuição física a partir daqui. O que podemos afirmar a priori é que, do ponto de vista do referencial S , a coordenada do ponto P é dada por vt mais uma quantidade associada à coordenada x' . Dito isto, podemos escrever:

$$x = vt + f(x')$$

onde $f(x')$ é uma função de x' que dá a medida da coordenada x' para um observador em S . E se o ponto P for deslocado, por exemplo, para a coordenada $2x'$? Neste caso, a seguinte coordenada x seria obviamente dada por

$$x = vt + f(2x')$$

Mas $2x'$ é duas vezes a quantidade anterior para o ponto P no referencial S' , o que nos leva a pensar que a quantidade a ser acrescentada para a obtenção da coordenada x em S deve ser também duas vezes aquela que foi dada ao ponto P, ou seja, devemos supor que $f(2x') = f(x') + f(x') = 2f(x')$:

$$f(2x') = 2f(x')$$

Estendendo o que foi dito acima para um fator arbitrário b , ou seja, se a coordenada x' é alterada de x' para bx' , onde b é uma constante, podemos então escrever:

$$f(bx') = bf(x')$$

Dividindo a equação acima por bx' , vem:

$$\frac{f(bx')}{bx'} = \frac{f(x')}{x'}$$

Uma vez que para $b \neq 1$, bx' e x' serão dois valores distintos e arbitrários, a equação acima mostra que a razão $f(x')/x'$ é igual a uma constante:

$$\frac{f(x')}{x'} = \frac{1}{\gamma} = cte.$$

ou

$$f(x') = \frac{x'}{\gamma}$$

Substituindo o resultado acima chegamos a:

$$x = vt + \frac{x'}{\gamma}$$

A constante γ deve ser positiva para que a quantidade $f(x') = x'/\gamma$ seja positiva se $x' > 0$ e vice-versa.

É mais usual escrever a equação acima como:

$$x' = \gamma(x - vt)$$

O primeiro postulado nos permite escrever uma equação análoga para a equação que obtém a coordenada x em função de x' e t' , o que é nada mais do que a obtenção de uma equação análoga a partir de observações opostas em relação aos referenciais S e S' . Ou seja, a equação deve ser dada por:

$$x = \gamma(x' + vt')$$

onde trocamos v por $-v$ pois do ponto de um outro referencial o sentido de deslocamento ao longo do eixo tem o seu sentido invertido.

Para o cálculo de γ podemos lançar mão de qualquer experimento imaginado, desde que obedeça aos postulados da relatividade. Neste sentido, considere agora um caso particular em que o ponto P represente um fóton deslocando-se no sentido positivo do eixo x sendo que $x = 0$ em $t = 0$. Neste caso, a sua coordenada x no instante t é dada por

$$x = ct$$

Da mesma forma, se as origens O e O' coincidiam em $t = t' = 0$, a coordenada x' do fóton no instante t' será dada por:

$$x' = ct'$$

Substituindo estas expressões nas equações que relacionam x e x' , vem:

$$ct' = \gamma(ct - vt) = \gamma(c - v)t$$

e

$$ct = \gamma(ct' + vt') = \gamma(c + v)t'$$

Multiplicando as equações acima, vem:

$$c^2tt' = \gamma^2(c^2 - v^2)tt'$$

ou

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Das equações * e **, reproduzidas abaixo, podemos escrever a equação que dá a transformada para os instantes temporais t e t' :

$$x' = \gamma(x - vt)$$

$$x = \gamma(x' + vt')$$

Isolando t' a partir das equações acima, temos

$$\begin{aligned} t' &= \frac{1}{v} \left(\frac{x}{\gamma} - x' \right) = \frac{1}{v} \left(\frac{x}{\gamma} - \gamma(x - vt) \right) = \\ &= \gamma \left(\frac{x}{v\gamma^2} - (x/v - t) \right) = \gamma \left(\frac{x}{v}(1 - v^2/c^2) - (x/v - t) \right) \end{aligned}$$

Finalmente, a equação fica dada por

$$t' = \gamma(t - vx/c^2)$$

Resumindo, a Transformação de Lorentz fica dada pelas quatro equações abaixo:

$$y' = y$$

$$z' = z$$

$$x' = \gamma(x - vt)$$

$$t' = \gamma(t - vx/c^2) \quad ; \quad \gamma = \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

e a Transformação de Lorentz inversa é obtida diretamente pela aplicação do primeiro postulado¹, bastando para tal trocar as coordenadas com 'linhas' pelas 'sem linhas' e fazendo $v \rightarrow -v$:

¹Obviamente, o mesmo resultado pode ser obtido algebraicamente, porém, de forma mais trabalhosa.

$$y = y'$$

$$z = z'$$

$$x = \gamma(x' + vt')$$

$$t = \gamma(t' + vx'/c^2) ; \quad \gamma = \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

a transformação inversa é útil em alguns problemas, pois simplifica os cálculos.

1.5 Dilatação do tempo e contração dos comprimentos

Dilatação do tempo

A Fig.[1.2] mostra um pulso de luz indo da lanterna ao teto e retornando para o ponto de origem em um trem em movimento retilíneo em velocidade constante. Para o observador no trem (ver figura (a)), o tempo entre a saída da luz da lanterna e a chegada na mesma se dá no mesmo ponto do espaço no seu referencial (referencial do trem). A este intervalo de tempo dá-se o nome de *tempo próprio* e seu valor é dado por:

$$\Delta t = \frac{2h}{c}$$

Para o observador na plataforma (ver figura (b)), os eventos de chegada e saída do feixe de luz não se dão no mesmo ponto do espaço, pois enquanto a luz faz o seu percurso, o trem percorreu a distância $v\Delta t'$. No mesmo intervalo de tempo, a luz para este observador percorreu a distância $2S$, sendo S para ir da lanterna ao espelho e S no caminho inverso. Uma vez que ela gasta a metade do intervalo de tempo $\Delta t'$ em cada um desses dois percursos com velocidade c , temos, do teorema de Pitágoras o seguinte valor para S :

$$S^2 = \left(\frac{c\Delta t'}{2}\right)^2 = h^2 + \left(\frac{v\Delta t'}{2}\right)^2$$

Das equações acima, vem:

$$\left(\frac{c\Delta t'}{2}\right)^2 = \left(\frac{c\Delta t}{2}\right)^2 + \left(\frac{v\Delta t'}{2}\right)^2$$

ou

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

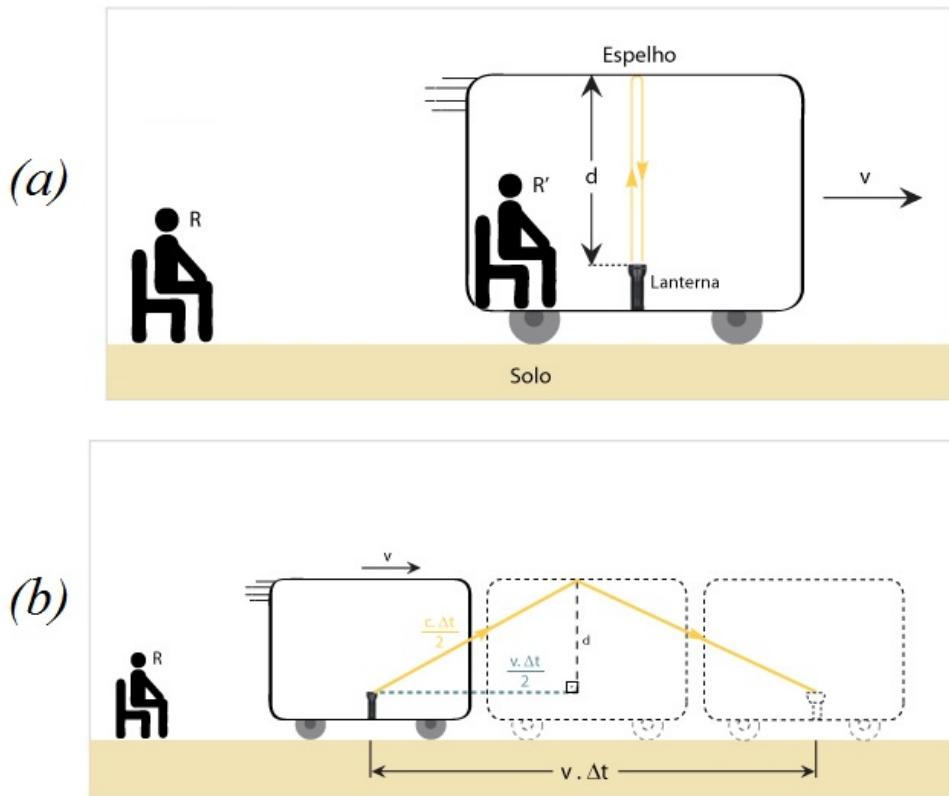


Figura 1.2: Dilatação do tempo: observação do tempo de percurso de um feixe de luz por observadores em dois referenciais inerciais. a) O observador no trem mede o tempo próprio do percurso da luz (eventos de saída e chegada do feixe na mesma coordenada horizontal). b) O observador na plataforma observa os mesmos eventos em coordenadas distintas.

Contração dos comprimentos

A Fig.[1.3] mostra um trem em movimento com velocidade constante v e no seu interior uma lanterna emite um feixe de luz na direção do movimento do trem. A luz no interior do trem percorre uma distância L_0 até ser refletida de volta à lanterna pelo espelho.

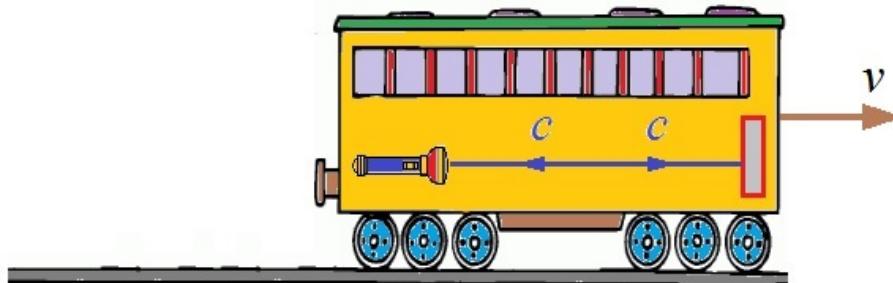


Figura 1.3: Contração dos comprimentos.

O tempo de ida e volta para um observado no interior do trem é dado por:

$$\Delta t = \frac{2L_\circ}{c}$$

Observe que, como a saída e a chegada do feixe de luz se dá no mesmo ponto no referencial do trem, Δt é um intervalo de tempo próprio.

Para um observador na plataforma, tempo de ida da luz até o espelho é dado por:

$$\Delta t'_{ida} = \frac{L}{c-v}$$

e o de volta igual a

$$\Delta t'_{volta} = \frac{L}{c+v}$$

Portanto, o intervalo de tempo para este observador é dado por:

$$\Delta t' = \frac{L}{c-v} + \frac{L}{c+v} = \frac{2Lc}{c^2 - v^2} = \frac{2L}{c} \frac{1}{1 - v^2/c^2}$$

Das equações acima, vem:

$$\frac{\Delta t}{\Delta t'} = \frac{2L_\circ}{c} \frac{c}{2L} (1 - v^2/c^2) = \frac{L_\circ}{L} (1 - v^2/c^2)$$

Entretanto, por ser Δt um intervalo de tempo próprio, temos:

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

ou

$$\frac{\Delta t}{\Delta t'} = \sqrt{1 - v^2/c^2} = \frac{L_\circ}{L} (1 - v^2/c^2)$$

de onde vem o resultado conhecido como *contração de Lorentz-Fitzgerald*, que mostra que $L < L_\circ$ quando $v > 0$:

$$L = L_\circ \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Deve-se frisar que esta contração só ocorre para comprimentos paralelos à velocidade relativa entre os referenciais. Para tanto, basta ver da transformação de Lorentz que, em direções ortogonais à direção da velocidade relativa, $y = y'$, o que resulta em $\Delta y = \Delta y'$.

1.6 Efeito Doppler relativístico

Efeito Doppler relativístico longitudinal

Na figura abaixo está representada uma onda harmônica de comprimento de onda natural λ emitida pela fonte F e observada em \mathcal{O} , que se desloca na mesma direção e sentido da onda e com velocidade relativa v em relação à F. Uma vez que não há sentido em dizer que um dado referencial tem movimento relativo ao vácuo, qualquer alteração observada em relação à frequência natural da fonte não poderá depender de outra velocidade, senão a relativa entre a fonte e o observador.

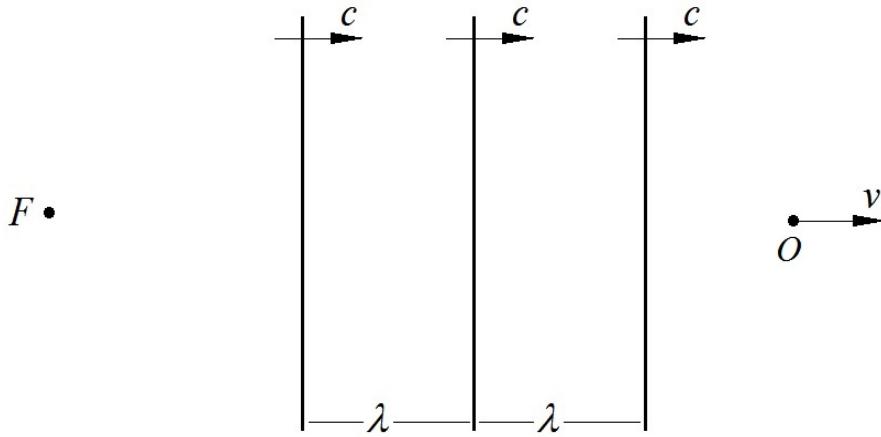


Figura 1.4: Efeito relativístico longitudinal.

Se para um observador no referencial da fonte luminosa F o período da onda é dado por τ , então:

$$\tau = \frac{\lambda}{c}$$

O período τ' da onda para o observador \mathcal{O} é um intervalo de tempo próprio. Então, para o observador no referencial F da fonte, este intervalo de tempo será dado por:

$$\tau'_F = \gamma(v)\tau'$$

Por outro lado, τ'_F também é igual ao intervalo de tempo, em seu referencial, que duas frentes de onda separadas por λ passam por \mathcal{O} :

$$\tau'_F = \frac{\lambda}{c - v}$$

onde $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$

Das equações acima, vem:

$$\gamma(v)\tau' = \frac{c\tau}{c-v}$$

Mas $f = 1/\tau$ e $f' = 1/\tau'$, então, após alguns cálculos, temos a equação para frequência no efeito Doppler longitudinal para afastamento:

$$f' = \sqrt{\frac{1-v/c}{1+v/c}} f$$

Para frequência no efeito Doppler longitudinal para aproximação, basta fazer $v \rightarrow -v$:

$$f' = \sqrt{\frac{1+v/c}{1-v/c}} f$$

Efeito Doppler relativístico transversal

Neste caso, o observador \mathcal{O} estaria com velocidade na direção ortogonal a de propagação da onda. A única diferença em relação às equações acima seria que

$$\tau'_F = \frac{\lambda}{c}$$

de onde vem:

$$f' = \gamma f$$

ou

$$f' = \frac{f}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

Efeito Doppler relativístico oblíquo

$$\tau = \frac{\lambda}{c}$$

$$\tau'_F = \gamma(v)\tau'$$

$$\tau'_F = \frac{\lambda}{c - v \cos \theta}$$

$$f' = f \frac{1 - \frac{v}{c} \cos \theta}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

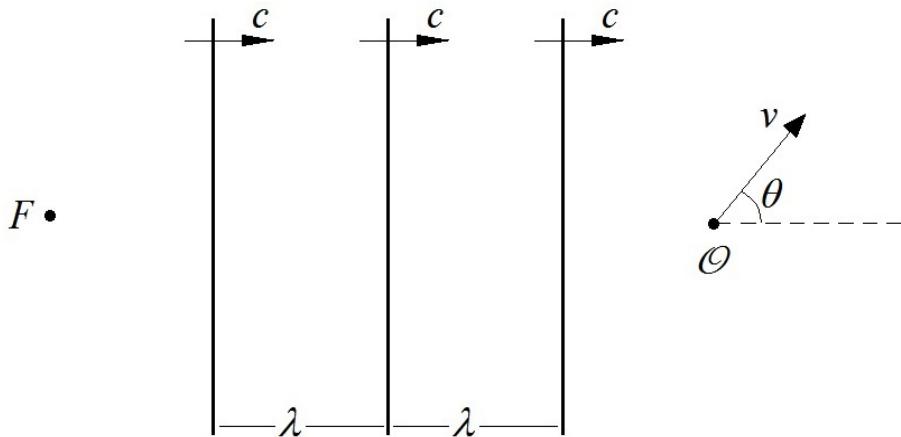


Figura 1.5: Efeito relativístico oblíquo.

1.7 Composição de velocidades

O fator $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ nos leva a uma conclusão óbvia e fundamental; a de que a velocidade v entre dois referenciais não pode ultrapassar a velocidade da luz c ; caso contrário, γ seria imaginário. Mas v é a velocidade relativa entre dois entes físicos quaisquer, pois sempre podemos pensar no referencial S' como o de uma partícula se deslocando em relação a uma outra partícula em um referencial S . Ou seja, a equação mostra que, por mais que tentemos aumentar a nossa velocidade em relação a um outro ente físico qualquer, nunca mediremos a sua velocidade como sendo maior do que c .

$$u_1 = 0,6c \quad u_2 = 0,5c$$

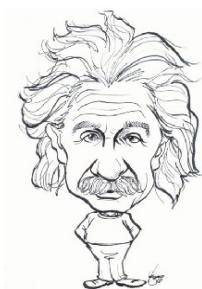


Figura 1.6:

Observe na Fig.[1.6] uma partícula que se desloca horizontalmente para a esquerda com velocidade $u_1 = 0,6c$ e uma outra partícula com velocidade $u_2 = 0,5c$, na mesma direção mas no sentido oposto. Nenhum dos dois objetos está se movendo com velocidade acima de

c. Apesar de você observar a distância entre elas aumentar a uma taxa igual a $1,1c$, esta medida não representa a velocidade de deslocamento de qualquer objeto físico, portanto, não viola a limitação imposta por γ .

Então, surge a pergunta: qual é a velocidade relativa entre as duas partículas? Em outras palavras, qual é a velocidade da partícula 1 observada a partir de um referencial na partícula 2 e vice-versa? Segundo a transformação de Galileu, a resposta seria $1,1c$, mas, neste caso, teríamos uma violação dos possíveis valores de γ . Portanto, a velocidade relativa deve ser obtida por uma nova lei de adição de velocidades.

Considere duas partículas, A e B, com velocidades conhecidas para um observador em S . A partícula A tem velocidade vetorial igual a \mathbf{u} (Fig.[1.7]) e a velocidade da partícula B é igual a \mathbf{v} , também para um observador em S , pois está em repouso na origem O' do referencial S' . Sendo assim, temos duas partículas com velocidades conhecidas em relação ao referencial S .

Qual é, então, a velocidade relativa entre as duas partículas? Uma vez que a partícula B está fixa em S' , a velocidade relativa entre as partículas será igual à velocidade da partícula A em relação ao referencial S' , dada por \mathbf{u}' .

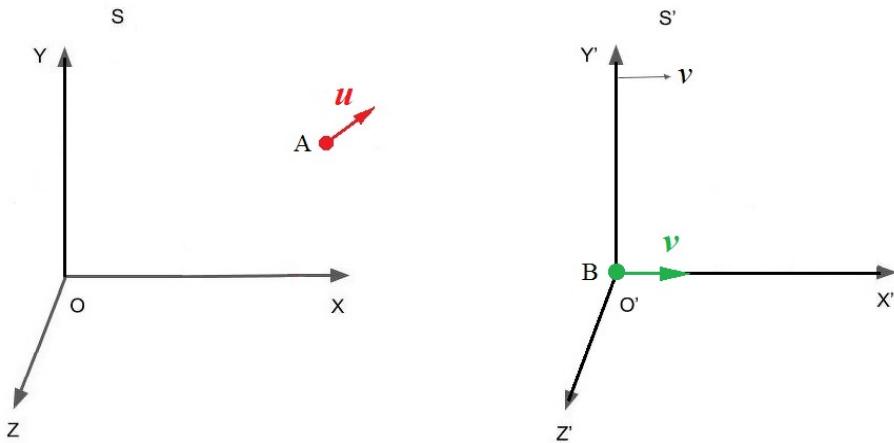


Figura 1.7:

Vamos calcular cada uma das componentes de \mathbf{u}' .

- Cálculo de u'_x

Da transformação de Lorentz temos: $x' = \gamma(x - vt)$, então:

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{d(\gamma(x - vt))}{dt} \frac{dt}{dt'} = \gamma(dx/dt - v) \frac{dt}{dt'} = \gamma \frac{u_x - v}{dt'/dt}$$

O cálculo de dt/dt' pode ser feito a partir da equação para o tempo na transformação de Lorentz:

De $t' = \gamma(t - vx/c^2)$, vem

$$\frac{dt'}{dt} = \gamma(1 - v(dx/dt)/c^2) = \gamma(1 - u_x v/c^2)$$

Logo,

$$u'_x = \frac{u_x - v}{1 - u_x v/c^2}$$

- Cálculo de u'_y e u'_z

Da transformação de Lorentz, temos:

$$y' = y$$

então

$$u'_y = \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{dt'} = \frac{dy}{dt} \frac{dt}{dt'} = \frac{u_y}{dt'/dt}$$

Usando a expressão calculada para dt'/dt obtida acima para o cálculo de u'_x , temos:

$$u'_y = \frac{1}{\gamma} \frac{u_y}{1 - u_x v/c^2}$$

Uma vez que a expressão para a transformação de z' é análoga a de y' , então:

$$u'_z = \frac{1}{\gamma} \frac{u_z}{1 - u_x v/c^2}$$

— — — — — >>> mostrar que u_x máximo é $< c$

Problema resolvido

Um aluno está em uma nave (referencial S) que viaja a uma velocidade v relativa ao professor (referencial S'). Em $t = t' = 0$ a nave passa pelo professor e o aluno inicia uma prova de física. Em $t = \tau$, um pulso de luz é emitido pelo aluno até o professor e é refletido de volta à nave, quando então a prova é encerrada automaticamente. Sabendo que a velocidade da luz é igual a c e que $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$, calcule a duração da prova no referencial do professor.

Solução

O intervalo de tempo próprio no referencial do aluno, associado ao tempo da prova, é dado pelos seguintes eventos no espaço-tempo: o instante inicial, quando o professor passa pelo aluno; o instante final, quando o pulso de luz retorna à nave.

Sendo assim, o tempo da prova para o professor ($\Delta t'$) é dado em função do tempo da prova para o aluno, de acordo com a equação para intervalo de tempo próprio:

$$\boxed{\Delta t' = \gamma \Delta t}$$

onde Δt é o tempo de prova para o aluno.

Cálculo de Δt :

$$\Delta t = \tau + \tau_1 + \tau_2$$

τ_1 : tempo da luz para ir do aluno ao professor

τ_2 : tempo da luz para ir do professor ao aluno

L_1 : distância entre o aluno e o professor no momento em que o pulso de luz parte da nave para o professor

L_2 : distância entre o aluno e o professor no momento em que o pulso de luz parte do professor para a nave

$$\tau_1 = \frac{L_1}{c - v} = \frac{v\tau}{c - v}$$

$$\tau_2 = \frac{L_2}{c} = \frac{v(\tau + \tau_1)}{c} = \frac{1}{c} \left(v\tau + v \frac{v\tau}{c - v} \right) = \frac{v\tau}{c - v}$$

Obs.: $\tau_1 = \tau_2$, pois no referencial do aluno a luz percorre a mesma distância com a mesma velocidade, tanto na ida quanto na volta. O mesmo não ocorre no referencial do professor.

Dos resultados acima, vem:

$$\Delta t = \tau + \frac{v\tau}{c - v} + \frac{v\tau}{c - v}$$

ou

$$\Delta t = \left(\frac{c + v}{c - v} \right) \tau = \left(\frac{1 + v/c}{1 - v/c} \right) \tau$$

Logo,

$$\boxed{\Delta t' = \left(\frac{1 + v/c}{1 - v/c} \right) \gamma \tau}$$

1.8 Momento e massa relativísticos

De acordo com a física newtoniana, uma partícula sob a ação de uma força poderia ser acelerada indefinidamente, sem limites para a velocidade. Entretanto, de acordo com a relatividade, a velocidade u de uma partícula não pode ser maior do que c , conforme foi visto na seção anterior. O que impediria a partícula de atingir a velocidade da luz? É o que vamos ver a seguir.

Considerando, por exemplo, uma força constante F_0 na direção do eixo x , a velocidade escalar em função do tempo t para uma partícula de massa m com velocidade inicial nula, calculada segundo a expressão da força como $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, é dada por:

$$u = \frac{F_0}{m}t$$

Observe que, se assim for, não haverá limite para a velocidade. Ela crescerá indefinidamente com o tempo t e seu valor atingirá c quando

$$t = \frac{mc}{F_0}$$

Então, para $t > mc/F_0$, $v > c$.

Sendo assim, como conciliar a aplicação da força sobre uma partícula ao limite da velocidade da luz? A hipótese mais plausível é que a medida de inércia da partícula aumente conforme a sua velocidade cresça. Uma vez que a medida de inércia é dada pela massa m , podemos suspeitar que o seu valor aumente com a velocidade para impedir que a sua velocidade exceda o valor de c .

Do que foi dito acima, iremos, daqui em diante, descrever a massa de uma partícula associada como uma função da sua velocidade v : $m = m(v)$. Deve-se enfatizar que o que foi dito acima é apenas uma hipótese a ser comprovada ou refutada. É o que iremos analisar a seguir.

Massa e energia relativísticas

Nesta seção iremos obter a função que dá a massa inercial m em função de sua velocidade v para uma partícula de massa de repouso m_0 .

A Fig.[1.8] mostra uma partícula de massa de repouso m_0 com velocidade constante $u' = u'_y$ no referencial S' . Vista do referencial S , a partícula tem uma componente da velocidade no eixo x , dada por $u_x = v$, componente y dada por u_y e velocidade absoluta igual a $u = \sqrt{v^2 + u_y^2}$.

Da definição de momento linear, podemos escrever as expressões de p_y e p'_y :

$$p_y = m(u)u_y \quad ; \quad p'_y = m'(u')u'_y$$

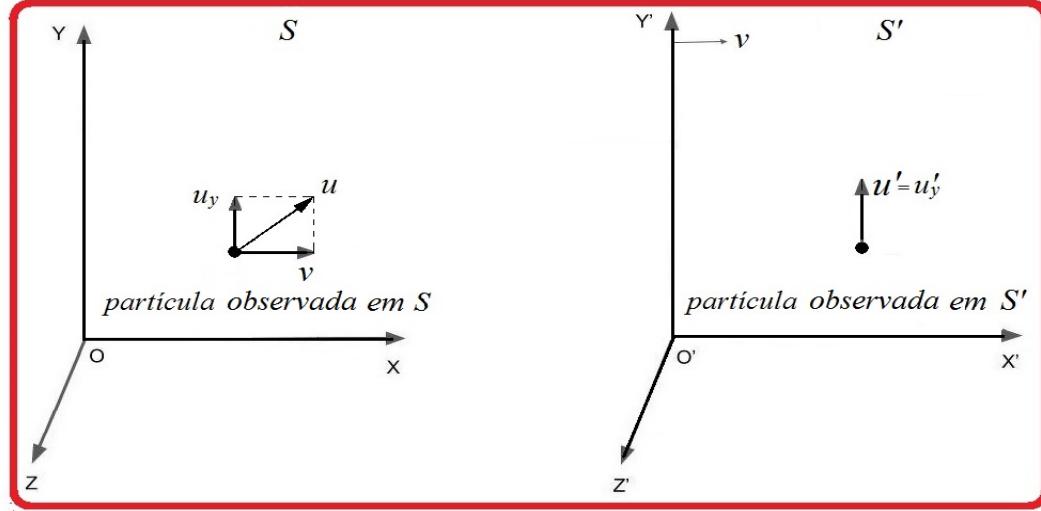


Figura 1.8: Uma partícula observada em dois referenciais de Lorentz: em \$S'\$ a partícula tem velocidade constante \$\mathbf{u}' = u'_y \hat{y}\$; em \$S\$ a partícula tem velocidade constante \$\mathbf{u} = u_x \hat{x} + u_y \hat{y}\$.

onde \$m\$ e \$m'\$ são, por hipótese, as massas nos referenciais \$S\$ e \$S'\$.

Sabendo que \$y = y'\$, a componente \$u_y\$ da partícula no referencial \$S\$ fica dada por:

$$u_y = \frac{dy}{dt} = \frac{dy'}{dt} = \frac{dy'}{dt'} \frac{dt'}{dt}$$

Mas \$dy'/dt' = u'_y\$ e, de acordo com a transformação de Lorentz, \$dt' = dt/\gamma\$ (verifique!), de onde vem:

$$u_y = \frac{dy}{dt} = \frac{1}{\gamma} u'_y$$

Substituindo o resultado acima em \$p_y\$, temos:

$$p_y = \frac{1}{\gamma} m(u) u'_y$$

Tomando a razão entre \$p_y\$ e \$p'_y\$, vem:

$$\frac{p'_y}{p_y} = \frac{m'(u') u'_y}{m(u) u'_y / \gamma} = \gamma \frac{m'(u')}{m(u)}$$

As componentes \$p'_y\$ e \$p_y\$ não são afetadas pelo movimento relativo entre os referenciais \$S\$ e \$S'\$, pois esses referenciais têm movimento relativo apenas na direção do eixo \$x\$. O argumento deve-se ao fato de que um incremento no momento total da partícula em relação ao referencial \$S\$, devido ao movimento relativo com velocidade \$v\$ ao longo do eixo \$x\$, altera a componente \$p_x\$ do momento em \$S\$, mas não a componente do momento \$p_y\$, pois os eixos \$x\$ e \$y\$ são ortogonais entre si.

Do que foi dito acima, podemos escrever que $p'_y = p_y$, de onde vem:

$$m(u) = \gamma m'(u')$$

Tomando o limite em que $u'_y = \gamma u_y \rightarrow 0$, as velocidades u' e u e a massa m' passarão a ser dadas por:

$$\begin{aligned} u' &= u'_y \rightarrow 0, \\ u &= \sqrt{v^2 + u_y^2} \rightarrow v, \text{ e} \\ m'(u') &\rightarrow m'(0) = m_0. \end{aligned}$$

Ao tomar este limite, a partícula estará em repouso no referencial S' e deslocando-se com velocidade v em relação ao referencial S . Portanto, as massas em cada referencial passarão a ser dadas por m_0 em S' e $m(v)$ em S , de acordo com a seguinte equação:

$$m(v) = \gamma m_0$$

ou

$$m(v) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

A equação acima nos diz que uma partícula de massa de repouso m_0 com velocidade v apresenta um valor maior devido ao fator $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Portanto, a medida de inércia, dada pela massa inercial m , aumenta com a velocidade da partícula até o limite $v \rightarrow c$. Neste limite, a massa m tende ao infinito, evidenciando uma barreira natural para que qualquer partícula material atinja a velocidade da luz.

A curva abaixo mostra m versus v ; observe a assíntota vertical em $v = c$ que limita a velocidade máxima possível, quando $m \rightarrow \infty$.

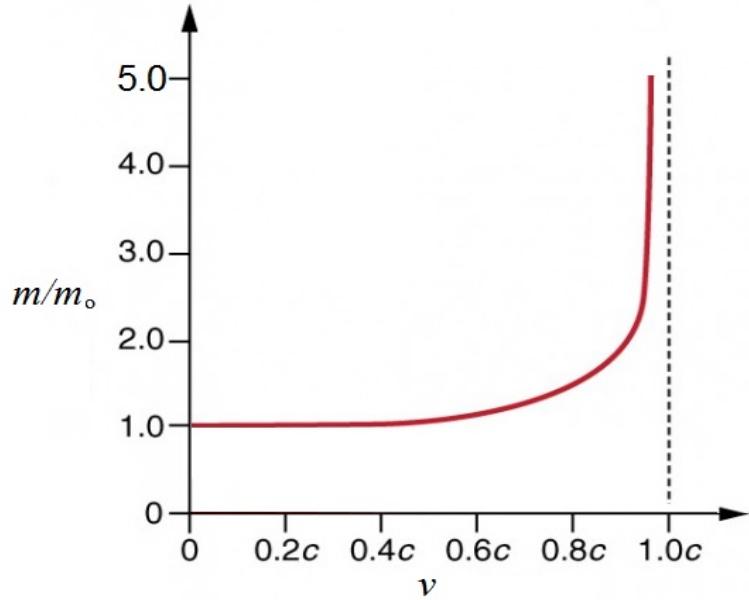


Figura 1.9: Curva da massa relativística em função da velocidade v .

1.9 Energia relativística

Vimos acima que a medida de inércia de um corpo de repouso m_0 aumenta com a velocidade de acordo com a equação $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Sendo assim, para uma partícula livre com velocidade v qualquer, qual seria a expressão matemática para a sua energia cinética? Sabendo que a expressão não relativística para a energia cinética é dada por

$$K = \frac{1}{2}mv^2 ,$$

será que basta escrever a equação na forma abaixo?

$$K = \frac{1}{2}mv^2 \stackrel{?}{=} \frac{1}{2} \frac{m_0v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Para responder a essa pergunta, o melhor caminho, como sempre, é partir das definições e fundamentos físicos. Neste caso, devemos usar o teorema trabalho energia-cinética $dK = dW$:

$$dK = dW = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot d\mathbf{r} = d\mathbf{p} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = d\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$$

ou

$$dK = d\mathbf{p} \cdot \mathbf{v} = d(m\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} = \frac{d(m^2v^2)}{2m}$$

Mas m é dada por:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad \therefore \quad m^2v^2 = c^2(m^2 - m_0^2)$$

então,

$$dK = c^2 \frac{d(m^2 - m_o^2)}{2m} = c^2 \frac{2mdm}{2m} = c^2 dm$$

Integrando do repouso até a velocidade v , vem:

$$\int_{K_o=0}^K dK = c^2 \int_{m_o}^m dm$$

onde fizemos $K_o = 0$, pois, por definição, a energia cinética de uma partícula em repouso é nula.

O resultado final para K fica igual a

$$K = mc^2 - m_o c^2 \quad (1.9.1)$$

Portanto, a equação para a energia cinética na relatividade em nada se assemelha à equação não relativística. Por outro lado, uma vez que a expressão clássica dá excelentes resultados quando $v \ll c$, a equação acima deve-se reduzir a ela nestes limites de velocidade.

Reescrevendo a equação acima a partir da expressão da massa relativística, temos:

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

Para $v \ll c$, o termo $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ pode ser aproximado a partir da série binomial, $1/\sqrt{1 - v^2/c^2} \approx 1 + (1/2)v^2/c^2$, de onde vem:

$$K = \left[\left(1 + \frac{v^2}{2c^2} \right) - 1 \right] m_o c^2$$

ou

$$K = \frac{1}{2} m_o v^2 ; \quad v \ll c$$

Como esperado, a expressão relativística para a energia cinética concorda com a expressão clássica para velocidades não relativísticas.

Energia relativística

Voltemos agora à Eq.[1.9.1], $K = mc^2 - m_o c^2$.

Da mesma forma que a expressão da energia cinética clássica pode ser escrita como $K = mv^2/2 = mv^2/2 - 0$, onde $E = mv^2/2$ é a energia da partícula com velocidade v e

$E_o = 0$ é a energia quando a partícula está em repouso, o mesmo pode ser interpretado em relação às parcelas na expressão relativística para a energia cinética:

$$K = \underbrace{mc^2}_E - \underbrace{m_o c^2}_{E_o}$$

Sendo assim,

$$E = mc^2$$

é a energia relativística da partícula com velocidade v , enquanto

$$E_o = m_o c^2$$

é a energia de repouso de uma partícula com massa de repouso m_o .

A energia $E_o = m_o c^2$, por ser maior do que zero, mostra que a matéria possui energia pelo simples fato de existir.

Representações para a energia $E = mc^2$

Uma vez que $K = mc^2 - m_o c^2$, vem:

$$mc^2 = K + m_o c^2 \quad \text{ou} \quad E = K + E_o$$

Portanto, a energia $E = mc^2$ é a energia total de uma partícula livre: a soma da energia cinética com a energia de repouso.

Energia relativística em função do momento

A descrição da energia $E = mc^2$ a partir do momento $p = mv$ pode ser obtida a partir dos seguintes cálculos:

$$E^2 = m^2 c^4 - m_o^2 c^4 + m_o^2 c^4 = \frac{m_o^2}{1 - v^2/c^2} c^4 - m_o^2 c^4 + m_o^2 c^4 = \underbrace{\frac{m_o^2 v^2}{1 - v^2/c^2} c^2}_{p^2 c^2} + m_o^2 c^4$$

ou

$$E^2 = p^2 c^2 + m_o^2 c^4$$

Problema resolvido

Uma partícula de massa de repouso m_o desloca-se com velocidade v e efetua uma colisão totalmente inelástica com outra partícula idêntica e inicialmente em repouso. Determine a massa de repouso da partícula final.

Solução

- Conservação de energia total relativística:

$$m_o c^2 + \gamma m_o c^2 = \gamma' m'_o c^2$$

- Conservação de momento relativístico:

$$\gamma m_o v = \gamma' m'_o v'$$

Das equações acima, vem:

$$v' = \frac{\gamma v}{1 + \gamma} ; \quad \gamma' = \sqrt{\frac{1 + \gamma}{2}}$$

Então:

$$\gamma m_o v = \sqrt{\frac{1 + \gamma}{2}} m'_o \frac{\gamma v}{1 + \gamma}$$

ou

$$m'_o = \sqrt{2(1 + \gamma)} m_o$$

Observe que $m'_o > 2m_o$, evidenciando que parte da energia cinética inicial foi convertida em energia na forma de matéria.

Problemas

1) Um trem ultra rápido, com 700 m de comprimento de repouso, passa por uma estação fechada. De acordo com o chefe da estação, o comprimento desta é de 500 m e o trem tem exatamente a mesma extensão da estação ao passar por ela.

a) Calcule a velocidade do trem.

b) Qual é o comprimento da estação de acordo com o maquinista?

2) As coordenadas espaço-tempo de dois eventos medidas pelo referencial com origem em O são dadas por: $x_1 = 6 \cdot 10^4\text{ m}$, $y_1 = z_1 = 0\text{ m}$, $t_1 = 10^{-4}\text{ s}$ e $x_2 = 12 \cdot 10^{-4}\text{ m}$, $y_2 = z_2 = 0$, $t_2 = 2 \cdot 10^{-4}\text{ s}$.

Qual deve ser a velocidade de um referencial com origem em O' com respeito a O se o primeiro referencial (origem O') mede os dois eventos ocorrendo simultaneamente? Dê a sua resposta em função de v/c . Esboce um diagrama dos dois referenciais.

Dado: $c = 3 \cdot 10^8\text{ m/s}$.

3) Uma partícula de massa de repouso m_0 desloca-se com velocidade igual à 60% da velocidade da luz e efetua uma colisão totalmente inelástica com um corpo de massa de repouso idêntica e em repouso. Calcule:

a) a velocidade final da partícula resultante; b) a massa desta partícula em repouso.

4) Uma partícula de massa de repouso m_0 e carga q é acelerada de $t_0 = 0$ a t , a partir do repouso, sob a ação de um campo elétrico prescrito: $E = E_0 e^{\alpha t}$ ($\alpha \in \mathbb{R}_+^*$).

a) Calcule a dependência da velocidade v da partícula para um instante arbitrário t .

b) Obtenha o valor de v para quando $t \rightarrow \infty$. Explique o resultado.

c) Reescreva o resultado do item (a) para valores em que $c \rightarrow \infty$. Este resultado está de acordo com a física newtoniana?

5) Em um referencial \mathcal{S} , em repouso, a equação de um círculo é dada por $x^2 + y^2 = a^2$. Qual é a equação que descreve esta curva, para um observador em um referencial \mathcal{S}' que se move a uma velocidade constante v na direção do eixo $\mathcal{O}\mathcal{X}$, no instante $t' = 0$?

6) Um corpo de massa de repouso m divide-se espontaneamente em duas partes, com massas de repouso m_1 e m_2 e velocidades respectivas v_1 e v_2 . Mostre matematicamente que $m > m_1 + m_2$ e dê argumentos físicos que expliquem a desigualdade.

7) A vida média de um neutron em repouso é de 15 min . Ele se desintegra espontaneamente em um elétron, um próton e um neutrino. Qual é o valor mínimo da velocidade com a qual um neutron deve deixar o Sol de modo que ele chegue à Terra antes de se desintegrar? (Considere que ele viaje à velocidade constante.)

Dado: $distância\ Terra-Sol = 25/3\ minutos-luz$.

8) Ana e Beto são dois irmãos gêmeos. No aniversário deles de 20 anos, Beto parte da Terra em um foguete com velocidade $0,8c$. Ana avisa que todos os anos, no dia do aniversário deles, irá enviar um sinal a Beto. Combinam que Beto irá retornar, com a mesma velocidade, quando receber o 6º sinal de Ana.

Determine a idade de Ana I_A e a idade de Beto I_B no momento em que eles se reencontrarem na Terra.

9) Considere dois eventos no referencial S nos pontos do espaço-tempo dados por $(t_1, x_1, 0, 0)$ e $(t_2, x_2, 0, 0)$, sendo $\Delta x_{12} = x_2 - x_1 > 0$ e $\Delta t_{12} = t_2 - t_1 > 0$. Calcule a desigualdade que $\Delta x_{12}/\Delta t_{12}$ deve satisfazer para que os eventos 1 e 2 sejam causais.

10) Considere dois eventos no referencial S nos pontos do espaço-tempo dados por $(t_3, x_3, 0, 0)$ e $(t_4, x_4, 0, 0)$, sendo $\Delta x_{34} = x_4 - x_3 > 0$ e $\Delta t_{34} = t_4 - t_3 > 0$. Calcule a desigualdade $\Delta x_{34}/\Delta t_{34}$ para que, hipoteticamente, em um referencial S' , estes eventos ocorram na ordem temporal inversa da que é observada em S . Isso seria fisicamente possível? Explique.

11) Uma nave espacial desloca-se aceleradamente da Terra a um planeta do Sistema Estelar Alfa Centauri.

Considerando infinitos sistemas de referência S' (referencial da nave), cada um com velocidade entre v e $v + dv$ durante cada intervalo de tempo dt a partir do referencial terrestre, pode-se escrever a equação para o intervalo de tempo próprio dt' .

A nave parte do repouso em $t = 0$ e a sua aceleração para o referencial S da Terra até a metade da viagem de ida, quando $t = \pi/3\omega$, é dada pela equação $a = c\omega \cos(\omega t)$. A segunda metade da viagem teve uma dinâmica simétrica à da primeira metade.

Sabendo que a viagem de volta seguirá inversamente a dinâmica da viagem de ida, calcule o tempo da viagem completa para um viajante da nave.

12) Um pulso luminoso propaga-se no plano xy do sistema de referência S fazendo um ângulo θ com o eixo x . Calcule o cosseno do ângulo θ' que o mesmo raio faz com o eixo x' no referencial S' que se desloca com velocidade v no sentido positivo do eixo x em relação ao referencial S .

13) Considere uma haste uniforme em repouso com comprimento ℓ_0 e massa m_0 . A haste passa a girar no sentido anti-horário no plano xy do referencial S com velocidade angular constante ω em torno de uma de suas extremidades. Calcule o tempo que o centro de massa da haste gasta para girar de $\pi/2$ ao se deslocar do eixo x para o eixo y para um observador inercial em S' que se desloca com velocidade v em relação ao referencial S no sentido positivo do eixo x .

14) Consideremos um referencial inercial S' que se move com velocidade v em relação ao referencial S no sentido positivo do eixo x , que tem a mesma orientação que o eixo x' .

a) A transformação de Galileu na direção x é dada por: $x' = x - vt$ e $t' = t$. No referencial S conhecemos a equação de onda para o campo elétrico E de ondas eletromagnéticas

propagando no sentido x positivo no vácuo. Obtenha, usando a transformação de Galileu, a equação de onda para o campo elétrico no referencial S' .

b) Obtenha, usando a transformação de Lorentz, a equação de onda para o campo elétrico no referencial S'

15) Consideremos um sistema de duas partículas, cada uma com massa de repouso m_o , que estão se aproximando com movimento no eixo x , ambas com velocidade de módulo u . As partículas colidem com uma mola que se comprime e fica travada na posição comprimida numa colisão totalmente inelástica. A mola é apenas um artifício para visualizar o armazenamento de energia. Nos itens abaixo obtenha suas respostas exclusivamente em termos de m_o , u e c .

a) Qual a massa de repouso final deste sistema?

b) Num referencial S' que se desloca com velocidade u no sentido positivo do eixo x , qual o vetor momento final do sistema?

16) Considere um disco com massa de repouso igual a m_o , situado no plano xy com centro localizado na origem do sistema de coordenadas. O raio do disco é igual a a e a sua densidade e espessura são constantes.

Desprezando qualquer efeito relativístico que não seja o da dependência da massa com a velocidade, calcule a massa total do disco quando este gira com velocidade angular ω ; tome o limite apropriado e obtenha o valor máximo que a massa do disco pode atingir. Explique o valor da massa neste limite.

Considerando que o disco gira no sentido anti-horário, calcule, para $\omega \rightarrow c/a$, a velocidade entre S e S' para que o tempo que um ponto P na borda do disco leva para ir de $(a, 0)$ a $(0, a)$ seja o mesmo para observadores em S e S' .

17) Em um referencial S um pulso luminoso parte do ponto A e percorre com velocidade c um circuito que tem a forma de uma espiral retangular. Conforme o pulso avança, percorre segmentos que se reduzem à metade, sucessivamente.

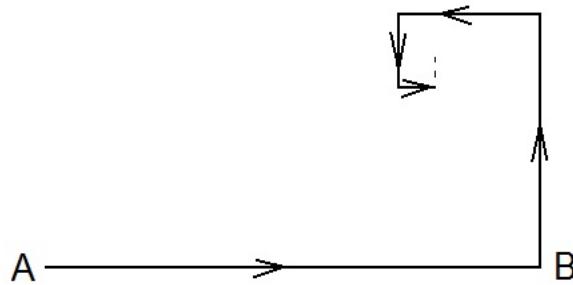


Figura 1.10: Curva da massa relativística em função da velocidade v .

a) Calcule o tempo de percurso para um referencial S' que se desloca com velocidade v constante na direção do segmento AB.

b) Para o referencial S' do item acima, calcule os valores de v/c que dão o mesmo tempo de percurso para o circuito completo para observadores em S e S' .

c) Considerando que todo o circuito esteja girado de tal forma que o segmento AB faça um ângulo θ no sentido anti-horário com a direção da velocidade v , faça o mesmo cálculo pedido no item a).

18) Seja $\psi(x, t)$ um campo escalar para um observador no referencial inercial S e, $\psi'(x', t') = \psi(x, t)$, este mesmo campo para um observador no referencial inercial S' . Mostre que a equação de onda de d'Alembert unidimensional em S , dada por:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0 ,$$

a) não é invariante² sob a transformação de Galileu entre S e S' ; ;

b) é invariante sob a transformação de Lorentz entre S e S' .

19) Duas naves, Γ e Δ , têm o mesmo comprimento de repouso L_o e viajam na mesma direção, sentidos opostos e a velocidades iguais a $0,8c$ e $0,5c$, respectivamente, ambas medidas em relação a Terra. Qual o comprimento da nave Γ para os passageiros da nave Δ e vice-versa?

20) Uma nave espacial afasta-se da Terra com velocidade de $0,95c$ e emite sinais a uma taxa de 10^5 pulsos por segundo. Com que frequência eles chegam a nós?

21) Dois carros, A e B , de mesmo comprimento de repouso L_o , movemse dentro de um trem, na mesma direção, sentidos opostos e a velocidades iguais a $0,3c\hat{x}$ e $-0,7c\hat{x}$, respectivamente, ambas medidas em relação ao trem e paralelamente à velocidade deste, cujo valor é igual a $0,8c\hat{x}$ medida em relação à plataforma. Calcule:

a) As velocidades dos carros em relação a um observador na plataforma.

b) A velocidade relativa entre os carros, para um observador na plataforma.

c) Os comprimentos dos carros em relação a um observador na plataforma.

22) Uma estrela dupla gira em torno do seu centro de massa em um plano que passa pela Terra, de modo que num certo tempo um membro está aproximando-se de nós, enquanto o outro está afastando-se. O centro de massa é fixo em relação à Terra. A linha do hidrogênio, de comprimento de onda de $656,3\text{ nm}$ no laboratório, tem comprimento de onda de $660,0\text{ nm}$ na luz proveniente de uma das estrelas e $650,0\text{ nm}$ na luz proveniente da outra. Qual é a razão entre as massas das estrelas?

23) Uma partícula de massa de repouso m_o é acelerada a partir do repouso, sendo a sua velocidade e aceleração dadas por: $\vec{v} = v\hat{k}$ e $\vec{a} = (dv/dt)\hat{k}$, onde \hat{k} é um vetor unitário constante.

²Uma equação é invariante quando mantém a sua forma em todos os referenciais inerciais. No caso em questão, se a equação em S é dada por $\partial^2\psi/\partial x^2 - c^{-2}\partial^2\psi/\partial t^2 = 0$, em S' ela deve ser dada por $\partial^2\psi'/\partial x'^2 - c^{-2}\partial^2\psi'/\partial t'^2 = 0$.

a) Mostre que a partícula está submetida a uma força igual a

$$\vec{F} = \frac{m_o}{(1 - v^2/c^2)^{3/2}} \vec{a}.$$

b) Se $\vec{F} = \vec{F}_o = \text{constante}$, encontre $v(t)$.

c) Do resultado encontrado no item (b), tome o limite apropriado e obtenha a expressão não-relativística.

Parte II

Mecânica Quântica

Capítulo 2

O quantum de luz

2.1 Radiação de corpo negro

Introdução

Um corpo negro¹ serve como base para considerações teóricas e como referência para investigações práticas sobre a radiação eletromagnética absorvida e emitida por um corpo material a uma temperatura arbitrária T .

A denominação de 'corpo negro' teve origem no fato de que o estudo da radiação térmica era feito a partir de uma cavidade quase totalmente fechada e, portanto, quase nenhuma radiação era observada na região exterior à cavidade.

Corpos reais absorvem apenas parte da radiação eletromagnética e, além disso, são constituídos de materiais e formas arbitrárias, além de interagir com o meio externo. Tudo isso dificulta a construção de um modelo generalizado da radiação térmica. Por outro lado, o corpo negro simplifica o estudo da radiação térmica por ser equivalente a um corpo que apenas absorve e emite radiação, pois elimina a transmissão e a reflexão das ondas eletromagnéticas com o meio externo, além de ter suas características físicas independentes da sua forma e da constituição química.

O aquecimento do corpo devido à absorção de energia eletromagnética incidente causa, sucessivamente, a emissão de energia também na forma de ondas eletromagnéticas, chamada de *radiação térmica*, cuja intensidade e distribuição espectral totais dependem apenas de sua temperatura, ou seja, são independentes da natureza do corpo e da sua geometria. No equilíbrio térmico, as potências de emissão e de absorção são iguais.

Na prática, as características de um corpo negro podem ser modeladas, com boa aproximação, fazendo um pequeno orifício em uma cavidade (Fig.2.1).

Assim, qualquer radiação que entre na cavidade por essa abertura sofre múltiplas re-

¹O termo "corpo negro" foi cunhado em 1860 pelo físico alemão Gustav Robert Kirchhoff.

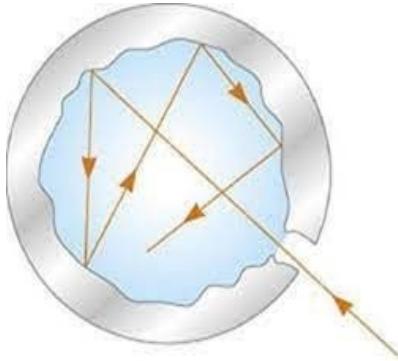


Figura 2.1: Cavidade termicamente isolada com pequena abertura para a simulação de um corpo negro ideal.

flexões nas paredes internas, maximizando a probabilidade de absorção; ou seja, após várias reflexões, quase toda a energia incidente na cavidade acaba sendo absorvida e praticamente nenhuma consegue escapar dela.

Um forno com aquecimento uniforme também é um bom modelo de corpo negro. Tal forno foi usado pelo físico alemão Wilhelm Wien para determinar as leis da emissão eletromagnética em função da temperatura. As paredes do interior do recinto emitem radiação em todos os comprimentos de onda. Como dito acima, esta emissão se deve à agitação térmica dos átomos. De acordo com a teoria clássica, a temperatura mede a agitação dos átomos (eles oscilam em torno de suas posições de equilíbrio). Ao fazer isso, cada átomo se comporta como um dipolo eletrostático vibrante (dipolo formado pelo núcleo e a nuvem eletrônica) que, portanto, irradia energia.

Cada parede do forno absorve e emite radiação. Há, portanto, uma troca de energia entre as paredes, até que o objeto atinja o equilíbrio térmico. A distribuição da quantidade de energia emitida, em função do comprimento de onda ou frequência, forma o espectro de emissão, que é a assinatura de uma radiação puramente térmica. Conforme a temperatura aumenta, o pico da curva de radiação do corpo negro muda para comprimentos de onda mais curtos (maiores frequências). A curva preta na Fig.[2.2] indica a previsão da chamada teoria clássica para a Densidade Espectral de Energia em função do comprimento de onda, em oposição às outras curvas obtidas pela teoria quântica, que prediz as formas corretas das curvas observadas.

O espectro contínuo das estrelas, negligenciando as linhas espetrais, ou em qualquer caso da grande maioria das estrelas nem muito frias nem muito quentes, como o Sol, é um espectro de corpo negro.

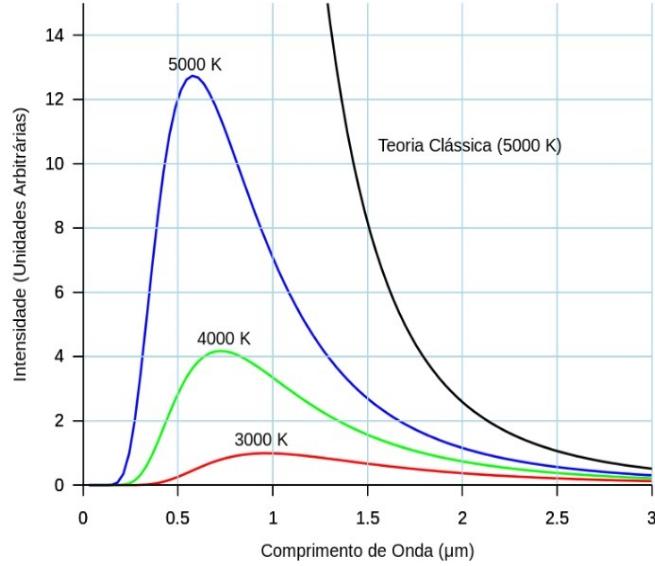


Figura 2.2: Densidade Espectral de Energia em função do comprimento de onda. A curva está de acordo com a teoria clássica para altos comprimentos de onda, enquanto as outras curvas são obtidas tanto pela medida experimental quanto pela teoria quântica elaborada por Planck em 1900.

Radiação de corpo negro - Teoria clássica

Nesta seção iremos calcular a energia total das ondas eletromagnéticas em um corpo negro, tendo como modelo uma cavidade perfeitamente isolante com temperatura da parede interna constante.

Energia média das ondas com frequência f

A fig.[2.3] ilustra a radiação de corpo negro na forma de ondas dentro de uma cavidade, de acordo com o que prevê a teoria clássica. No equilíbrio térmico, a taxa e emissão de energia na forma de ondas eletromagnéticas pelas paredes da cavidade tem a mesma magnitude da taxa de absorção de energia pelos osciladores do material que compõe a cavidade.

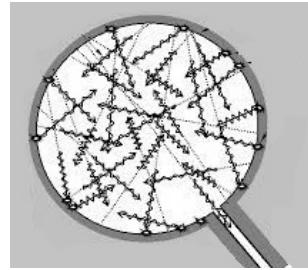


Figura 2.3: Corpo negro de cavidade em equilíbrio térmico. A taxa e emissão de energia na forma de ondas eletromagnéticas apresenta a mesma magnitude da taxa de absorção de energia pelos osciladores do material que compõe a cavidade.

Segundo a teoria clássica, a energia de uma onda eletromagnética é proporcional ao quadrado de sua amplitude, portanto, para uma dada frequência f , podemos observar ondas com valores contínuos de energia, desde zero (amplitude nula) até infinito (amplitude tendendo a infinito). A Fig.[2.4] mostra quatro ondas de mesma frequência com amplitudes diferentes.

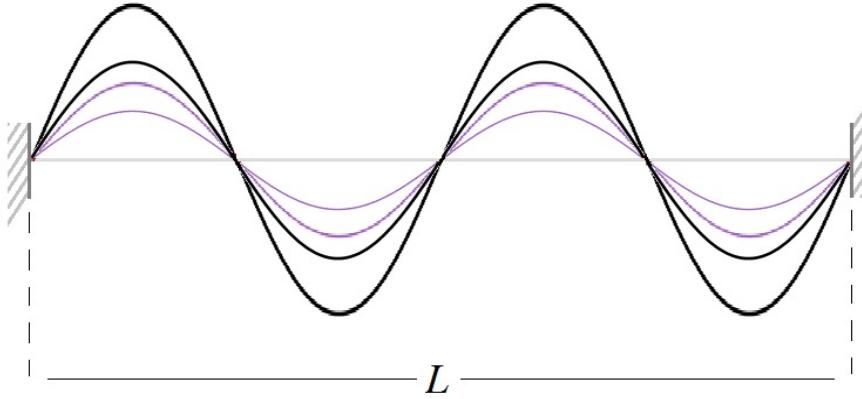


Figura 2.4: Quatro ondas estacionárias de mesma frequência e diferentes amplitudes.

Se a probabilidade de encontrar uma onda com energia entre \mathcal{E} e $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ é dada por $dP(\mathcal{E}) = P(\mathcal{E})d\mathcal{E}$, onde $P(\mathcal{E})$ é a densidade de probabilidade, a energia média de uma onda com frequência f será obtida a partir da seguinte integral:

$$\mathcal{E} = \int_0^\infty \mathcal{E} dP(\mathcal{E}) = \int_0^\infty \mathcal{E} P(\mathcal{E}) d\mathcal{E}$$

Em uma cavidade à temperatura absoluta T , a energia da onda está sendo absorvida e emitida pelo corpo da cavidade em taxas iguais (equilíbrio térmico), portanto, podemos afirmar que a energia térmica média da cavidade mais a energia da radiação no seu interior é constante.

Em 1868, o físico austriaco Ludwig Boltzmann mostrou que, no equilíbrio térmico, a densidade de probabilidade de uma partícula à temperatura T é dada por:

$$P(\mathcal{E}) = A e^{-\mathcal{E}/kT}$$

onde A é uma constante de normalização e k a constante de Boltzmann. Usaremos $P(\mathcal{E})$, para calcular a probabilidade de encontrar uma onda com energia entre \mathcal{E} e $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$:

$$dP(\mathcal{E}) = P(\mathcal{E})d\mathcal{E} = A e^{-\mathcal{E}/kT} d\mathcal{E}$$

Uma vez que $\int_0^\infty dP(\mathcal{E}) = 1$, vem:

$$A = \frac{1}{\int_0^\infty e^{-\mathcal{E}/kT} d\mathcal{E}} = \frac{1}{kT}$$

e

$$P(\mathcal{E}) = \frac{e^{-\mathcal{E}/kT}}{kT}$$

Então, a energia média será obtida a partir da integral abaixo:

$$\bar{\mathcal{E}} = \int_0^{\infty} \mathcal{E} P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\mathcal{E}/kT}}{kT} \mathcal{E} d\mathcal{E}$$

cujo resultado é igual a:

$$\bar{\mathcal{E}} = kT$$

Lembremos que $\bar{\mathcal{E}}$ é a energia média das ondas com apenas uma frequência f arbitrária. Portanto, se em um dado sistema há duas frequências distintas associadas a dois modos de oscilação, a energia será dada por $2kT$, e assim por diante.

Contagem do número de modos de oscilação

As ondas na cavidade são caracterizadas por duas grandezas físicas: amplitude e frequência. A estatística de Boltzmann nos permitiu calcular a energia para uma frequência qualquer; falta agora realizar a soma destas energias sobre todas as frequências possíveis (todos os modos de oscilação). Ao contrário dos modos de oscilação unidimensionais, as ondas em uma cavidade se propagam em três dimensões. Entretanto, a fim de facilitar o entendimento do processo de contagem de modos, iniciaremos com o caso de uma dimensão, passando pelo de duas dimensões até chegarmos às três dimensões.

I - Caso unidimensional

Em uma cavidade unidimensional, seria muito simples calcular a energia total da radiação em um dado intervalo de modos de oscilação, partindo da energia média de uma onda com frequência f qualquer.

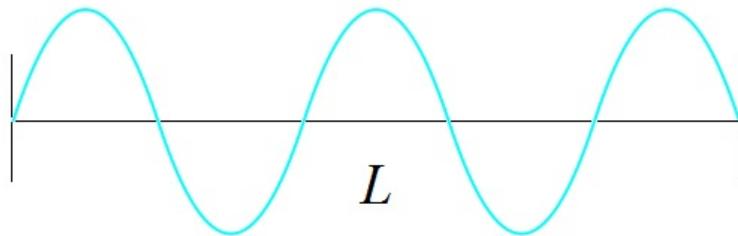


Figura 2.5: eee

Sabendo que o modo de oscilação N em uma dimensão é dado por

$$N \frac{\lambda}{2} = L ; \quad N = 1, 2, 3, \dots$$

e $k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda em função do comprimento da onda λ , vem:

$$N = \frac{L}{\pi}k = \frac{2Lf}{c}$$

onde c é a velocidade da luz.

Entre k e $k + dk$, a quantidade do número de modos é igual a

$$dN = \frac{L}{\pi}dk ,$$

e entre f e $f + df$, dN é dado por

$$dN = \frac{2L}{c}df$$

Entretanto, considerando ondas não polarizadas, os modos de oscilação têm dois graus de liberdade transversais e, portanto, devemos multiplicar o número de modos por 2:

$$dN = \frac{4L}{c}df$$

Portanto, a energia da cavidade no intervalo df será dada por:

$$d\mathcal{E} = \bar{\mathcal{E}}dN = kT \frac{4L}{c}df$$

A grandeza física medida em laboratório para estudar a radiação de corpo negro chama-se *densidade espectral* é dada por $\rho_T(f) = L^{-1}d\mathcal{E}/df$ no caso unidimensional, de onde vem:

$$\boxed{\rho_T(f) = \frac{1}{L} \frac{d\mathcal{E}}{df} = \frac{4kT}{c}}$$

É fácil observar que a energia total obtida, integrando $d\mathcal{E}$ sobre todas as frequências, de $f = 0$ a $f = \infty$, é infinita!

II - Caso bidimensional

O vetor de onda \mathbf{k} em duas dimensões é dado por $\mathbf{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$. Se as ondas estacionárias propagam-se em um quadrado de aresta L , então:

$$k_x = \frac{\pi}{L}N_x ; \quad N_x = 1, 2, 3, \dots \quad \text{e} \quad k_y = \frac{\pi}{L}N_y ; \quad N_y = 1, 2, 3, \dots$$

Cada ponto do plano $k_x k_y$ é dado pelo par ordenado $(k_x, k_y) = (\pi N_x/L, \pi N_y/L)$, e representa um modo de oscilação da onda.

O quadrado hachurado na Fig.[2.6] tem medida de área igual a $a_k = (\pi/L)^2$. Uma vez que podemos associar cada um desses quadrados a um ponto ou modo de oscilação, pois $1/4$

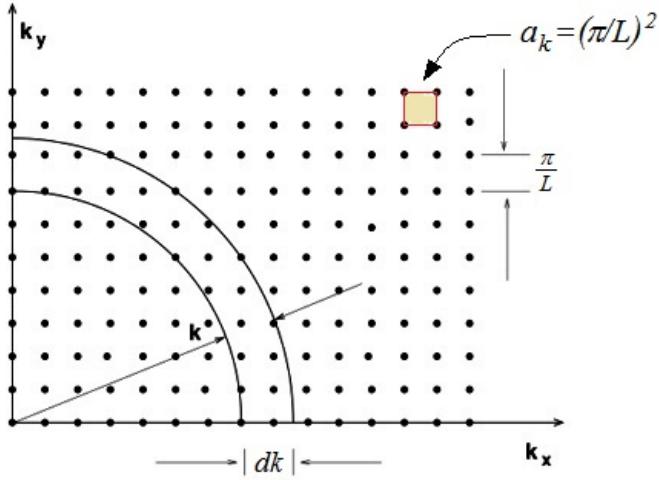


Figura 2.6: Número de modos de oscilação no caso bidimensional.

de cada um dos 4 pontos nos seus vértices pode ser associado a um quadrado, o número de modos N em uma área A_k é dado pela seguinte equação:

$$N = \frac{A_k}{a_k}$$

onde $a_k = (\pi/L)^2$ é a área de um quadrado.

A Fig.[2.6] também mostra a região de um setor circular para os números de onda entre k e $k + dk$. Nesta região infinitesimal, k é constante, o que garante que todos os pontos tenham o mesmo modo de oscilação no intervalo k e $k + dk$.

Da equação $k = 2\pi f/c$, pode-se reescrever o número de modos entre f e $f + df$ como:

$$dN = 2 \frac{\frac{1}{4}2\pi k dk}{(\pi/L)^2} = \frac{L^2}{\pi} k dk = L^2 \frac{4\pi}{c^2} f df$$

onde o fator 2 foi inserido para levar em conta os dois graus de liberdade no plano de oscilação do campo eletromagnético. Então, a energia da 'cavidade bidimensional' entre os modos k e $k + dk$ fica dada por:

$$d\mathcal{E} = \bar{\mathcal{E}} dN$$

ou

$$d\mathcal{E} = 2kT L^2 \frac{2\pi}{c^2} f df$$

e a densidade espectral, $\rho_T(f) = L^{-2} d\mathcal{E}/df$ será dada por:

$$\boxed{\rho_T(f) = kT \frac{4\pi}{c^2} f}$$

Da mesma forma que no caso anterior, a energia aqui também diverge, mas o caso de importância física reside na radiação da cavidade tridimensional, que será tratada a seguir.

III - Caso tridimensional

Para o cálculo da densidade espectral para uma cavidade real (tridimensional), basta seguir os passos do que foi feito para a cavidade bidimensional.

A Fig.[2.7] ilustra um octante contendo todos os modos normais de oscilação para três dimensões.

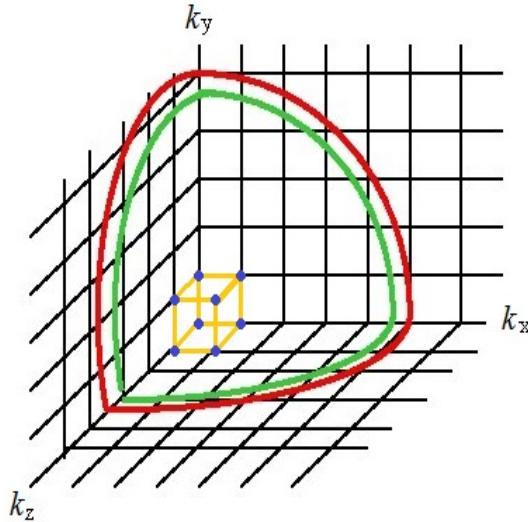


Figura 2.7: Número de modos no caso tridimensional.

Sendo a medida de volume mínimo de um cubo igual a

$$v_k = \left(\frac{\pi}{L}\right)^3$$

e a medida do volume da 1/8 da esfera é igual a

$$V_k = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi k^3$$

então, entre \$k\$ e \$k+dk\$, o número de modos com comprimento de onda \$\lambda = 2\pi/k\$ ou frequência \$f = ck/2\pi\$ é dado por:

$$dN = 2 \frac{dV_k}{v_k} = 2 \frac{1}{8} \frac{4\pi k^2 dk}{(\pi/L)^3} = L^3 \frac{k^2 dk}{\pi^2}$$

ou

$$dN = \frac{8\pi L^3}{c^3} f^2 df \quad (2.1.1)$$

Sabendo que $d\mathcal{E} = kT dN$, e que a densidade espectral é dada por $\rho_T(f) = L^{-3}d\mathcal{E}/df$, chega-se à lei de Rayleigh-Jeans:

$$\boxed{\rho_T(f) = \frac{8\pi kT}{c^3} f^2}$$

A equação acima expressa a forma clássica da densidade espectral para o corpo negro de cavidade tridimensional. Entretanto, nota-se que, para valores crescentes da frequência f , $\rho_T(f)$ cresce indefinidamente; uma vez que a energia total da radiação é dada por:

$$\mathcal{E} = \int_0^\infty L^3 \rho_T(f) df = L^3 \frac{8\pi kT}{c^3} \int_0^\infty f^2 df \rightarrow \infty$$

conclui-se que a teoria clássica desenvolvida por Rayleigh e Jeans, apesar de concordar com os valores experimentais para baixas frequências, discorda do que é observado para altas frequências, como pode ser observado na Fig.[2.8]

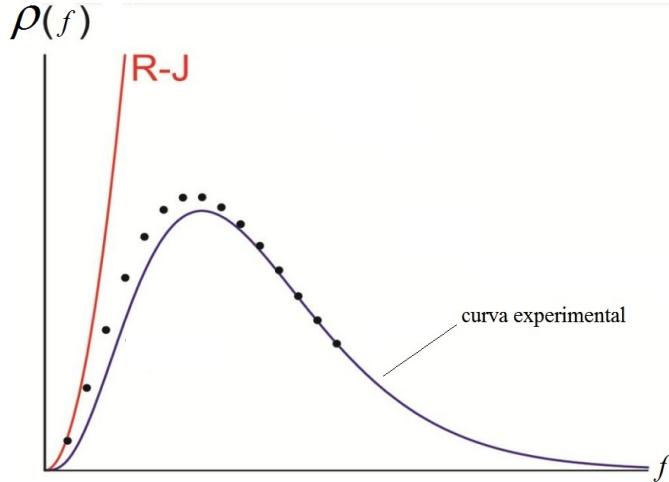


Figura 2.8: Densidade Espectral de Energia de acordo com a teoria clássica de Rayleigh-Jeans. Observe a discrepância entre a curva teórica R-J e a curva experimental.

A discordância entre a teoria clássica e a observação experimental ficou conhecida como a *catástrofe do ultra-violeta*. Todas as tentativas de se utilizar a teoria clássica do eletromagnetismo para que suas previsões concordassem com os resultados experimentais fracassaram.

Teoria de Planck para a radiação de corpo negro

A partir de meados da década de 1890, o físico alemão Max Planck passou a realizar trabalhos sobre o equilíbrio da radiação térmica absorvida e emitida por corpos materiais, tentando derivar as leis da radiação a partir de considerações termodinâmicas. Em 14 de dezembro

de 1900, Planck apresentou à Physical Society de Londres uma equação que descrevia corretamente a radiação de corpo negro. As equações encontradas até então, a lei de radiação de Wien e a lei de Rayleigh-Jeans, só conseguiam reproduzir corretamente parte do espectro da radiação. No decorrer do trabalho, em sua lei da radiação, Planck desistiu de suas reservas sobre uma visão probabilística atomística da entropia. Ao mesmo tempo, ele lançou a pedra fundamental para a física quântica, quando admitiu a existência de estados de energia discretos para os osciladores responsáveis pela radiação.

A hipótese de Planck afirma que a energia de um oscilador de frequência f na parede da cavidade não é contínua, mas discreta; e seu valor é um múltiplo inteiro de uma quantidade mínima ou *quantum de energia*, dada por:

$$\Delta E = hf$$

onde a constante de proporcionalidade h , chamada de *quantum de ação*, deveria ser obtida após ajustes da curva teórica com a curva experimental:

A equação acima leva, naturalmente, à seguinte equação para a energia total de um oscilador de frequência f :

$$E_n = nhf ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Uma vez que estas quantidades de energia são trocadas entre os osciladores e as ondas eletromagnéticas, pode-se inferir que os valores de energia das ondas emitidas por um corpo negro são também quantizadas com esses mesmos valores.

Deve-se destacar que Planck não levantou qualquer hipótese física para a quantização da energia dos osciladores. Ele mesmo declarou que o seu trabalho foi matemático, e o fez a partir de “um ato de desespero”.

Densidade espectral na teoria de Planck

Seguindo os passos do que foi feito na teoria clássica para o cálculo da probabilidade, segundo a estatística de Boltzmann, mas agora com a expressão quantizada da energia proposta por Planck, temos:

$$p(E_n) = Be^{-E_n/kT} = Be^{-nhf/kT}$$

onde B é uma constante.

Das expressões acima, podemos calcular o valor esperado da energia:

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n p(E_n)}{\sum_{n=0}^{\infty} p(E_n)} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nhfe^{-nhf/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nhf/kT}} \quad (2.1.2)$$

O somatório no denominador é uma PG decrescente, cujo resultado é dado por

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nhf/kT} = \frac{1}{1 - e^{-hf/kT}} , \quad (2.1.3)$$

enquanto o somatório no numerador pode ser calculado com o auxílio da seguinte função:

$$g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nhx} = \frac{1}{1 - e^{-hx}} ; \quad x > 0 ; \quad h = \text{cte.} > 0$$

Derivando $g(x)$, vem:

$$\frac{dg(x)}{dx} = - \sum_{n=0}^{\infty} nhe^{-nhx} = - \frac{he^{-hx}}{(1 - e^{-hx})^2}$$

e, fazendo $x = f/kT$, temos:

$$\sum_{n=0}^{\infty} nhe^{-nhf/kT} = \frac{he^{-hf/kT}}{(1 - e^{-hf/kT})^2} \quad (2.1.4)$$

Das equações [2.1.2], [2.1.3] e [2.1.4], obtém-se a expressão final do valor esperado da energia:

$$\boxed{\overline{E} = \frac{hf}{e^{hf/kT} - 1}}$$

Agora estamos prontos para escrever a densidade espectral na teoria de Planck.

Da Eq.[2.1.1] e da energia média \overline{E} acima, temos o diferencial da energia total:

$$dE = \overline{E} dN = \frac{L^3}{c^3} \frac{8\pi hf^3}{e^{hf/kT} - 1} df$$

e a densidade espectral, $\rho = L^{-3} dE/df$, fica dada por:

$$\boxed{\rho_T(f) = \frac{1}{c^3} \frac{8\pi hf^3}{e^{hf/kT} - 1}} \quad (2.1.5)$$

Planck constatou que a curva gerada a partir da Eq.[2.1.5] concordava com as obtidas em laboratório (Fig.[2.9]), desde que $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s.

Observe que, para $hf \ll kT$, as expressões para a energia média e densidade espectral tendem às equações da teoria clássica (Fig.[2.10]). Isso ocorre porque, ao fazer h cada vez menor, reduz-se progressivamente a diferença entre os valores quantizados da energia, dado por $\Delta E = hf$; ou seja, o espectro de energia volta a ser contínuo como na teoria clássica.

Problema resolvido - 1

Mostre que as equações de Planck para a energia média da radiação de corpo negro reduz-se à equação de Rayleigh-Jeans da teoria clássica quando $h \rightarrow 0$.

Solução

$$\lim_{h \rightarrow 0} \overline{E} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{hf}{e^{hf/kT} - 1} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f}{(f/kT)e^{hf/kT}} = kT$$

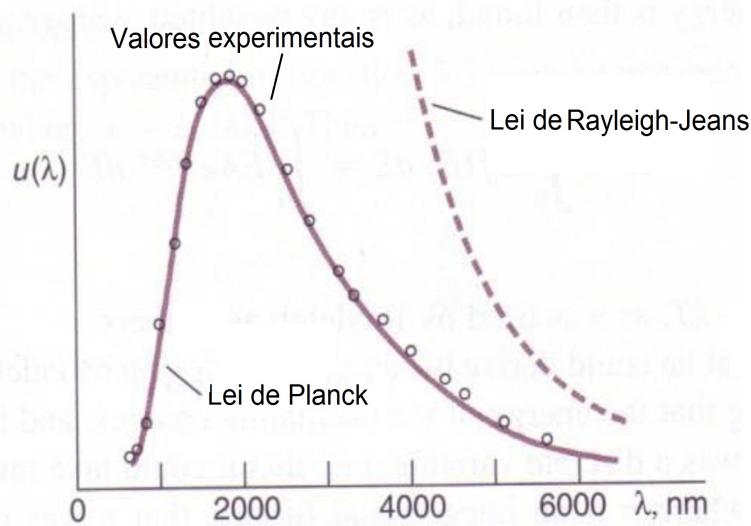


Figura 2.9: Densidade Espectral de Energia de acordo com a teoria de Planck a partir da Eq.[2.1.5], a lei de Rayleigh-Jeans e valores experimentais marcados por pontos.

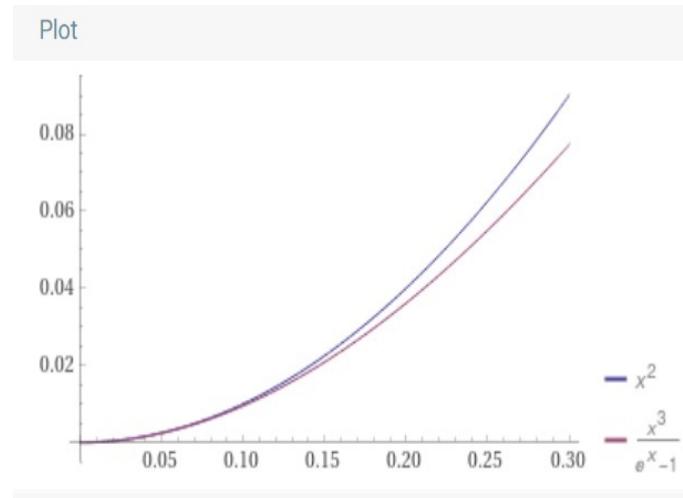


Figura 2.10: Concordância entre a densidade espectral de energia, de acordo com a teoria de Planck, e a densidade espectral da teoria de Rayleigh-Jeans, para pequenos valores de f .

Problema resolvido - 2

Mostre que a equação de Planck para a densidade espectral da radiação de corpo negro reduz-se à equação de Rayleigh-Jeans da teoria clássica quando $h \rightarrow 0$.

Solução

$$\lim_{h \rightarrow 0} \rho(f) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{c^3} \frac{8\pi h f^3}{e^{hf/kT} - 1} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{c^3} \frac{8\pi f^3}{(f/kT)e^{hf/kT}} = \frac{8\pi kT}{c^3} f^2$$

Lei de Wien

Antes de Planck publicar a sua teoria, o físico alemão Wilhelm Wien descobriu, a partir dos dados experimentais, uma lei que determinava a frequência e o comprimento de onda associados ao valor máximo da densidade espectral em função da temperatura do corpo negro. A lei do deslocamento de Wien para a frequência é dada pela seguinte equação:

$$f_{max} = bT$$

onde $b = 5,88 \cdot 10^{10} (\text{s.K})^{-1}$ é chamada *constante de dispersão de Wien para a frequência*.

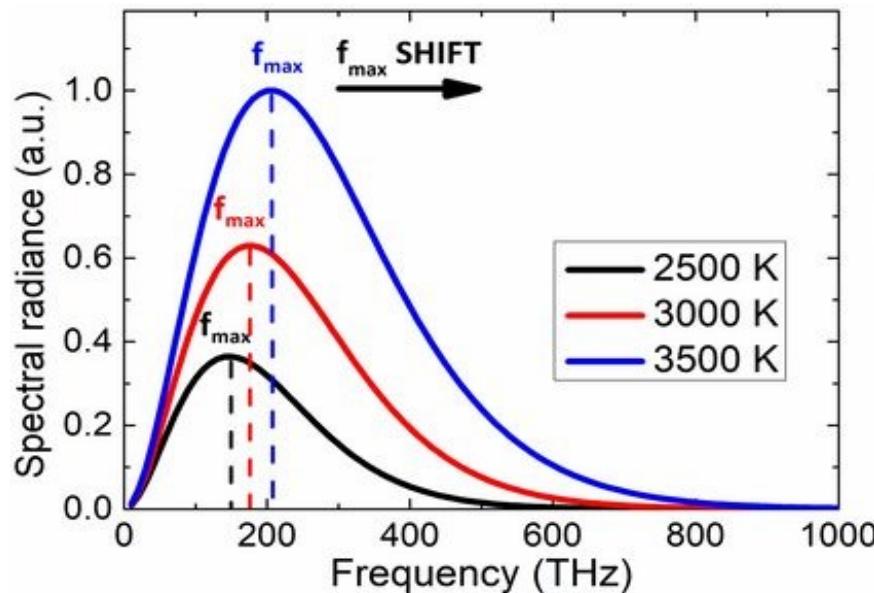


Figura 2.11: Lei de Wien para a frequência.

A teoria de Planck permite obter a Lei de Wien, teoricamente.

$$\rho_T(f) = \frac{1}{c^3} \frac{8\pi h f^3}{e^{hf/kT} - 1} \quad (2.1.6)$$

Derivando $\rho_T(f)$ em relação à f e igualando a derivada a zero, temos:

$$3(1 - e^{-x}) = x$$

onde $x = hf/kT$. Esta equação é transcendente, e a sua solução não trivial é dada, aproximadamente, por $x = 2,821$; de onde vem:

$$\frac{hf_{max}}{kT} = 2,821$$

ou

$$f_{max} = 2,821 \frac{kT}{h}$$

Sabendo que $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s e $k = 1,381 \cdot 10^{-23}$ J.K⁻¹, temos:

$$f_{max} = 2,821 \frac{(1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1})T}{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}}$$

ou

$$f_{max} = 5,88 \cdot 10^{10} T \text{ (Hz)}$$

Seguindo os mesmos passos dados acima, a lei de Wien para o comprimento de onda λ_{max} é dada por:

$$\lambda_{max} = \frac{2,898 \cdot 10^{-3}}{T} \text{ (m)}$$

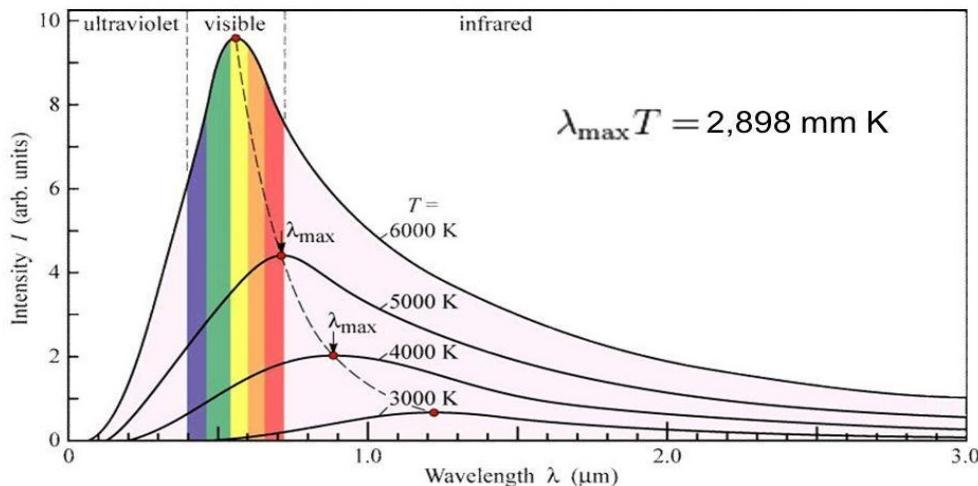


Figura 2.12: Lei de Wien para o comprimento de onda.

Lei de Stefan-Boltzmann

Outra lei, já conhecida antes da teoria de Planck, é a lei de Stefan-Boltzmann, que diz que a intensidade de energia emitida por um corpo negro sobre todas as frequências é proporcional a T^4 :

$$I = \frac{1}{4} u_T c = \sigma T^4$$

onde u_T é a densidade de energia sobre todas as frequências. Sabendo que $\rho_T(f) = L^{-3} dE/df$, então, a lei de Planck fornece I a partir da seguinte integral:

$$I = \frac{c}{4} \int_{f=0}^{\infty} \frac{dE}{L^3} = \frac{c}{4} \int_{f=0}^{\infty} \rho_T(f) df = \frac{2\pi h}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{f^3}{e^{hf/kT} - 1} df$$

Escrevendo $x = hf/kT$, temos:

$$I = \frac{2\pi(kT)^4}{h^3c^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

A integral acima pode ser calculada sem maiores problemas, enquanto a série que dela resulta, pode ser obtida, por exemplo, pela função Zeta de Riemann ou pela série de Fourier. O resultado segue abaixo:

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

Então, a intensidade fica dada por:

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

ou

$$I = \sigma T^4$$

onde

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5.670 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$$

é a constante de Stefan-Boltzmann.

A constante σ , obtida da teoria de Planck e descrita a partir de constantes fundamentais da natureza, evidencia a robustez da sua teoria.

2.2 Efeito fotoelétrico

O efeito fotoelétrico caracteriza-se pela emissão de elétrons da superfície de um condutor devido à incidência de radiação eletromagnética sobre a sua superfície. A Fig.[2.13] ilustra de forma simplificada a ejeção de elétrons (fotoelétrons) no efeito fotoelétrico.

Conceitualmente, o efeito pode ser explicado pela teoria clássica do eletromagnetismo, pois, ao incidir sobre a superfície do metal, uma onda eletromagnética transferiria parte da sua energia para os elétrons do metal e, após algum tempo, este teria energia suficiente para ser ejetado do mesmo. Uma vez que a energia de uma onda eletromagnética é proporcional ao quadrado da sua amplitude, basta que a intensidade do campo da onda tenha valor mínimo para efetuar o processo de ejeção, independentemente da sua frequência.

Entretanto, alguns anos após a primeira observação do fenômeno, por Heinrich Rudolf Hertz em 1866, estudos experimentais revelaram que a teoria clássica do eletromagnetismo entrava em conflito com o que era observado.

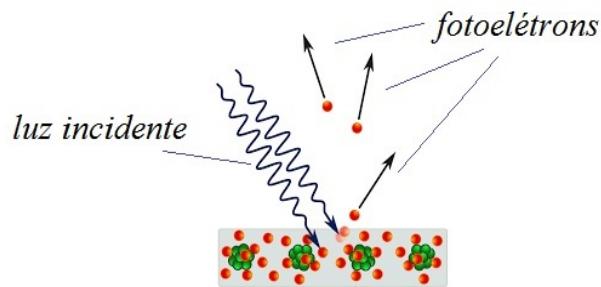


Figura 2.13: Ejeção de elétrons (fotoelétrons) após a incidência de luz sobre a superfície de um metal.

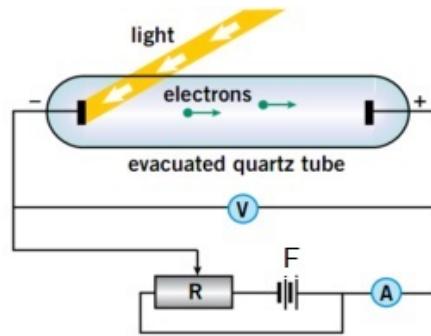


Figura 2.14:

A Fig.[2.14] mostra um esquema do aparato experimental para se observar o efeito fotoelétrico.

Observa-se na figura a incidência de luz monocromática sobre uma placa metálica negativamente carregada e ligada a uma fonte de tensão elétrica F. Tanto a placa negativa quanto a placa positiva estão no interior de um recipiente onde se fez vácuo. Após a incidência da luz, elétrons são ejetados da placa negativa e, pela diferença de potencial V aplicada pela fonte de tensão, são atraídos para a placa positiva. A corrente elétrica resultante do processo é medida pelo amperímetro A.

Se os elétrons saem do metal com energia cinética inicial K_i e chegam à placa positiva com energia cinética final K_f , o trabalho realizado pela fonte F é dado por:

$$W = eV = K_f - K_i$$

ou

$$V = \frac{1}{e}(K_f - K_i)$$

onde $-e$ é a carga do elétron e V a diferença de potencial elétrico entre as placas.

Reduzindo-se a diferença de potencial entre as placas, a energia cinética K_f com que os elétrons chegam à placa positiva é também reduzida. A partir daí, se V torna-se negativa, os

elétrons passam a ser freados ao longo da trajetória entre as placas, o que reduz a corrente medida em A. A equação acima passa a ser descrita por

$$-V = \frac{1}{e}(K_f - K_i)$$

pois, agora, $V \rightarrow -V < 0$ e $K_f < K_i$.

Continuando o processo, quando a voltagem atinge um valor igual a $-V_0$, chamado *potencial de corte*, nenhum elétron consegue mais chegar à outra placa e a corrente cessa. Neste momento, a energia cinética final é nula ($K_f = 0$):

$$-V_0 = \frac{1}{e}(-K_i)$$

ou

$$V_0 = \frac{1}{e}K_i$$

Considerando a luz ainda como onda, o processo de transferência de energia descrito pelas equações acima pode ser entendido, pois bastaria pensar que a energia dos fotoelétrons estaria ajustada à amplitude da onda, que, por sua vez, define a energia da mesma. Assim sendo, maior intensidade da luz aumentaria a energia da mesma e também a dos fotoelétrons, implicando em um aumento no potencial de corte, pois $V_0 = K_i/e$.

Entretanto, a Fig.[2.15] mostra que, para ondas de mesma frequência, o potencial de corte e a energia dos fotoelétrons independe da intensidade da luz. Este paradoxo entre o que se esperava de uma teoria consagrada como a eletrodinâmica clássica e a experiência ficou ainda mais evidente após os resultados mostrados na figura seguinte.

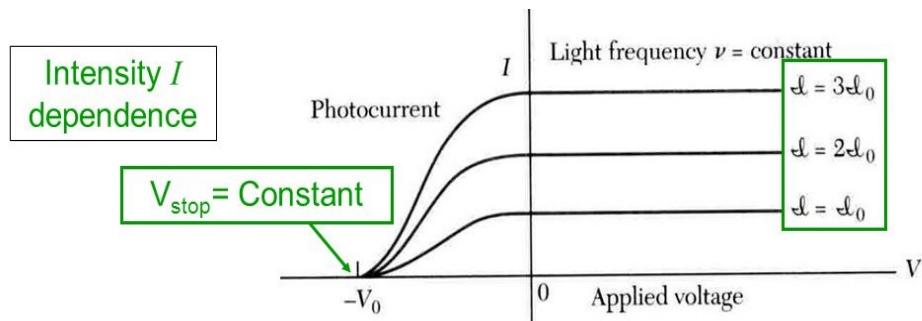


Figura 2.15: Corrente elétrica versus tensão para frequência da luz constante com intensidades diferentes.

A Fig.[2.16] mostra quatro curvas da fotocorrente elétrica gerada em função da tensão V ; cada curva está associada à incidência de fótons com quatro frequências distintas, mas de mesma intensidade. Para valores positivos de V as correntes associadas às intensidades estão saturadas, enquanto que para valores negativos de V , as correntes das quatro curvas

convergem para valores de tensão distintos que anulam todas as correntes elétricas, evidenciando que os potenciais de corte, assim como a energias cinéticas iniciais dos elétrons varia com a frequência, pois $V_{01} > V_{02} > V_{03} > V_{04}$ e $K_{i1} > K_{i2} > K_{i3} > K_{i4}$ para as frequências $f_1 > f_2 > f_3 > f_4$, respectivamente.

A teoria clássica prediz que se a intensidade da onda eletromagnética incidente é fixa, como neste caso, a energia transferida a cada elétron deveria ser única e, portanto, o potencial de corte deveria ser independente da frequência, mas o resultado experimental contradiz a previsão clássica.

(Reviews of Modern Physics 21, 343, 1949)

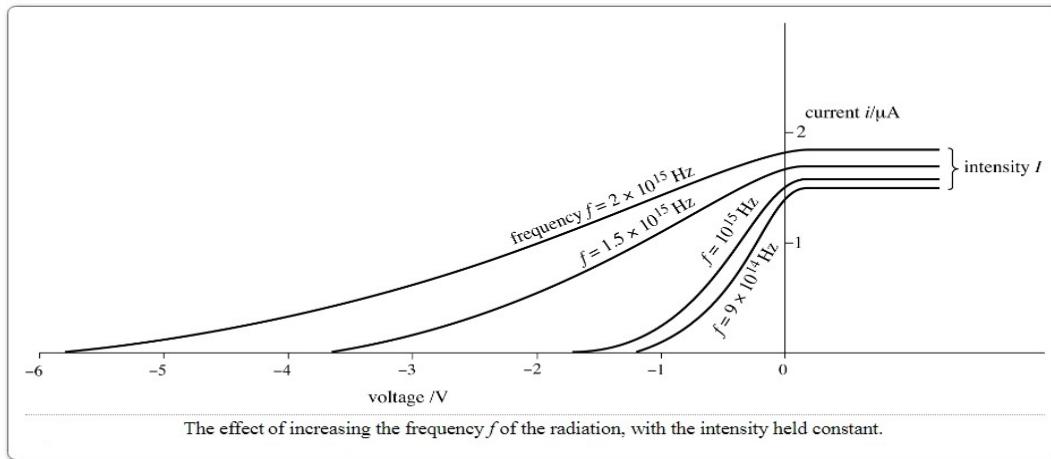


Figura 2.16: Corrente elétrica versus tensão, para três feixes de luz de mesma frequência com intensidades distintas.

Teoria de Einstein para o efeito fotoelétrico

Em 1905, Einstein propôs uma explicação para o efeito fotoelétrico baseada na concepção corpuscular da luz. Ele sugeriu que, para a interação da radiação eletromagnética com a matéria, a luz de frequência f se comportaria como um feixe de corpúsculos de energia hf , sendo h a constante de Planck. Ao interagir com um elétron, caso a energia hf fosse superior à energia de ligação deste com o material metálico, chamada de função trabalho ϕ , o elétron seria ejetado da superfície do metal instantaneamente, com energia cinética inicial igual a:

$$K_i = hf - \phi$$

Lembrando que o trabalho realizado pelo campo elétrico entre as placas é dado por

$$W = K_f - K_i = -eV$$

temos:

$$hf - \phi = K_f + eV$$

Quando o potencial V é igual ao potencial de corte V_0 , a energia cinética final K_f é nula; então, para $V = V_0$, temos:

$$eV_0 = hf - \phi$$

A Fig.[2.17] mostra o comportamento linear entre o potencial de corte V_0 e a frequência da luz incidente². Observe a concordância entre as medidas com a equação acima, proposta por Einstein³.

$$eV_{stop} = hf - \phi \quad V_{stop} = 0 \Rightarrow hf_{min} = \phi$$

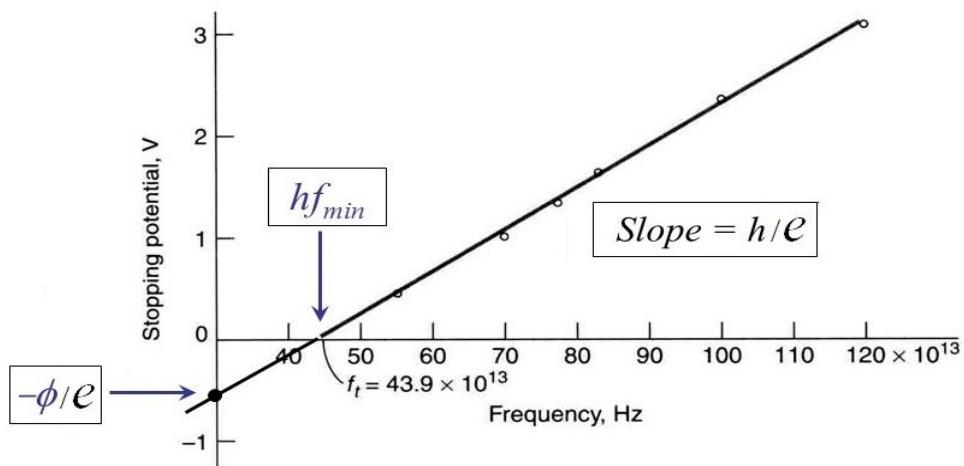


Figura 2.17: Gráfico V_0 X f que confirma a hipótese de Einstein. A extrapolação da reta para $f = 0$ fornece o valor da função trabalho ϕ .

É recomendável interpretar as figuras [2.15] e [2.16], agora sob a hipótese de Einstein, e constatar como ela explica todos aqueles comportamentos.

2.3 A relatividade e o quantum de luz

A Fig.[2.18] mostra dois feixes de luz de mesma frequência f e mesma energia E , no referencial S , antes de serem absorvidos simultaneamente pelo corpo em repouso de massa m_0 .

²Um gráfico análogo ao mostrado na Fig.[2.17] foi obtido pela primeira vez em 1906, realizado pelo físico americano Robert Millikan. Nesse experimento, ele tentava mostrar que a hipótese de Einstein estava errada. Acabou mostrando o contrário!

³Einstein ganhou o Prêmio Nobel de física em 1921 pelo seu trabalho sobre o efeito fotoelétrico.

Após a absorção, a energia total do sistema passa a ser dada por mc^2 . A fim de comparar os valores da energia da radiação sob o ponto de vista de observadores em dois referenciais inerciais, S e S' , analisemos a absorção nesses dois casos.

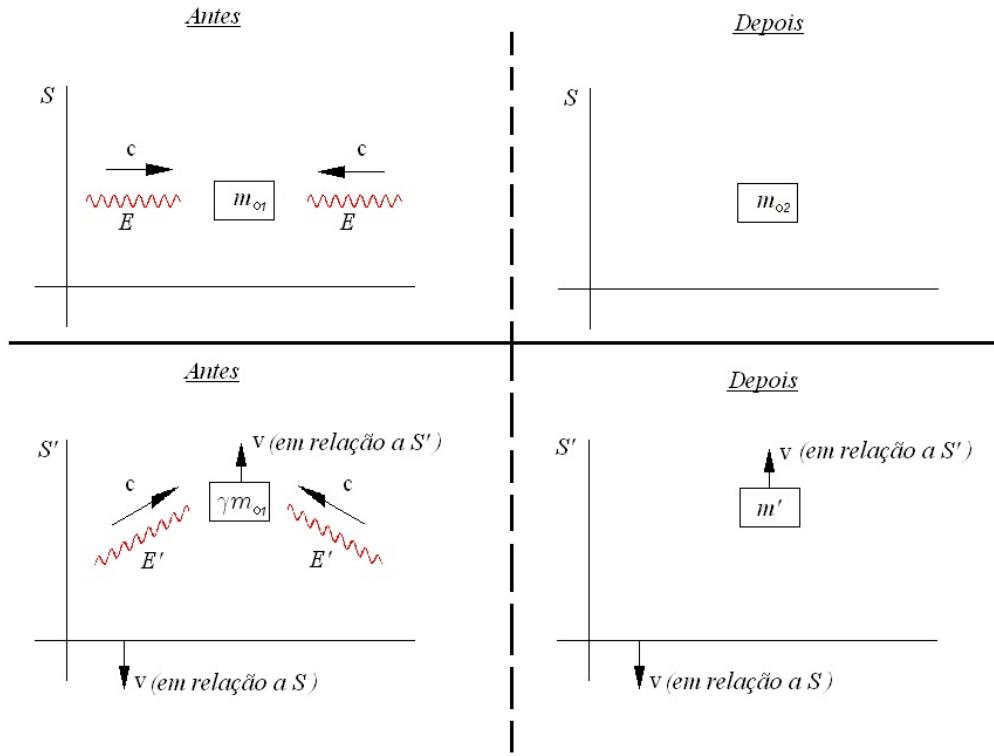


Figura 2.18:

Conservação da energia em S :

$$E_i = E_f ,$$

onde

$$E_i = m_{o1}c^2 + 2E ; E_f = m_{o2}c^2$$

$$\boxed{m_{o1}c^2 + 2E = m_{o2}c^2} \quad (2.3.7)$$

Conservação da energia em S' :

$$E'_i = E'_f ,$$

onde

$$E'_i = \gamma m_{o1}c^2 + 2E' ; E'_f = m'c^2$$

$$\gamma m_{o_1} c^2 + 2E' = m' c^2$$

Uma vez que o corpo permanece em repouso após a absorção em S , para um observador no referencial S' a sua velocidade também não poderá ser alterada após a absorção, portanto, mantém-se igual a v .

Do que foi dito acima vem:

$$m' = \gamma m_{o_2} ,$$

onde $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$.

$$\boxed{\gamma m_{o_1} c^2 + 2E' = \gamma m_{o_2} c^2} \quad (2.3.8)$$

Multiplicando a Eq.[2.3.7] por γ , vem:

$$\gamma m_{o_1} c^2 + 2\gamma E = \gamma m_{o_2} c^2$$

o que torna o lado direito da equação acima idêntico ao lado direito da Eq.[2.3.8], de onde temos:

$$\gamma m_{o_1} c^2 + 2E' = \gamma m_{o_1} c^2 + 2\gamma E$$

ou

$$\boxed{E' = \gamma E} \quad (2.3.9)$$

Estas mesmas frequências surgem em uma outra equação quando se considera o efeito Doppler relativístico transversal, exatamente o observado por um observador em S' em relação à onda com frequência f em S . Neste caso, o efeito mostra que

$$\boxed{f' = \gamma f} \quad (2.3.10)$$

Das Eqs.[2.3.9] e [2.3.10], vem:

$$\frac{E}{f} = \frac{E'}{f'} = g = \text{constante} \quad (2.3.11)$$

g está associado a um referencial S cuja velocidade v em relação a outro referencial S é arbitrária. Se considerássemos um segundo referencial com velocidade v' em relação a S chegaríamos a $g = g'$ e, assim sucessivamente.

A interpretação que se faz da Eq.[2.3.11] acima é que g é um invariante relativístico. O que nos leva a concluir que a energia da luz pode aqui ser dada apenas em função da sua frequência f :

$$E = gf \quad (2.3.12)$$

É evidente que a equação acima tem a mesma forma que a equação de Planck e a identificação pode ser feita fazendo $g = nh$.

2.4 Efeito Compton

Em 1923, o físico norte-americano Arthur Holly Compton e o seu aluno de pós-graduação, o chinês Wu Youxun, desenvolveram um modelo teórico para o espalhamento de um fóton de luz por um elétron. Os resultados do experimento confirmaram o modelo e consagraram a hipótese de Einstein sobre a teoria corpuscular da luz.

Para entender ainda mais a importância do experimento, devemos lembrar que no modelo ondulatório a perda de energia da onda eletromagnética após o espalhamento não causaria alteração na sua frequência e sim na sua amplitude. Por outro lado, uma vez que no modelo corpuscular da luz a sua energia é dada por $E = hf$, o efeito de espalhamento da luz após a colisão entre um fóton e um elétron levaria a uma alteração tanto da sua frequência quanto do seu comprimento de onda $\lambda = c/f$.

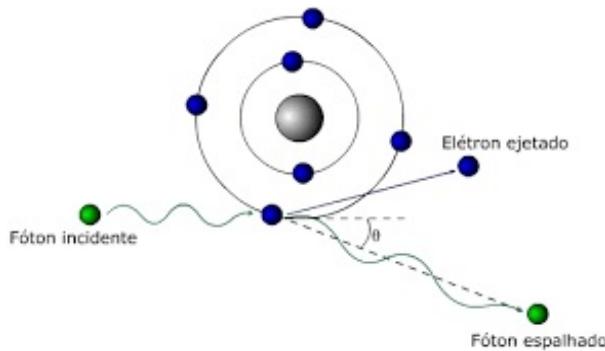


Figura 2.19:

A Fig.[2.19] mostra um fóton incidente colidindo com o elétron em um átomo. Após a colisão, o elétron é arrancado do átomo enquanto o fóton é espalhado em uma direção que faz um ângulo θ em relação à direção antes da colisão.

A Fig.[2.19] mostra esquematicamente o aparato utilizado por Compton e sua equipe. O processo se dá na seguinte sequência:

- produção de radiação eletromagnética a partir de um tubo de raio-X (fótons com frequência na faixa 3.10^{16} Hz a 3.10^{19} Hz);

- os fótons são colimados para que sua trajetória seja definida;
- os fótons incidem no alvo (grafite);
- espalhamento dos fótons;
- detecção dos fótons na direção definida pelo ângulo θ em relação à direção incidente.

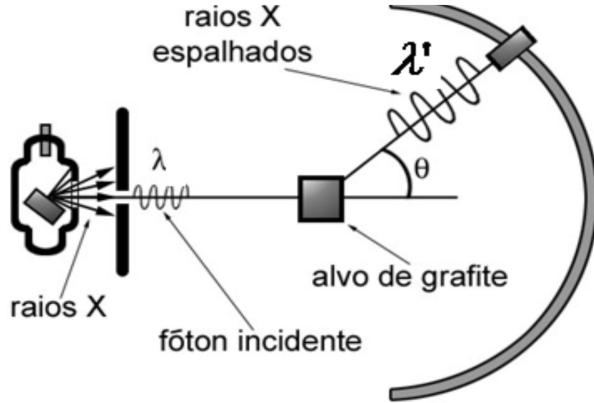


Figura 2.20:

Modelo teórico

Se a energia de ligação do elétron no átomo é muito menor do que a energia do fóton incidente, pode-se considerar que a colisão tenha uma dinâmica muito próxima daquela que seria observada entre um elétron livre e um fóton. Sendo assim, a fim de facilitar os cálculos, o modelo que iremos desenvolver levará em conta apenas o elétron e o fóton.

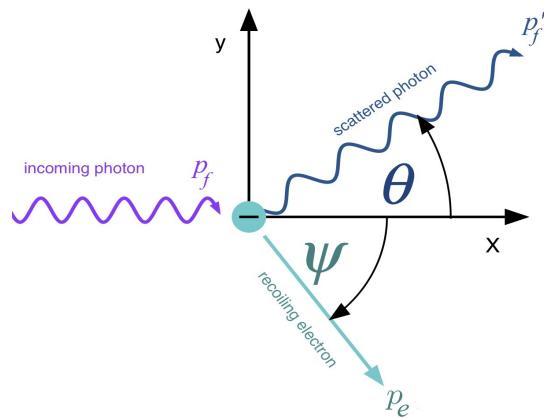


Figura 2.21:

- Conservação de momento -

$$\mathbf{p}_f = \mathbf{p}'_f + \mathbf{p}_e$$

$$(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}'_f)^2 = \mathbf{p}_e^2$$

$$\mathbf{p}_f^2 + \mathbf{p}'_f^2 - 2\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{p}'_f = \mathbf{p}_e^2$$

$$p_f^2 + p'^2_f - 2p_f p'_f \cos \theta = p_e^2$$

$$\frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} \cos \theta = p_e^2 \quad (2.4.13)$$

- Conservação de energia -

$$E_f + m_o c^2 = E'_f + mc^2$$

onde

$$m^2 c^4 = p_e^2 c^2 + m_o^2 c^4$$

Das equações acima, vem:

$$(E_f - E'_f + m_o c^2)^2 = m^2 c^4 = p_e^2 c^2 + m_o^2 c^4$$

Sabendo que $E_f = hf$ e $E_f = p_f c$, podemos escrever $E_f = hc/\lambda$, o que nos permite escrever a equação acima como:

$$\frac{h^2 c^2}{\lambda^2} + \frac{h^2 c^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2 c^2}{\lambda\lambda'} + m_o^2 c^4 + 2m_o c^2 \left(\frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} \right) = p_e^2 c^2 + m_o^2 c^4$$

Simplificando a equação acima, vem:

$$\frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + 2m_o hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = p_e^2 \quad (2.4.14)$$

Igualando p_e^2 das Eqs. [2.4.13] e [2.4.14], temos:

$$\frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} \cos\theta = \frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + 2m_0hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right)$$

Cancelando parcelas iguais em ambos os lados e realizando alguns cálculos, obtemos a equação do espalhamento Compton:

$$\boxed{\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta)} \quad (2.4.15)$$

Define-se $\lambda_C = h/m_0c = 2,426 \cdot 10^{-12}$ m como o *comprimento de onda Compton*.

A equação de espalhamento, obtida a partir da concepção corpuscular da luz, mostra que o comprimento de onda λ' final é maior do que o inicial, o que é coerente com a transferência de energia da radiação para o elétron, pois a energia do fóton é proporcional ao inverso do comprimento de onda na forma: $E_f = hf = hc/\lambda$.

Portanto, uma vez que a equação de Compton foi confirmada experimentalmente, conclui-se que este fenômeno é coerente com o caráter corpuscular da luz. Ou seja, não pode ser interpretado a partir da concepção ondulatória da luz, pois, se assim fosse, a amplitude da onda seria reduzida na transferência de energia para o elétron, sem alteração no seu comprimento de onda.

2.5 O modelo atômico de Rutherford

Em 1911...

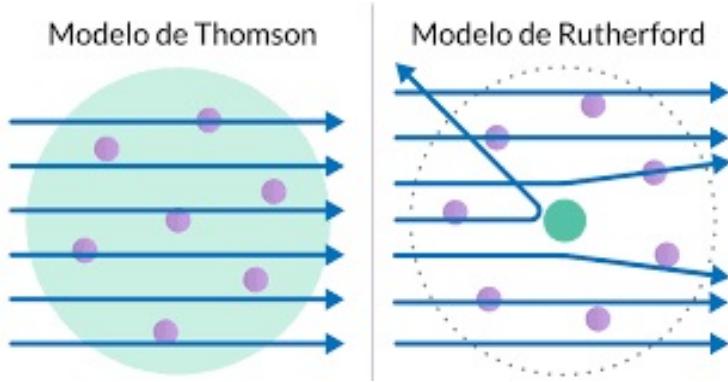


Figura 2.22:

Ângulo de espalhamento

Os cálculos serão feitos tomando o núcleo do átomo de Au como a origem do sistema de coordenadas.

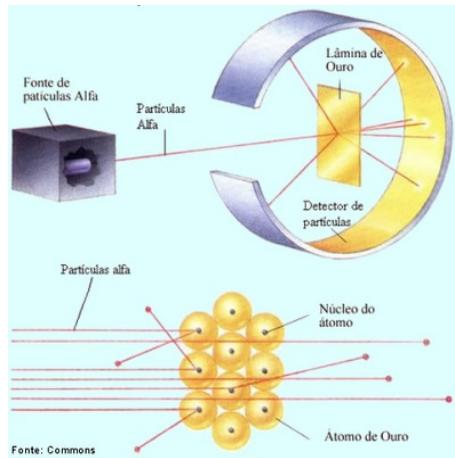


Figura 2.23: Esquema do aparato experimental utilizado por Rutherford para a investigação sobre a estrutura do átomo.

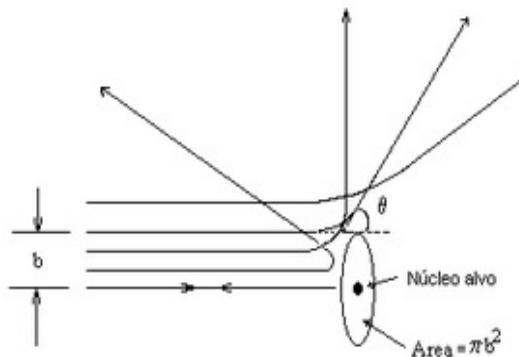


Figura 2.24:

$$L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = |m\mathbf{r} \times \mathbf{v}|$$

Escrevendo o momento angular no ponto A, temos:

$$L = mv_0 b$$

Uma vez que a força elétrica é central, o momento angular se conserva e poderemos utilizar a sua expressão acima sempre que for conveniente.

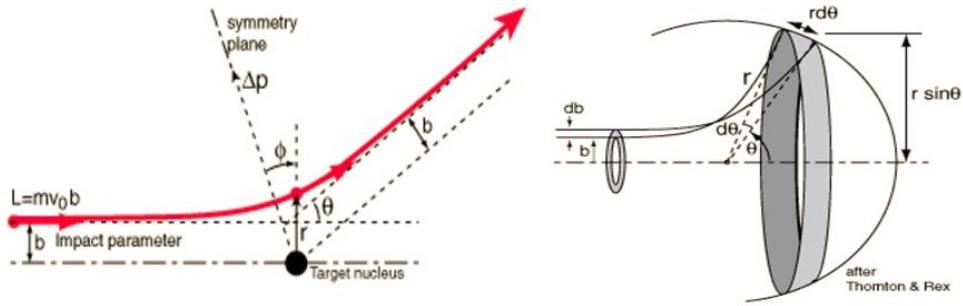
Considerando que a distância inicial r da partícula seja muito grande, a energia inicial pode ser dada por

$$E = \frac{1}{2}m_0 v^2$$

E a sua expressão para uma distância qualquer, descrita como:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r}$$

A seção de choque de Rutherford



Em termos de b , a seção de choque diferencial é igual a área de um anel de raio b e espessura db : $d\sigma = 2\pi b db$;

Como pode ser visto nas figuras acima , um específico parâmetro de impacto resulta em um específico ângulo de espalhamento.

Figura 2.25:

O vetor velocidade em coordenadas polares é descrito por:

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \dot{r}\hat{r} + r\dot{\theta}\hat{\theta}$$

de onde vem: $\mathbf{v}^2 = v^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2$; e a equação para a energia passa a ser dada por:

$$E = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 + \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Da mesma forma, o momento angular pode ser reescrito:

$$L = |m\mathbf{r} \times (\dot{\mathbf{r}}) | = |m(\dot{r}\mathbf{r} \times \hat{r} + r\dot{\theta}\mathbf{r} \times \hat{\theta})|$$

O primeiro produto vetorial é nulo enquanto o módulo do segundo, sabendo que \mathbf{r} e $\hat{\theta}$, são ortogonais, implica que L seja igual a:

$$L = mr^2\dot{\theta}$$

Substituindo a expressão acima de L na equação da energia, temos:

$$E = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Após reescrevermos \dot{r} como:

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = r'\dot{\theta}$$

vem

$$E = \frac{1}{2}mr'^2\dot{\theta}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Mas, da equação para o momento angular, temos $L = mr^2\dot{\theta}$, então

$$E = \frac{L^2}{2mr^4}r'^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r}$$

A equação diferencial ordinária acima servirá para a obtenção da equação da trajetória $r = f(\theta)$. Apesar de não ser linear, é relativamente fácil de ser resolvida como será visto a seguir.

Reescrevendo a coordenada radial r como $r = 1/u$, temos:

$$r' = \frac{dr}{d\theta} = \frac{dr}{du} \frac{du}{d\theta} = -\frac{u'}{u^2}$$

então, a equação da energia fica reescrita como:

$$u'^2 + u^2 + \left(\frac{mqQ}{2\pi\epsilon_0 L^2} \right) u = \frac{2mE}{L^2}$$

A equação diferencial acima pode agora ser resolvida por integração direta a partir de uma substituição trigonométrica, mas não é difícil, a partir de uma observação atenta perceber que uma solução do tipo $u = A \cos \theta - B$, onde A e B são constantes, é uma boa sugestão. Vejamos: Sendo a derivada de u dada por

$$u' = -A \sin \theta$$

substituindo u e u' na equação diferencial, temos:

$$A^2 \sin^2 \theta + (A^2 \cos^2 \theta - 2AB \cos \theta + B^2) + \left(\frac{mqQ}{2\pi\epsilon_0 L^2} \right) (A \cos \theta - B) = \frac{2mE}{L^2}$$

ou

$$A^2 - 2AB \cos \theta + B^2 + \left(\frac{mqQ}{2\pi\epsilon_0 L^2} \right) (A \cos \theta - B) = \frac{2mE}{L^2}$$

A equação acima será satisfeita para qualquer θ desde que:

$$-2B + \frac{mqQ}{2\pi\epsilon_0 L^2} = 0$$

e

$$A^2 + B^2 - \left(\frac{mqQ}{2\pi\epsilon_0 L^2} \right) B = \frac{2mE}{L^2}$$

Das equações acima obtemos as expressões de A e de B :

$$B = \frac{mqQ}{4\pi\epsilon_0 L^2}$$

e

$$A = \sqrt{\left(\frac{mqQ}{4\pi\epsilon_0 L^2}\right)^2 + \frac{2mE}{L^2}}$$

onde escolhemos $A > 0$ para cosseno positivo.

Observe que

$$A^2 - B^2 = \frac{2mE}{L^2}$$

das equações acima e lembrando que $r = 1/u$, vem:

$$r = \frac{1}{A \cos \theta - B}$$

Os ângulos das assíntotas são obtidos fazendo $r \rightarrow \infty$ ou:

$$\theta = \pm \arccos(B/A)$$

ou

$$r = \frac{1}{\sqrt{(mqQ/4\pi\epsilon_0 L^2)^2 + 2mE/L^2} \cos \theta - mqQ/4\pi\epsilon_0 L^2}$$

Ângulo de espalhamento

Trata-se de um problema de espalhamento por repulsão eletrostática. Não precisamos resolver o problema caracterizando a trajetória como um todo (hipérbole). É suficiente uma abordagem com base nas conservações da energia e momento angular observando as condições inicial e final ($t = 0$ e $t \rightarrow \infty$).

Seja θ o ângulo no sentido anti-horário entre o vetor posição e o eixo x positivo, o momento angular inicial é dado por:

$$\vec{L}(0) = m\vec{r}(0) \times \vec{v}_0 = m\vec{r}(0) \times (-v_0 \cos \theta(0)\hat{r} + v_0 \sin \theta(0)\hat{\theta}) = mr(0)v_0 \frac{b}{r(0)} \hat{z} = mv_0 b \hat{z}$$

A conservação do momento angular considerando um ponto qualquer da trajetória fica:

$$L(t) = mr^2(t) \frac{d\theta}{dt} = mv_0 b \Rightarrow r^2(t) = \frac{v_0 b}{d\theta/dt} \quad (1)$$

A equação de movimento na direção y é

$$m \frac{dv_y}{dt} = F_y = F \operatorname{sen}\theta = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r^2(t)} \operatorname{sen}\theta \quad (2)$$

Substituindo $r^2(t)$ de (1) em (2), obtemos:

$$\frac{dv_y}{dt} = \frac{qQ \operatorname{sen}\theta}{4\pi\epsilon_0 mv_0 b} \frac{d\theta}{dt} \Rightarrow dv_y = \frac{qQ \operatorname{sen}\theta}{4\pi\epsilon_0 mv_0 b} d\theta$$

Sabemos que em $t \rightarrow \infty$ a partícula terá velocidade v_0 por conservação de energia. Para determinar a direção ϕ que a partícula se desloca em relação a sua direção inicial temos que integrar a equação acima:

$$\int_0^{v_0 \operatorname{sen}\phi} dv_y = \frac{Qq}{4\pi\epsilon_0 mv_0 b} \int_0^{\pi - \phi} \operatorname{sen}\theta d\theta \Rightarrow v_0 \operatorname{sen}\phi = \frac{Qq}{4\pi\epsilon_0 mv_0 b} (1 + \cos\phi)$$

Como $\cot(\phi/2) = (1 + \cos\phi)/\operatorname{sen}\phi$, a expressão que especifica ϕ em termos dos parâmetros físicos é:

$$\cot\frac{\phi}{2} = \frac{4\pi\epsilon_0 mv_0^2 b}{qQ}$$

Portanto $\vec{v}(t \rightarrow \infty) = -v_0 \cos\phi \hat{x} + v_0 \operatorname{sen}\phi \hat{y}$, onde ϕ é dado pela expressão acima.

2.6 Modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio

Introdução

Em 1913, Niels Bohr publicou um trabalho em que lançou as bases para a teoria quântica do átomo. A sua intenção era resolver, mesmo que ainda de forma primitiva, dois problemas cruciais. Um deles surgiu a partir da estrutura atômica revelada pelo experimento de Rutherford e o outro a partir das observações das linhas espectrais discretas associadas às absorção e emissão de luz pelo átomo de hidrogênio.

Ao comprovar que a estrutura do átomo se baseava em um núcleo positivo em torno do qual orbitariam elétrons, Rutherford solucionou o problema fundamental sobre qual seria a estrutura básica do átomo. Simultaneamente, porém, deixou um outro problema em aberto. Ao se movimentar em órbitas fechadas, os elétrons estariam acelerados e, de acordo com a eletrodinâmica clássica, toda carga acelerada emite radiação eletromagnética. Portanto, o elétron perderia energia até colapsar no núcleo, contrariando a estabilidade do átomo.

O outro fato que não poderia ser explicado pela teoria clássica do eletromagnetismo eram os espectros de emissão e absorção de luz para os átomos. Por exemplo, quando luz branca atravessava um gás composto por hidrogênio, a absorção e emissão da luz pelo gás se dava

apenas em alguns comprimentos de onda. Essas observações já vinham sendo realizadas desde o século 18 por Balmer (1885) e outros. A série de Balmer fornecia os comprimentos de onda a partir da seguinte equação empírica:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{4}{B} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) ; \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (2.6.16)$$

onde $B = 3,645 \cdot 10^{-7}$ m.

O átomo de Bohr

O modelo semi-clássico elaborado por Bohr para o átomo de hidrogênio baseia-se nos seguintes postulados :

(1) O elétron se move ao redor do núcleo em uma órbita circular.

(2) O momento angular de um elétron na órbita n é quantizado:

$$L_n = nh/2\pi ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(3) A mudança na energia de um elétron se dá quando ocorre o chamado *salto quântico*. A sua energia aumenta quando o átomo absorve um fóton e é reduzida quando emite um fóton; em ambos os casos, a energia do fóton está relacionada às energias inicial (E_i) e final (E_f) do átomo quando o elétron muda de uma órbita para outra segundo a equação: $\Delta E_{fi} = hf$.

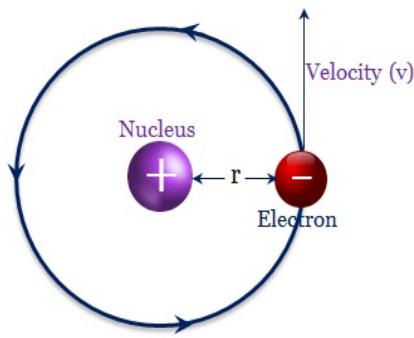


Figura 2.26: Representação do átomo de H de acordo com os postulados de Bohr.

Energia e raio da órbita do átomo de H no modelo de Bohr

As equações para o momento angular e para a força entre o núcleo (próton) e o elétron são dadas por:

$$L = n\hbar = \mu vr ; \quad n = 1, 2, 3, \dots ; \quad (\hbar = h/2\pi) \quad (2.6.17)$$

$$F_e = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = -\mu \frac{v^2}{r} \quad (2.6.18)$$

Dividindo as equações acima vem:

$$v = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 n \hbar} \quad (2.6.19)$$

A energia total é dada por

$$E = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (2.6.20)$$

Substituindo a Eq.[2.27] na Eq.[2.6.20], temos:

$$E = -\frac{1}{2}\mu v^2 \quad (2.6.21)$$

Finalmente, substituindo a Eq.[2.6.19] na Eq.[2.6.21], a energia do átomo de hidrogênio no modelo de Bohr fica dada por:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.6.22)$$

A Eq.[2.6.22] mostra que o postulado que quantiza o momento angular leva também à quantização da energia do átomo (a energia mínima E_1 é a energia do estado fundamental.).

A equação da energia total (Eq.[2.6.20]) em função do raio é dada por:

$$E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (2.6.23)$$

Então, da Eq.[2.6.22], vem:

$$E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} \quad (2.6.24)$$

de onde se obtém os raios das órbitas eletrônicas no átomo de H:

$$r_n = \left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \right) n^2 ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.6.25)$$

A grandeza abaixo é definida como *raio de Bohr*:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,5292 \text{ \AA}$$

de onde podemos escrever:

$$r_n = a_0 n^2 ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.6.26)$$

Frequência do fóton emitido-absorvido

Quando o elétron muda de órbita, a energia total do átomo se altera, em outras palavras, ao sofrer uma transição para energia mais baixa, o átomo emite um fóton e, no caso inverso, o átomo aumenta a sua energia quando absorve um fóton. Em ambos os casos, a energia do fóton pode ser calculada por:

$$\frac{f_{ij}}{c} = \frac{1}{\lambda_{ij}} = \frac{1}{hc}(E_i - E_j) = -\frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) = -R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) ; \quad n_i > n_j \quad (2.6.27)$$

onde $i \rightarrow j$ emissão de um fóton e $j \rightarrow i$ absorção de um fóton.

A constante $R_H = (\mu e^4)/(8\epsilon_0^2 h^3 c) = 1,09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, conhecida como constante de Rydberg está relacionada com a constante empírica, obtida por Balmer segundo a equação $R_H = 4/B$. Tomando o valor de B na Eq.[2.6.16], temos:

$$\frac{4}{B} = \frac{4}{3,645 \cdot 10^{-7}} \text{ m}^{-1} = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

concordando com a constante de Rydberg.

A Fig.[2.27] mostra algumas linhas de transição do átomo de hidrogênio, obtidas pelo Bohr, e a sua concordância com os dados experimentais e com as fórmulas empíricas de Lyman, Balmer e Paschen.

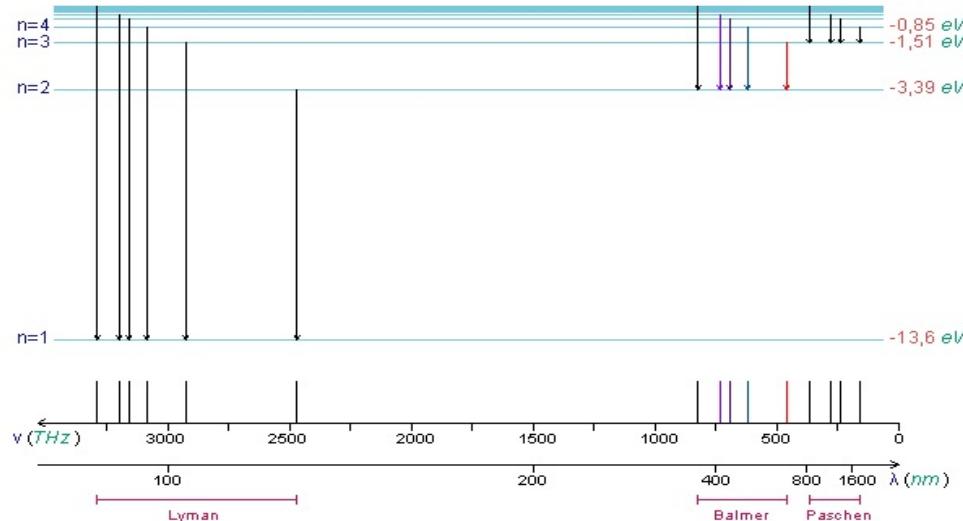


Figura 2.27: Transições energéticas associadas aos saltos quânticos do elétron entre dois níveis de energia no átomo de hidrogênio.

2.7 Raios-X

Introdução

Em 8 de novembro de 1895, o físico alemão Wilhelm Röntgen descobriu os raios-X enquanto fazia experiências com tubos de Lenard e tubos de Crookes. Ele escreveu um relatório inicial intitulado “Sobre um novo tipo de raio: uma comunicação preliminar” e, em 28 de dezembro de 1895, submeteu-o à revista Physical-Medical Society de Würzburg. Röntgen se referiu à radiação como “X”, para indicar que era um tipo desconhecido de radiação.

Raios-X são ondas eletromagnéticas na faixa de energia acima da luz ultravioleta, na faixa de 145 eV a 124 keV. Seus comprimentos de onda estão entre 10^{-11} m (10 pm) e 10^{-8} m (10 nm) e suas frequências entre $30 \cdot 10^{15}$ Hz e $30 \cdot 10^{18}$ Hz. Raios-x diferem da radiação gama na forma como são gerados: raios gama são fótons produzidos por reações nucleares ou decaimento radioativo, enquanto os raios-X resultam da mudança na velocidade das partículas carregadas ou em transições eletrônicas nos átomos.

Geração de raios-X

Um dos tubos utilizados para a geração de raios-x é o tubo de Coolidge (Fig.[2.28]). Dentro de uma estrutura de vidro onde se fez vácuo, uma corrente elétrica passa pelo filamento (catodo) devido à aplicação de uma diferença de potencial sobre os seus terminais. Essa corrente aquece o filamento por efeito Joule, resultando na emissão termoiônica⁴. Os elétrons emitidos pelo catodo são acelerados até o anodo, também no interior do tubo, com alta diferença de potencial em relação ao filamento, da ordem de dezenas de kV, o que o transforma em alvo dos elétrons. Devido à interação dos elétrons acelerados com os átomos do alvo, radiação eletromagnética na faixa dos raios-X é então emitida.

A partir dos processos descritos acima, a emissão de raios-X pode ocorrer por duas formas:

i - Fig.[2.29-(a)]; espectro contínuo de raio-X: ao serem frenados pelas cargas positivas dos núcleos dos átomos do anodo, os elétrons têm parte da sua energia convertida em fótons de raios-X com espectro contínuo; fenômeno conhecido pela palavra alemã *bremssstrahlung* (radiação de frenagem).

ii - Fig.[2.29-(b)]; espectro discreto de raio-X: se o elétron incidente tiver energia cinética suficiente, ele pode ejetar um elétron de uma camada interna do átomo do alvo, o que leva outro elétron do mesmo átomo, e com maior energia, a ocupar o ‘lugar’ do elétron ejetado. A energia em excesso do elétron que salta para um nível de energético menor é emitida na

⁴Aumento da saída de elétrons de um metal quando aquecido, o que resulta em corrente elétrica filamento e uma placa positivamente carregada ou anodo.

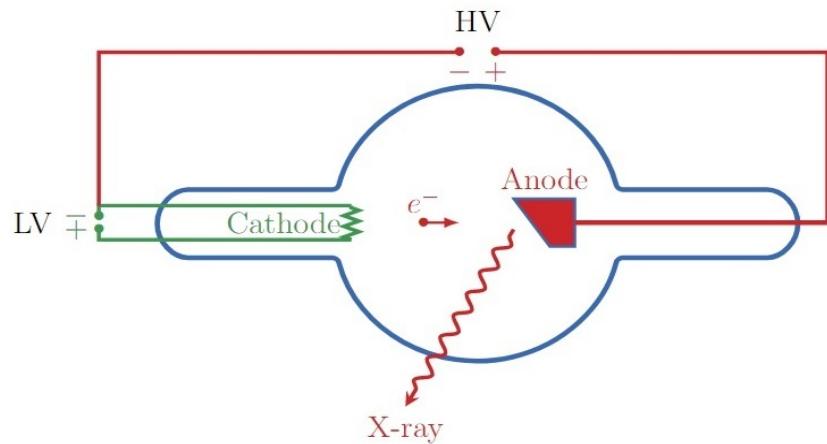


Figura 2.28: Tubo de Coolidge para produção de raios-X. Elétrons são liberados pelo filamento e acelerados pela diferença de potencial entre o catodo (filamento) e o anodo (alvo). Ao colidir com o anodo, raios-X são gerados.

forma de um fóton de raio-X. Tal fóton pertence ao espectro discreto de intensidade de raio-x emitido pela amostra. Normalmente, essas transições ocorrem entre as camadas superiores para as mais próximas do núcleo do átomo, como a camada K (camada eletrônica com $n = 1$) ou a L .

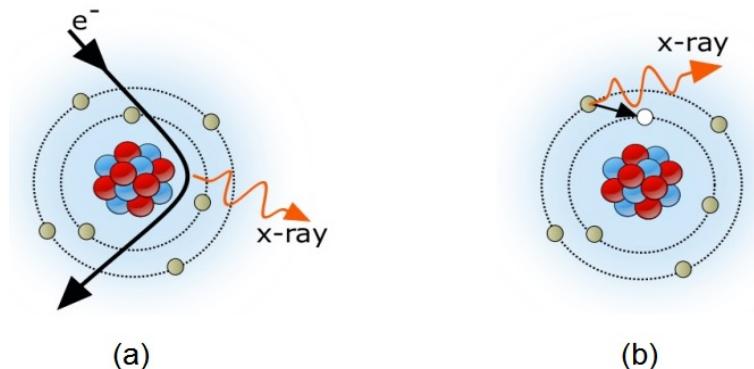


Figura 2.29: (a) um elétron é desviado pela carga positiva do núcleo do átomo do anodo, perdendo parte da sua energia na forma de raio-X com espectro contínuo (Bremsstrahlung - radiação por frenagem, em alemão) ; (b) após ser ejetado pela colisão com o elétron incidente e deixar uma vacância em uma das camadas mais internas do átomo, um outro elétron de maior energia ocupa a vaga, emitindo um fóton de raio-X com comprimento de onda característico (espectro discreto)

Espectro de raio-X e comprimento de onda mínimo

Como foi dito, quando um elétron é arrancado da camada K , um outro elétron do próprio átomo, vindo da camada L , decai para a mesma camada K , emitindo um fóton de raio-X

com energia $E_f = hf = E_L - E_K$, onde E_K e E_L são, respectivamente, as energias dos elétrons nas camadas K e L . Sendo f a energia do fóton, o seu comprimento de onda será igual a $\lambda = c/f$.

A Fig.[2.30] mostra a intensidade de raio-X de uma amostra em função do comprimento de onda. Observe que, superpondo-se à curva de espectro contínuo, que está associada à radiação por frenagem, há dois picos de radiação, K_α e K_β , associados ao espectro discreto, e que ocorrem devido às transições eletrônicas nos átomos do alvo entre as camadas $L \rightarrow K$ e $M \rightarrow K$.

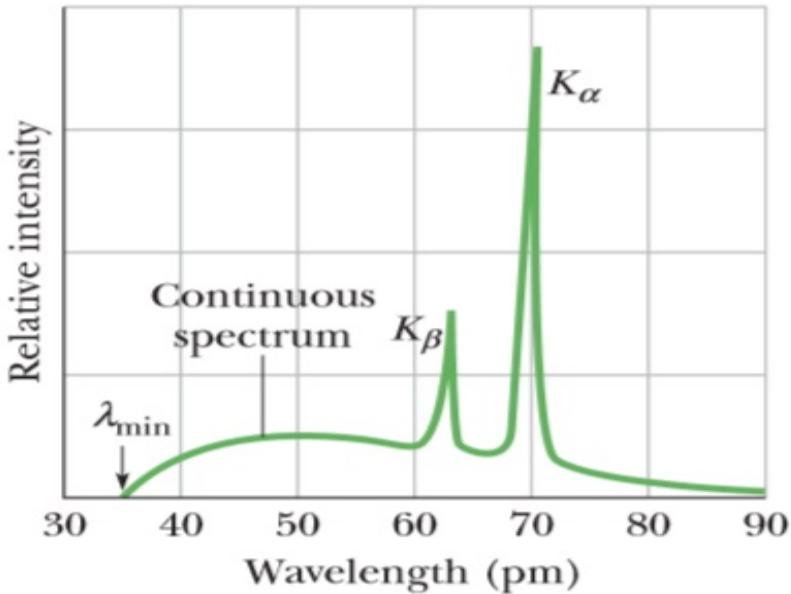


Figura 2.30: Intensidade da radiação de raio-X versus comprimento de onda, para uma amostra de molibdênio ($Z = 42$), submetida à tensão de 35 kV.

Ao realizar experimentos com tubos de raio-X, Duane e Hunt obtiveram uma fórmula empírica que mostrava que havia uma correlação entre a voltagem V aplicada entre o filamento e o alvo e o comprimento de onda mínimo λ_m da radiação:

$$\lambda_m = \frac{1,24 \cdot 10^3}{V} \text{ nm}$$

Tal resultado não poderia ser explicado pela teoria clássica do eletromagnetismo, pois o comprimento de onda não determinaria a energia da radiação. Einstein, usou a teoria corpuscular da luz para chegar à equação acima (equação de Duane-Hunt), considerando que a energia máxima do fóton de raio-X deveria ser igual à energia cinética adquirida pelo elétron (K_e) acelerado entre o catodo e o anodo:

$$K_e = eV = E_{max} = hf_{max} = \frac{hc}{\lambda_m}$$

ou

$$\lambda_m = \frac{hc/e}{V} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^{-1}}{V} \text{ m} = \frac{12,431 \cdot 10^{-7}}{V} \text{ m}$$

resultando em

$$\boxed{\lambda_m = \frac{1,2431 \cdot 10^3}{V} \text{ nm}}$$

e concordando com a observação experimental de que quanto maior a tensão aplicada entre o filamento e o alvo, menor o comprimento de onda mínimo da radiação-X e maior a sua energia máxima.

Portanto, o resultado acima é mais uma evidência da dualidade onda corpúsculo para a luz.

Problema resolvido

Para o comprimento de onda $\lambda = 3,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, calcule a tensão V_m mínima para a geração de raio-X:

Solução

$$V_m = \frac{1,2431 \cdot 10^3 \text{ nm}}{3,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}} \text{ volt}$$

ou

$$V_m = 35,5 \text{ kV}$$

2.8 Produção de pares

$$hf = mc^2 + m'c^2$$

$$\frac{hf}{c} = mv \cos \theta + m'v' \cos \theta'$$

$$\underbrace{mv \cos \theta}_{<mc} + \underbrace{m'v' \cos \theta'}_{<m'c} = mc + m'c$$

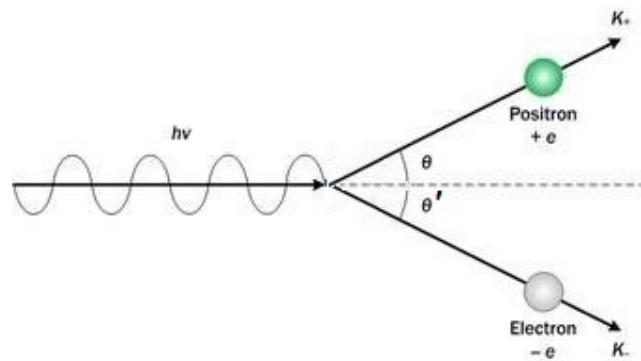


Figura 2.31:

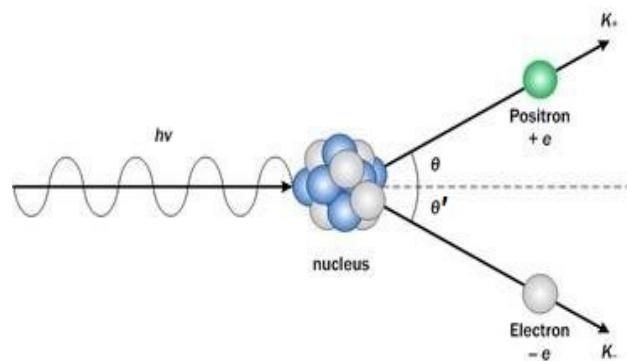


Figura 2.32:

Problemas

- 1) Um satélite artificial ou uma astronave em órbita terrestre pode ficar eletricamente carregado em virtude da perda de elétrons por efeito fotoelétrico. Tal efeito é provocado pelos raios solares que incidem sobre a sua superfície externa. Suponha que um satélite esteja revestido por platina, metal que tem uma das maiores funções trabalho: $f = 5,32 \text{ eV}$. Determine o maior comprimento de onda do fóton capaz de ejetar elétrons da platina. (Os satélites têm que ser projetados de modo a minimizar este efeito.)
 - 2) Qual é o comprimento de onda do fóton emitido na transição entre o terceiro estado excitado e o estado fundamental no átomo de hidrogênio?
 - 3) Em uma transição para um estado com energia de excitação igual à $10,19 \text{ eV}$, um átomo de hidrogênio emite um fóton de 4.890 \AA . Determine:
 - a) As energias de ligação dos estados inicial e final.
 - b) Os números quânticos n dos estados inicial n_i e final n_f .

Dado: $hc = 12,40 \cdot 10^3 \text{ eV\AA}$
 - 4) Calcule a velocidade de recuo de um átomo de hidrogênio que, inicialmente em repouso, emite um fóton numa transição do estado com $n = 4$ diretamente para o estado fundamental.
 - 5) Um átomo de hidrogênio é excitado de um estado com $n = 1$ até um estado com $n = 4$.
 - a) Calcule a energia que deve ser absorvida pelo átomo.
 - b) Calcule, e mostre num diagrama de níveis, as diferentes energias dos fótons que podem ser emitidos se o átomo retornar ao estado $n = 1$.
 - 6) Um fóton choca-se com um elétron inicialmente em repouso. Sabendo que os comprimentos de onda inicial e final do fóton são tais que $\sqrt{\lambda\lambda'/2} = \lambda_C = h/(m_o c)$, qual será a energia máxima possível a ser transmitida ao elétron?
 - 7) Raios X com $\lambda = 0,71 \text{\AA}$ ejetam fotoelétrons de uma folha de ouro. Os elétrons descrevem círculos de raios r em uma região onde há um campo B , tal que $rB = 1,88 \cdot 10^{-4} \text{ tesla.m}$.
- Dados: $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$; $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.
- Calcule:
- a) A energia cinética máxima dos fotoelétrons.
 - b) O trabalho realizado ao remover o elétron da folha de ouro.
- 8) A distribuição espectral da radiação de um corpo negro à temperatura T na escala Kelvin é dada por $R_T(\nu)$, tal que $R_T(\nu)d\nu$ é a intensidade da radiação emitida entre ν e $\nu + d\nu$. Sabendo que esta quantidade é dada por

$$R_T(\nu) = \frac{2\pi}{c^2} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1},$$

- a) Faça um esboço de $R_T(\nu) \times \nu$.
- b) Deduza a Lei de Wien, ou seja, mostre que $T \propto \nu_M$ (ν_M =frequência em que $R_T(\nu)$ é máxima).

Dado: Se $f(x)$ é dada por $f(x) = e^x(3 - x) - 3$, $f(2,82) = 0$.

- c) Deduza a Lei de Stefan, ou seja, calcule para uma temperatura T a intensidade total irradiada.

Dado: $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n^4 = \pi^4/90$.

- 9) Qual é a direção e o sentido de propagação de um fóton, após ter sido espalhado sucessivamente por dois elétrons inicialmente em repouso, em relação à direção e o sentido antes dos choques, se os comprimentos de onda inicial, λ , e final, λ'' , estão relacionados pela equação $\lambda'' = \lambda + 2\lambda_C$. Faça um diagrama das interações.

Resp.: $\cos \theta_1 + \cos \theta_2 = 0$, onde θ_1 e θ_2 são os ângulos de desvio do fóton após cada colisão.

- 10) Numa transição entre um estado excitado n e o estado fundamental, um átomo de hidrogênio de massa m_H , recua com velocidade de $4,2 \text{ m/s}$ após a emissão de um fóton. Calcule o valor de n .

- 11) Considere um fóton de energia E_1 em uma colisão com um elétron inicialmente em repouso. Usando as leis de conservação aplicadas ao Efeito Compton:

- a) determine a energia cinética máxima do elétron após o espalhamento, em função de E_1 e da energia de repouso do elétron;
- b) calcule o que se pede no item (a), considerando $\lambda_1 = 0,0711 \text{ nm}$.

- 12) A função trabalho do Césio é igual a $1,9 \text{ eV}$.

- a) Determine a frequência mínima do fóton para que o efeito fotoelétrico seja observado.
- b) Calcule o potencial de corte para os seguintes comprimentos de onda: 300 nm ; 400 nm .

- 13) Quando se incide fótons de comprimentos de onda iguais a $0,350 \mu\text{m}$ e $0,700 \mu\text{m}$ sobre a superfície de determinado material, observa-se que num dos casos a velocidade máxima dos elétrons arrancados é o triplo da velocidade máxima no outro caso.

- a) Determine a função trabalho desse material (em eV).
- b) Determine o maior comprimento de onda dos fótons que conseguem arrancar elétrons desse material.

- 14) Um elétron em um tubo de RX, acelerado até uma energia cinética de 50 keV , sofre duas colisões sucessivas com os núcleos dos átomos que formam o metal no anodo, antes de atingir

o repouso. Nesses processos, o elétron emite radiação, de tal forma que o comprimento de onda λ do segundo fóton emitido é 0,95 Å maior do que o do primeiro fóton. Determine:

- a) os comprimentos de onda dos fótons emitidos;

Resp.: $\lambda_1=0,31$ Å ; $\lambda_2=1,26$ Å

- b) a energia do elétron após a emissão do primeiro fóton.

Resp.: $E = 522$ keV

15) A série de Balmer provém das possíveis transições no átomo de hidrogênio em que o estado final corresponde ao número quântico $n = 2$.

Determine o maior comprimento de onda presente na série de Balmer.

16) Supondo que o elétron se comporte como uma partícula clássica, i.e., uma esfera homogênea com 10^{-15} m de raio, calcule a velocidade v tangencial de um ponto situado no equador do elétron, e escreva seu resultado na forma de v/c (velocidade da luz). Comente o seu resultado.

17) Se o momento angular L da Terra em torno do Sol fosse quantizado segundo o modelo de Bohr,

- a) qual seria o valor do número quântico para L ?

b) qual seria a energia liberada em uma transição para o nível de energia imediatamente inferior ao encontrado no item (a)?

18) O elétron num determinado átomo de hidrogênio encontra-se no orbital f , onde $\ell=3$. Determine o menor valor possível do ângulo entre o vetor momento angular orbital do elétron e o eixo z .

19) Determine o maior comprimento de onda presente na Série de Paschen, onde $n_f = 3$ (n_f é o número quântico final da transição).

20) A energia cinética máxima que pode ser fornecida a um elétron em um evento de espalhamento de Compton desempenha um papel importante no levantamento de espectros de raios gama usando cintilômetro. Esta energia máxima é conhecida como borda de Compton. Suponha que a borda de Compton medida em um certo experimento seja 520 keV.

- a) Calcule a energia cinética máxima do elétron em keV;

- b) Calcule o comprimento de onda, em nanômetros, dos raios gama incidentes.

21) Um elétron e um pósitron se movem um em direção ao outro com a mesma velocidade escalar não relativística de $3 \cdot 10^6$ m/s. As duas partículas se aniquilam mutuamente, produzindo dois fótons. Considerando a energia de repouso do elétron igual a 0,511 MeV, calcule:

- a) os comprimentos de onda de elétron e do pósitron, em nanômetros;

- b) a energia em MeV dos fótons.
- 22) Considere que em um íon He^+ o elétron encontra-se na 1^a órbita de Bohr (estado fundamental). Determine a frequência de rotação (em Hz) deste elétron em torno do núcleo.
- 23) Uma partícula de massa m move-se numa órbita circular em uma região em que a energia potencial é dada por $U = kr^2/2$, onde $k > 0$ e r é a distância ao centro de forças. Determine, usando a condição de quantização de Bohr:
- a) os possíveis raios das órbitas;
 - b) os possíveis níveis de energia do sistema.
- 24) Um feixe de luz incide sobre uma superfície de potássio; considerando todo o efeito ocorrendo na primeira camada atômica da placa, calcule, de acordo com a teoria clássica, o intervalo de tempo mínimo para emissão de fotoelétrons.
- Dados: intensidade da luz: 10^{-2} W/m^2 ; função trabalho do potássio: 2,22 eV; número de átomos por área na superfície da placa: $3,2 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$
- Resp.: $\Delta t = 1.136,64 \text{ s} \approx 19 \text{ min}$ (Portanto, o resultado obtido pela teoria clássica afirma que a ejeção do fotoelétron não ocorre instantaneamente, o que contrasta totalmente com o observado e com a proposta apresentada por Einstein.)
- 25) Quando uma determinada superfície metálica é iluminada com luz de frequência $8,40 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$, são emitidos elétrons de energia máxima 0,52 eV. Quando a mesma superfície é iluminada com luz de frequência $1,20 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$ a energia máxima dos elétrons emitidos passa a ser de 1,97 eV. A partir destes dados, determine a função trabalho da superfície e o valor da constante de Planck.
- 26) Luz monocromática de comprimento de onda $\lambda = 410 \text{ nm}$, proveniente de uma fonte com intensidade I , incide sobre três superfícies metálicas constituídas de lítio (Li), berílio (Be) e mercúrio (Hg). As funções de trabalho destes materiais são dadas por $\phi_{Li} = 2,3 \text{ eV}$, $\phi_{Be} = 3,9 \text{ eV}$ e $\phi_{Hg} = 4,5 \text{ eV}$, respectivamente.
- a) Determine em que casos é possível observar o efeito fotoelétrico.
 - b) Calcule a diferença de potencial necessária para frear os fotoelétrons (potencial frenador ou potencial de corte) nos casos em que os fotoelétrons são observados, conforme o item (a).
 - c) Se ao invés da fonte com intensidade I tivéssemos utilizado uma fonte com intensidade $2I$, mas com o mesmo comprimento de onda $\lambda = 410 \text{ nm}$, como mudariam os itens (a) e (b) e o número de fotoelétrons emitidos?

Capítulo 3

Ondas de matéria

3.1 Introdução

Em 1924, o físico francês Louis de Broglie (1892-1987) propôs em sua tese de doutoramento que uma partícula material teria natureza dual, ou seja, poderia, dependendo das circunstâncias, comportar-se como corpúsculo ou como onda. O que ele fez foi estender o conceito de dualidade onda-partícula à matéria, algo que já estava estabelecido para a onda eletromagnética desde a publicação do trabalho de Planck de 1900 sobre a radiação de corpo negro, e o de Einstein para o efeito fotoelétrico de 1905.

Assim como ocorre com os fótons, de Broglie propôs que o momento de uma partícula de massa m e velocidade u seja dado por

$$p = mu = \frac{h}{\lambda} \quad (3.1.1)$$

onde λ é o comprimento de onda da partícula e $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s é a constante de Planck.

Observe que mu é o momento descrito para a matéria na sua representação corpuscular, enquanto h/λ dá o momento na sua representação ondulatória. Neste capítulo, iremos obter a representação ondulatória da energia da partícula em função da sua frequência.

Em 1927 a equação de de Broglie foi experimentalmente confirmada em 1927 pelos físicos Clinton Davisson e Lester Germer. Eles dispararam elétrons sobre um cristal de níquel e o padrão de difração resultante concordava com os valores previstos.

3.2 Ondas harmônicas e pacotes de onda

Uma onda harmônica propagando-se no sentido positivo do eixo x pode ser representada pela função senoide abaixo:

$$\psi(x, t) = \psi_0 \sin(kx - \omega t)$$

onde ψ_0 é a amplitude da onda; $k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda, sendo λ o comprimento de onda e $\omega = 2\pi\nu$ a sua frequência angular, sendo ν a frequência e $\tau = 1/\nu$ o período de oscilação. Finalmente, a velocidade de propagação da onda é dada por $v = \lambda\nu = \omega/k$.

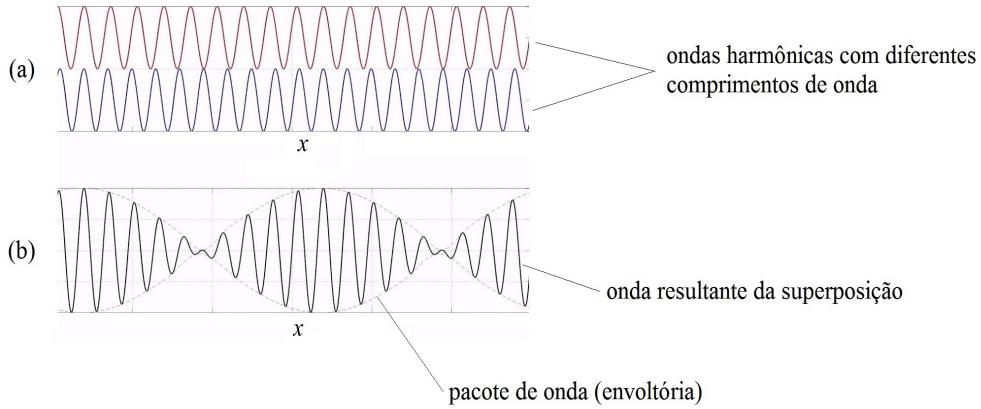


Figura 3.1: (a): ondas harmônicas ; (b): superposição das ondas em (a).

Qual seria velocidade da partícula material se a onda for formada pela superposição de duas ou mais ondas harmônicas? É o que vamos ver a seguir para o caso da superposição de duas ondas harmônicas.

Considere duas ondas harmônicas de comprimentos de onda distintos que se superpõem como está ilustrado na Fig.[3.1 (a)]). O resultado desta superposição é uma onda não harmônica com vários *pacotes de onda* (Fig.[3.1 (b)]).

Por exemplo, se as ondas harmônicas são dadas por $\psi_1(x, t) = \psi_0 \sin(kx - \omega t)$ e $\psi_2(x, t) = \psi_0 \sin(k'x - \omega't)$, a superposição¹ destas será dada por:

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) = \psi_0 \sin(kx - \omega t) + \psi_0 \sin(k'x - \omega't)$$

Aplicando a identidade trigonométrica $\sin a + \sin b = 2 \cos((a - b)/2) \sin((a + b)/2)$, $\psi(x, t)$ passa a ser reescrita como:

$$\psi(x, t) = 2\psi_0 \cos[(k' - k)x/2 - (\omega' - \omega)t/2] \sin[(k' + k)x/2 - (\omega' + \omega)t/2] \quad (3.2.2)$$

onde o seno em $\psi(x, t)$ na Eq.[3.2.2] desloca-se à *velocidade de fase*

$$v = \frac{\omega' + \omega}{k' + k}$$

enquanto o pacote de onda, cuja forma é definida pelo cosseno, desloca-se com a *velocidade de grupo*

$$v_g = \frac{\omega' - \omega}{k' - k} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

¹Estamos aqui supondo que as ondas de matéria podem ser formadas pela superposição de ondas harmônicas, de forma análoga às teorias para ondas mecânicas e eletromagnéticas. Isto se tornará claro quando obtivermos a equação de onda de matéria.

Para meios não dispersivos, as ondas harmônicas têm velocidades idênticas, independentemente de seus comprimentos de onda, o que faz com que $v = v_g$. Por outro lado, para os meios dispersivos, nos quais ondas harmônicas com diferentes comprimentos de onda propagam-se com diferentes velocidades, a velocidade de grupo é diferente da velocidade de fase ($v \neq v_g$).

Velocidade de grupo de uma partícula livre

Ao contrário do exemplo visto acima, quando a superposição de apenas duas ondas harmônicas gera uma sucessão infinita de pacotes de onda, uma dada superposição contínua de infinitas de ondas harmônicas sobre todos os comprimentos de onda gera apenas um pacote de onda², como mostrado na Fig.[3.2].

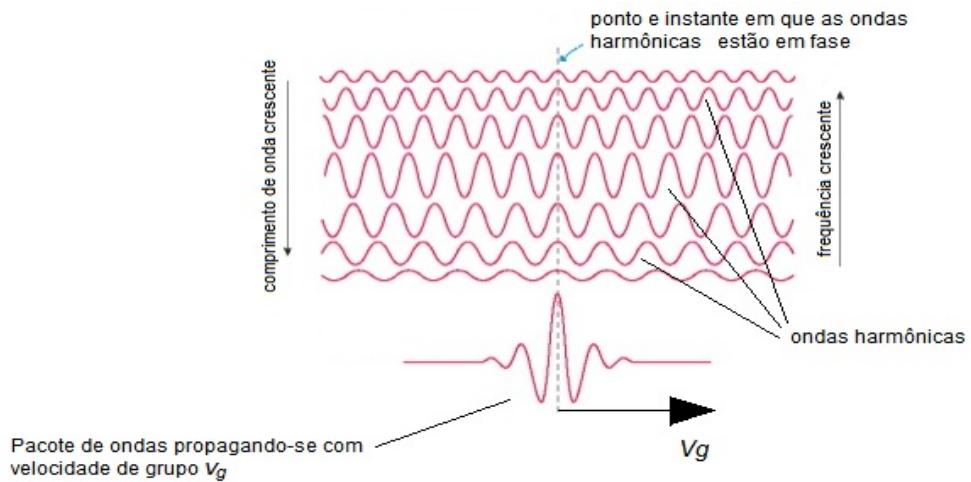


Figura 3.2: Pacote de onda formado pela superposição de infinitas ondas harmônicas com diferentes valores de λ . v_g é a velocidade (velocidade de grupo) do pacote de ondas.

A velocidade de grupo para uma superposição, neste caso, é dada por

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

onde a derivada é tomada para um dado k que dá a velocidade da partícula presente no seu momento, ou seja: $v_g = \partial \omega / \partial k = u = \hbar k / m = p/m$.

O argumento para afirmar que $u = v_g$ é o seguinte: uma vez que $\psi(x, t) = 0$ é equivalente à ausência de partícula, então esta deve estar em alguma coordenada x em uma região espacial onde a função de onda $\psi(x, t)$ é não nula, ou seja, em alguma coordenada do pacote de onda. Como consequência direta, é razoável supor que a velocidade da partícula seja identificada com a do pacote de onda.

²A superposição de infinitas ondas harmônicas sobre um espectro contínuo de comprimentos de onda é uma *Transformada de Fourier Inversa*: $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{-ikx}$.

3.3 Energia de uma partícula livre

Faremos aqui o cálculo da energia de uma partícula cuja onda de matéria tem a forma de um pacote de ondas como o da Fig.[3.2].

Das equações para o momento e energia cinética para uma partícula de massa m , dadas por $p = mu = \hbar k$ e $E = mu^2/2$, temos:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

onde u é a velocidade e k o número de onda. Derivando E em relação a k , temos:

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar^2 k}{m} = \hbar u$$

Como já foi argumentado, a descrição matemática para a velocidade de uma partícula na mecânica quântica é definida como sendo a velocidade de grupo ou velocidade do pacote de ondas. Então, escrevendo $u = v_g = \partial\omega/\partial k$ na equação da energia, vem:

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \hbar \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial k} (E - \hbar\omega) = 0$$

A solução mais simples para esta equação diferencial é dada por:

$$\boxed{E = \hbar\omega} \quad (3.3.3)$$

ou

$$\boxed{E = h\nu} \quad (3.3.4)$$

Observe que, enquanto $E = mu^2/2$ é derivada a partir de uma teoria exclusivamente corpuscular para a matéria, a expressão $E = \hbar\omega$ depende da frequência da sua onda associada, que é uma grandeza derivada da mecânica ondulatória. O mesmo se pode dizer sobre as representações do momento, dadas por $p = mu$ e $p = h/\lambda$, respectivamente. O fato de um mesmo ente físico material ser descrito como corpúsculo ou onda estabelece a sua natureza dual.

Apesar de a expressão $E = \hbar\omega$ ter sido calculada para um pacote de ondas, ela é considerada válida mesmo que esta esteja associada a apenas uma onda harmônica, resultado que será fundamental para a obtenção da equação de onda de Schrödinger.

Problema resolvido

Calcule a velocidade de grupo para uma partícula livre não relativística e compare o seu valor com a velocidade de fase.

Solução

Sabendo que $E = \hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$, vem:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Então:

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

e

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m}$$

Dos resultados acima, temos:

$$v_g = 2v$$

Este resultado evidencia um caso real em que a onda associada à partícula tem velocidade de grupo diferente da velocidade de fase. Como visto, isto sempre ocorre quando a velocidade de fase depende de k .

Problema resolvido

Calcule a energia de uma partícula livre relativística.

Solução

A equação para a energia livre de uma partícula na relatividade é dada pela equação $E = mc^2$ ou $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$, sendo $p = mu = \hbar k$ e $u = \partial \omega / \partial k$, de onde vem:

$$E^2 = \hbar^2 k^2 c^2 + m_0^2 c^4$$

Derivando a equação acima em relação a k , temos:

$$2E \frac{\partial E}{\partial k} = 2\hbar^2 k c^2 = 2\hbar m u c^2 = 2\hbar m c^2 \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

Mas $E = mc^2$, então

$$mc^2 \frac{\partial E}{\partial k} = mc^2 \hbar \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

ou

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\partial(\hbar\omega)}{\partial k}$$

de onde se pode extrair a equação para a energia de uma partícula livre relativística:

$$E = \hbar\omega$$

Portanto, a expressão da energia é dada pela mesma equação, tanto para o caso não relativístico como para o relativístico.

Problemas

1) Um feixe de elétrons é acelerado a partir do repouso e passa por um par de fendas estreitas idênticas dispostas com uma distância de 1,25 nm entre si. Você observa que a primeira franja escura da interferência de dupla fenda ocorre a $\pm 18^\circ$ da direção original do feixe quando observada em uma tela distante.

a) Calcule a velocidade dos elétrons. Esses elétrons são relativísticos? Explique.

Resp.: $9,42 \cdot 10^5$ m/s $<< c$; não relativísticos.

b) Calcule a diferença de potencial usada para acelerar os elétrons?

Resp.: $V_{ac} = 2,53$ V

2) Calcule a velocidade de fase e a velocidade de grupo de uma partícula relativística com número de onda k e frequência angular ω .

Capítulo 4

O princípio da incerteza

4.1 O princípio da incerteza de Heisenberg

Iniciaremos a discussão sobre o princípio da incerteza analisando novamente uma onda harmônica. A onda na Fig.[4.1] tem um único comprimento de onda, igual a λ , e estende-se uniformemente por todo o eixo x . Se esta for uma onda de matéria, em que região do eixo a partícula se encontra? Observe os intervalos de largura Δx entre as coordenadas a, b e entre c, d ; a onda tem nestes intervalos comportamentos idênticos. Então, afirmar que a partícula esteja entre a e b é equivalente a dizer que ela esteja entre b e c , assim como em todos os outros infinitos intervalos com tamanho Δx ao longo de todo o eixo x .

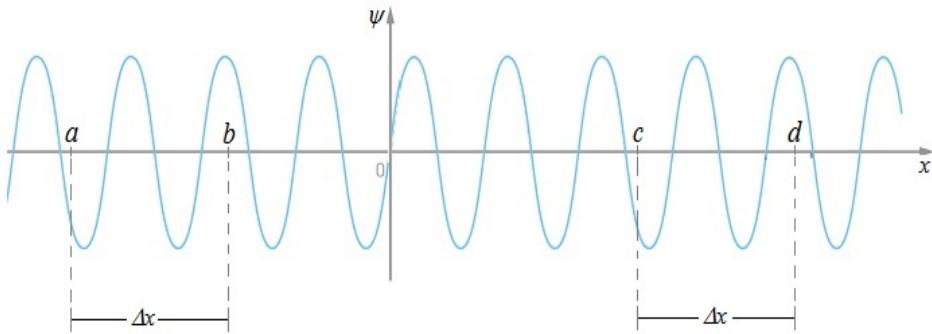


Figura 4.1:

Portanto, uma função de onda dada por $\psi = \psi_0 \sin(kx - \omega t)$ representa uma partícula com momento $p = h/\lambda$ perfeitamente definido, mas com uma incerteza absoluta na sua posição.

Por outro lado, se a onda assume valores não nulos apenas em um pacote de onda de tamanho Δx (Fig.[4.2]), podemos dizer que a partícula está localizada nesta região do espaço. Entretanto, uma onda na forma de um pacote vem da superposição de infinitas ondas harmônicas, cada uma com um valor de λ ou de p . Ou seja, para que a partícula

esteja localizada em uma região do espaço com uma incerteza Δx , devemos incorporar uma incerteza com infinitos valores de p com uma incerteza Δp .

A Fig.[4.2] ilustra mais uma vez, conforme visto no capítulo anterior, a formação de um pacote de onda pela superposição de ondas harmônicas com infinitos comprimentos de onda. O pacote de onda (curva envoltória em linha pontilhada) propagando-se com a velocidade de grupo (velocidade de deslocamento da envoltória) e a velocidade de fase (velocidade de propagação da linha contínua).

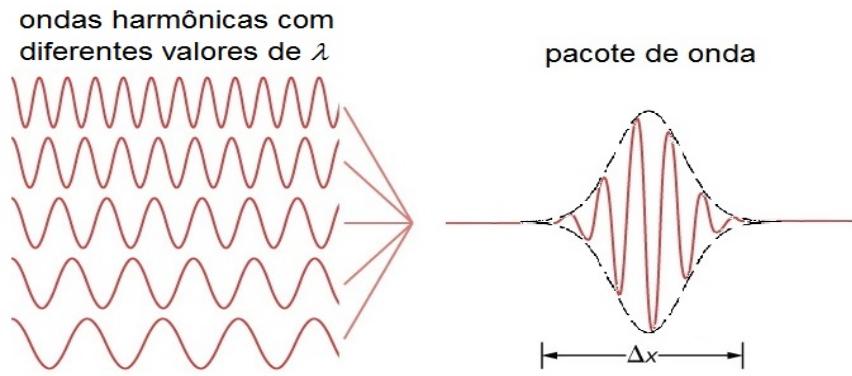


Figura 4.2: Pacote de onda formado pela superposição de ondas harmônicas com diferentes valores de λ .

Em resumo, para termos uma informação cada vez mais precisa da posição da partícula, fazendo $\Delta x \rightarrow 0$, teríamos que tomar o intervalo do momento no limite em que $\Delta p \rightarrow \infty$ (incerteza absoluta do momento). Esta é a essência do princípio da incerteza.

Em 1927, o físico alemão Werner Karl Heisenberg demonstrou que este produto satisfaz às seguintes desigualdades para as coordenadas cartesianas da posição e do momento:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 ; \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2 ; \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$$

onde $\hbar = h/2\pi = 1,0546 \cdot 10^{-34}$ J.s e $\hbar/2 = 5,28 \cdot 10^{-35}$ J.s, sendo h a constante de Planck.

Os efeitos da incerteza previstos na mecânica quântica são significativos apenas para sistemas extremamente pequenos como moléculas, átomos, partículas elementares e cordas (ver Teoria M). Neste casos, o produto de grandezas físicas tais como posição e momento têm valores comparáveis, em ordem de grandeza, do valor de $\hbar/2$. Por exemplo, em um átomo a incerteza na posição do elétron tem a mesma escala da dimensão do próprio átomo, de tal forma que não faz sentido tentar calcular ou medir a sua posição em um instante qualquer. Mais ainda, não há qualquer sentido em tentar calcular ou medir uma trajetória para partículas atômica ou subatômica.

Tal fato evidencia que, nestas escalas, não há qualquer sentido em afirmar que um elétron esteja em um posição definida e se deslocando em dada direção com determinada velocidade. Sendo assim, o princípio da incerteza diz que para sistemas físicos em escalas muito

pequenas, não há qualquer sentido dizer que uma partícula desloca-se no espaço segundo uma trajetória definida.

O princípio da incerteza, portanto, diz que não há relação de causalidade estrita no universo, pois nem as partículas "sabem" onde estão e para onde vão. O fato de corpos macroscópicos obedecerem com grande precisão às leis estritamente causais da física clássica, decorre das previsões probabilísticas da mecânica quântica. Por exemplo, uma bola lançada contra uma parede poderia atravessá-la sem destruí-la, mas, por se tratar de um sistema macroscópico, a probabilidade para isso ocorrer é muito pequena. Veremos no capítulo que trata das aplicações da equação de Schrödinger, que um partícula pode atravessar uma barreira de potencial classicamente proibida como a bola através da parede em uma escala quântica; previsão teórica já observada inúmeras vezes.

O princípio de Heisenberg é uma consequência direta da natureza dual da matéria na forma de onda-partícula. As incertezas presentes no princípio são completamente distintas dos erros das medidas experimentais. Esperar que as incertezas da posição e do momento possam ser eliminadas é o mesmo que pensar que se possa revogar alguma lei da física.

Problema resolvido

Calcule o valor mínimo da incerteza do momento linear de uma partícula de massa $m = 0.1$ g, confinada em uma dimensão no eixo x ao longo de uma extensão igual a $\Delta x = 10$ cm deslocando-se a uma velocidade igual $v = 10$ m/s. Compare a incerteza Δp com o seu momento, respectivamente. Discuta os resultados. Lembre-se que este é um sistema clássico.

Solução

A incerteza na posição da partícula é aproximadamente igual à dimensão da caixa: $\Delta x = 10$ cm, então:

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

Substituindo os valores, vem:

$$(\Delta p)_{min} = 5,28 \cdot 10^{-34} \text{ kg.metro/s}$$

Comparando Δp com o momento $p = mv$ cda partícula, vem:

$$\frac{(\Delta p)_{min}}{mv} = \frac{5,28 \cdot 10^{-34} \text{ kg.m/s}}{10^{-4} \text{ kg} \cdot 10 \text{ m/s}} = 5,28 \cdot 10^{-31} \approx 10^{-30} \ll 1$$

A incerteza $\Delta p = 5,28 \cdot 10^{-31}$ kg.m/s é extremamente pequena em um sistema clássico. Nenhum sistema como este requer uma precisão numa escala com tantas ordens de grandeza menor do que o momento da partícula.

Em uma medida experimental clássica, a incerteza no momento seria tão grande comparada à incerteza intrínseca estimada pelo princípio da incerteza que esta diferença sequer seria observada.

Sendo assim, mesmo que se reduza a incerteza de p para valores mensuráveis e bem maiores do que o calculado acima, a incerteza em x tenderá a cair para valores de dimensões atômicas; também muito aquém do que se pode medir.

Problemas

- 1) Imagine um jogo de bola num universo cuja constante de Planck fosse 0,60 J.s. Qual seria a incerteza na posição de uma bola de 0,50 kg que estivesse em movimento a 20 m/s, com uma incerteza de 1,0 m/s? Por que seria difícil apanhar essa bola?

Capítulo 5

Equação de Schrödinger

5.1 Introdução

Após de Broglie propor a dualidade onda-corpúsculo para a matéria, em sua tese de doutorado em 1924, e Davisson e Germer, em 1927, terem comprovado experimentalmente a sua natureza ondulatória, ficou claro para os físicos que uma equação de onda para a matéria deveria existir, assim como existia uma equação de onda para a luz.

Coube ao físico austríaco Erwin Schrödinger, em 1926, em obter a primeira equação de onda para a matéria; uma equação que descrevia o seu comportamento no caso não relativístico.

Em uma de suas primeiras aplicações, Schrödinger usou a sua equação para calcular a função de onda de um elétron no átomo de hidrogênio, de onde obteve a expressão matemática para a energia do átomo de H, idêntica a que Bohr havia obtido em 1913. Desses cálculos, ele também obteve os valores do momento angular (distinto do proposto por Bohr), assim como a sua componente sobre o eixo z .

Neste capítulo, faremos uma abordagem bastante intuitiva; portanto, não seguiremos os passos de Schrödinger para a obtenção da equação de onda da matéria, pois o conhecimento necessário para fazê-lo estaria além do que se propõe aqui.

5.2 Operadores, autovalores e autofunções na mecânica quântica

A teoria de Fourier mostra que uma função matemática pode ser dada pela superposição de ondas harmônicas. Ou seja, é dada pela combinação linear de funções que formam a base do espaço de Fourier. Esta base pode ser formada por funções senoidais ou por exponenciais com argumentos complexos, e é esta última forma que utilizaremos aqui:

Sendo assim, a função de base deste espaço para uma partícula livre não relativística de massa m deve ser uma função harmônica com o número de onda $k = 2\pi/\lambda$ e a frequência

$\omega = 2\pi\nu$ da partícula:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

onde Ψ_0 é uma constante. O argumento da função, dado por $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$, mostra que a função é periódica no espaço a cada intervalo $\lambda = 2\pi/k$ e no tempo a cada período $\tau = 2\pi/\omega$ (este assunto está detalhado no volume *Física 2*).

Operador energia

O operador energia¹ \hat{H} é obtido derivando a função $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em relação a t :

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \Psi_0 \frac{\partial}{\partial t} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = \Psi_0 (-i\omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = -i\omega \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Escrevendo $\omega = E/\hbar$, temos:

$$\boxed{\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = E\Psi(\mathbf{r}, t)} \quad ; \quad \boxed{\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \quad (5.2.1)$$

A equação acima mostra que quando o operador $\hat{H} = i\hbar\partial/\partial t$ atua sobre a função de onda associada à energia $E = \hbar\omega$ obtém-se o produto desta energia pela própria função. Na linguagem da álgebra linear, podemos dizer que a aplicação de um operador $\hat{H} = i\hbar\partial/\partial t$ sobre a autofunção $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tem como autovalor a energia E .

A Eq.[5.2.1] é a equação de Schrödinger na sua representação formal (veremos a equação diferencial de Schrödinger em detalhes na próxima seção). Ela diz que o operador \hat{H} , chamado de operador hamiltoniano, determina a evolução temporal da função de onda da partícula. Pode-se mostrar que a equação de Schrödinger, como está nesta representação, aplica-se também ao caso relativístico, uma vez que a energia de uma partícula com alta energia também é dada por $E = \hbar\omega$.

Operador momento

O operador momento \hat{p} é obtido derivando a função $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em relação às suas coordenadas:

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial x} = \Psi_0 \frac{\partial}{\partial x} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = \Psi_0 k_x e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = ik_x \Psi(\mathbf{r}, t)$$

ou

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = ik_x \Psi(\mathbf{r}, t)$$

¹Na Mecânica Clássica, H é o hamiltoniano de um sistema físico na teoria de Hamilton.

e para y e z :

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = i k_y \Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = i k_z \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Multiplicando pelos unitários cartesianos e somando as equações acima, temos:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = i(k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k}) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

ou

$$\nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = i \mathbf{k} \Psi(\mathbf{r}, t) ;$$

Mas o momento é dado por $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, de onde vem:

$$\boxed{\hat{p} \Psi(\mathbf{r}, t) = -i \hbar \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}, t)} ; \quad \boxed{\hat{p} = -i \hbar \nabla}$$

Aqui também podemos analisar esta equação a partir de uma abordagem dada pela álgebra linear, onde $\hat{p} = -i \hbar \nabla$ é o operador momento.

Aplicando o operador ∇ mais uma vez, temos:

$$\nabla \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot (i \mathbf{k} \Psi(\mathbf{r}, t)) = i \mathbf{k} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)$$

ou

$$\boxed{\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = -k^2 \Psi(\mathbf{r}, t)} \quad (5.2.2)$$

A Eq.[5.2.2] acima é um caso especial da equação de Schrödinger espacial quando a partícula não está submetida a um potencial. Veja a seção seguinte sobre a equação no caso geral.

5.3 Equação de Schrödinger

Nesta seção, obteremos a equação de Schrödinger de uma forma simples e intuitiva; muito menos rigorosa daquela percorrida por Schrödinger.

Considere que a energia potencial da partícula devido à interação com um campo externo seja igual a $U(\mathbf{r})$. Neste caso, a sua energia total é dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (5.3.3)$$

Multiplicando a Eq.[5.3.3] por $\Psi(\mathbf{r}, t)$ e substituindo as expressões de E e de k^2 das equações [5.2.1] e [5.2.2]

$$\underbrace{i\hbar\partial\Psi(\mathbf{r}, t)/\partial t}_{E\Psi(\mathbf{r}, t)} = \frac{1}{2m} \underbrace{\hbar^2 k^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}_{-\hbar^2 \nabla^2} + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.3.4)$$

obtemos a equação de Schrödinger:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t)} \quad (5.3.5)$$

Está implícito, ao fazer as substituições das equações [5.2.1] e [5.2.2] na Eq.[5.3.4], que o resultado que obtivemos para a energia ($E = \hbar\omega$) a partir de uma partícula livre vale também para uma partícula que esteja submetida a um potencial. De fato, é postulado na mecânica quântica que, no caso geral, $\hat{H} = i\hbar\partial/\partial t$ e $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ são os operadores da energia e momento de uma partícula.

Interpretação da função $\Psi(\mathbf{r}, t)$

Da Eq.[5.3.5], percebe-se que a função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ não pode ser uma grandeza física (um observável), como os campos elétrico e magnético nas equações de onda do campo eletromagnético. A razão é clara; não há como $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ser um número real (Verifique!). Desta forma, se a função de onda da mecânica quântica puder fornecer alguma informação da realidade, esta deve vir de uma expressão derivada de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ que matematicamente será fornecida pelo produto da própria função pelo seu conjugado complexo:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \in \Re_+$$

No mesmo ano da obtenção da equação de onda por Schrödinger em 1926, o físico alemão Max Born deu a seguinte interpretação à função $\Psi(\mathbf{r}, t)$:

”A densidade de probabilidade de encontrar a partícula em um ponto do espaço é proporcional ao quadrado da magnitude da função de onda daquele ponto.”

Sendo assim, a probabilidade de a partícula se encontrar em um dado volume ΔV é dada pela integral

$$P = \int_{\Delta V} |\Psi|^2 dv$$

O argumento utilizado por Max Born foi inspirado na equação para a densidade de energia do campo de uma onda eletromagnética e no conceito de fóton, estabelecido por Einstein em 1905. A ideia partiu do seguinte argumento: a densidade de energia do campo

eletromagnético é proporcional ao quadrado do campo, dado por $\mathcal{E} = \epsilon_0 \mathbf{E}^2 / 2$, então, quanto maior o valor de \mathbf{E}^2 , maior é a probabilidade de se encontrar um fóton. O que Born fez foi propor o mesmo para a probabilidade de se encontrar uma partícula de matéria a partir da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

A integração sobre todo o espaço (ΔV_∞) dá a probabilidade de encontrar a partícula em todos os lugares possíveis, portanto, o resultado da integração neste caso deve ser igual a 1:

$$\int_{\Delta V_\infty} |\Psi|^2 dv = 1$$

A integral acima será utilizada sempre que for necessário normalizar a função de onda.

Solução da equação de Schrödinger para um estado estacionário

Um estado estacionário é um estado quântico em que todos os observáveis² são independentes do tempo. Veremos que isto implica que a densidade de probabilidade $\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ torna-se independente do tempo.

A equação de Schrödinger será resolvida para o tempo pelo método de separação de variáveis. Escrevendo a função de onda como o produto de duas funções, uma dependente do tempo e a outra das coordenadas espaciais:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \phi(t)\psi(\mathbf{r})$$

A Eq.[5.2.1] fica escrita como:

$$i\hbar \frac{(\partial \phi(t)\psi(\mathbf{r}))}{\partial t} = E\phi(t)\psi(\mathbf{r})$$

ou

$$\frac{d\phi(t)}{\phi(t)} = -\frac{iE}{\hbar} dt$$

Integrando a equação acima:

$$\int \frac{d\phi(t)}{\phi(t)} = -\frac{iE}{\hbar} \int dt + \log C$$

Onde C é uma constante de integração, que tomaremos como igual a 1 ($\log C = 0$). Pode-se fazer isto porque a função de onda completa é dada pelo produto $\phi(t)\psi(\mathbf{r})$ e qualquer fator constante pode ser 'absorvido' pela função espacial $\psi(\mathbf{r})$, de onde vem:

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

²Um *observável* é uma grandeza física que pode ser medida em laboratório.

Então, a solução para uma partícula com energia E é dada por:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$$

Neste caso, a densidade de probabilidade fica dada por:

$$\rho = \Psi(\mathbf{r}, t)^* \Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) e^{iEt/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$$

ou

$$\rho = |\psi(\mathbf{r})|^2$$

Como havia sido afirmado, em um estado estacionário a densidade de probabilidade depende apenas das coordenadas espaciais.

Problema resolvido

A função de onda espacial de uma partícula é dada por:

$$\psi(x) = 0 \text{ para } x < 0 \text{ e } \psi(x) = b\sqrt{x}e^{-x^2/2a^2} \text{ (}a \geq 0, b \geq 0\text{) para } x \geq 0.$$

- a) Normalize a função de onda;
- b) calcule a probabilidade de encontrar uma partícula em um estado estacionário entre $x = 0$ e $x = a$;

Solução

- a) Normalizar a função de onda é igualar a sua integral sobre todo o espaço a um:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^{\infty} b^2 x e^{-x^2/a^2} dx = \frac{(ab)^2}{2} \int_0^{\infty} e^{-x^2/a^2} d(x^2/a^2) =$$

$$= \frac{(ab)^2}{2} \left(-e^{-x^2/a^2} \right) \Big|_0^\infty = \frac{(ab)^2}{2} = 1$$

b)

$$P = \int_0^a |\psi(x)|^2 dx = \int_0^a b^2 x e^{-x^2/a^2} dx = \frac{(ab)^2}{2} \left(-e^{-x^2/a^2} \right) \Big|_0^a$$

$$P = 1 - e^{-1} = 0,63212\dots$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Ao substituir a solução de onda estacionária na equação de Schrödinger, obteremos a sua equação espacial. Basta substituir a solução $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ na Eq.[5.3.5]:

$$i\hbar \frac{\partial(\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2(\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$$

Derivando em relação ao tempo e posteriormente dividindo a equação por $\exp(-iEt/\hbar)$, temos:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = 0$$

(5.3.6)

A Eq.[5.3.6] é o ponto de partida para a calcularmos a função de onda completa para um estado estacionário de energia E , pois, uma vez obtida a função de onda espacial $\psi(\mathbf{r})$, tem-se a função de onda completa dada por $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt}$.

Cálculo de valores esperados na mecânica quântica

Se uma variável u_i for discreta e P_i for a probabilidade para que $u = u_i$, então o valor médio da grandeza u será dado por um somatório:

$$\langle u \rangle = \sum_{i=1}^n P_i u_i$$

Do contrário, se a variável for contínua, a média será calculada por uma integral.

- Valor esperado da coordenada x -

Uma vez que na mecânica quântica a probabilidade de encontrar uma partícula em um estado estacionário entre x e $x + dx$ (problema unidimensional) é dado por

$$dP = \psi(x)^*\psi(x)dx$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x dP = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi(x)^*\psi(x)dx$$

- Valor esperado da componente p_x -

Analogamente, o valor esperado da componente p_x para um estado estacionário é obtido por

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p_x dP = \int_{-\infty}^{\infty} p_x \psi(x)^*\psi(x)dx$$

mas $p_x\psi(x) = \hat{p}_x\psi(x)$, de onde vem:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \underbrace{p_x \psi(x)}_{\hat{p}_x \psi(x)} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \hat{p}_x \psi(x) dx$$

Sendo assim, se definirmos o operador da coordenada de posição como sendo a própria coordenada, $\hat{x} = x$, tal que $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$, poderemos escrever o valor esperado da mesma forma que para p_x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \hat{x} \psi(x) dx$$

- Valor esperado no caso geral -

As duas últimas equações são aplicações diretas de um outro postulado da mecânica quântica que afirma que o valor esperado de qualquer grandeza física A associada a um operador \hat{A} , ou observável, em todo o espaço e em um instante t é dado por:

$$\langle A \rangle = \int \Psi(\mathbf{r}, t)^* \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t) dV$$

(5.3.7)

Para reobter o valor esperado $\langle x \rangle$ em um estado estacionário a partir da Eq.[5.3.7], basta fazer $\hat{A} \rightarrow \hat{x}$, $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ e $dV \rightarrow dx$:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x)e^{-iEt/\hbar})^* \hat{x} (\psi(x)e^{-iEt/\hbar}) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x)^* e^{iEt/\hbar}) x (\psi(x)e^{-iEt/\hbar}) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x \psi(x) dx \end{aligned}$$

5.4 Superposição de estados quânticos

Por ser uma equação diferencial linear, se duas ou mais soluções forem encontradas para a equação de Schrödinger, então uma combinação linear destas será também uma solução. Por exemplo, sejam $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ e $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ soluções da equação. Substituindo a $\Psi(\mathbf{r}, t) = a_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + a_2\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ na equação, temos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) &= \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) + U(\mathbf{r})(a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) \end{aligned}$$

ou

$$a_1 \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_1 - U(\mathbf{r}) \Psi_1 \right)}_{=0} + a_2 \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_2 - U(\mathbf{r}) \Psi_2 \right)}_{=0} = 0$$

Probabilidade de estados estacionários superpostos

Uma função de onda descrita pela superposição de dois estados estacionários pode ser escrita como uma combinação linear:

$$\Psi(x, t) = a_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + a_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar},$$

onde a_1 e a_2 são constantes. Observe que, neste estado, a partícula não está associada a apenas uma energia. Em alguns destes casos, a partícula pode saltar do estado quântico Ψ_1 para o Ψ_2 e vice-versa, mas existem regras que impedem que algumas dessas transições ocorram. Estas regras, chamadas de *regras de seleção*, serão vistas mais abaixo.

Densidade de probabilidade em uma superposição de estados estacionários

A densidade de probabilidade $\rho(x, t)$ da função de onda é dada por:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 = \Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = \\ &= (a_1^* \psi_1^*(x) e^{iE_1 t/\hbar} + a_2^* \psi_2^*(x) e^{iE_2 t/\hbar}) (a_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + a_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}) \end{aligned}$$

ou

$$\rho(x, t) = |a_1|^2 |\psi_1|^2 + |a_2|^2 |\psi_2|^2 + a_1^* a_2 \psi_1^* \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar}$$

O resultado acima mostra que $\rho(x, t)$, ao contrário do caso para um estado estacionário, depende do tempo. Ou seja, a função Ψ transiciona entre os estados Ψ_1 e Ψ_2 com frequência $\nu = (E_1 - E_2)/2\pi\hbar$.

Para calcular a probabilidade de encontrar a partícula em um intervalo arbitrário $[a, b]$, basta fazer a integral abaixo:

$$P = \int_a^b \rho(x, t) dx$$

onde

$$\rho(x, t) = |a_1|^2 |\psi_1|^2 + |a_2|^2 |\psi_2|^2 + a_1^* a_2 \psi_1^* \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar}$$

Ortogonalidade de $\Psi(\mathbf{r}, t)$

Normalização de $\Psi(\mathbf{r}, t) = a_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + a_2\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ e produto interno:

Sendo a função $\Psi(x, t)$ unidimensional no espaço, então, a probabilidade de encontrar a partícula no eixo x deve ser igual a 1; ou seja, não pode depender do tempo:

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = |a_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1|^2 + |a_2|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_2|^2 + \\ + a_1^* a_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* \psi_2 + a_1 a_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1 \psi_2^* = 1$$

Entretanto, a equação acima contém exponenciais dependentes de t , desde que $E_1 \neq E_2$, o que significa que as integrais sobre $\psi_1^* \psi_2$ e $\psi_1 \psi_2^*$ são nulas. Este resultado é importante; ele diz que podemos definir um produto interno³ entre as funções de onda :

$$\boxed{<\Psi_i|\Psi_j> = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_i^* \Psi_j = e^{i(E_i - E_j)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* \psi_j = \delta_{ij}} \quad (5.4.8)$$

implicando também em

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* \psi_j = \delta_{ij}} \quad (5.4.9)$$

onde δ_{ij} é a *função delta de Kronecker*: $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$.

A integral é igual a 1, se $i = j$, porque seria a probabilidade de encontrar a partícula em todo o eixo x caso ela estivesse no estado $\psi_i = \psi_j$.

Sendo assim, podemos escrever:

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

A interpretação do resultado acima é imediata. Se a função estivesse, por exemplo, no estado ψ_1 , $|a_2|^2$ seria nulo enquanto $|a_1|^2$ seria igual a 1 e vice-versa, pois esta seria a solução para que P fosse igual a 1. Ou seja, a probabilidade de a função em um instante t estar no estado ψ_1 é igual a $|a_1|^2$ e de estar no estado ψ_2 é igual a $|a_2|^2$.

³A notação $<\Psi_i|\Psi_j>$ é devido a Paul A. M. Dirac. $|\Psi>$ é o vetor de estado denominado *ket* e $<\Psi|$ é o seu vetor no espaço dual, chamado de *bra*. Sendo assim, o produto interno $<\Psi_i|\Psi_j>$ é chamado de *braket*. Os nomes *bra* e *ket* foram inspirados na palavra inglesa bracket (colchete).

Problema resolvido

- Calcule o valor esperado da posição da partícula no eixo x .

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx = |a_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi_1|^2 + |a_2|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi_2|^2 + \\ &+ a_1^* a_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \psi_1^* \psi_2 + a_1 a_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \psi_1 \psi_2^* \end{aligned}$$

onde $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$

- Calcule o valor esperado do valor esperado do momento p_x :

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (a_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + a_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar})^* \hat{p}_x (a_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + a_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}) dx = \\ &= |a_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* \hat{p}_x \psi_1 + |a_2|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^* \hat{p}_x \psi_2 + \\ &+ a_1^* a_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* \hat{p}_x \psi_2 + a_1 a_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^* \hat{p}_x \psi_1 \end{aligned}$$

onde $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$.

Problema Resolvido

Uma equação de autovalor é definida por $\Lambda\psi = \lambda\psi$, onde Λ é um operador, λ um autovalor e ψ uma autofunção. Se A e B são operadores quânticos sobre as suas únicas autofunções⁴ respectivas ψ_a e ψ_b tais que

$$A\psi_a = a\psi_a \quad \text{e} \quad B\psi_b = b\psi_b ,$$

determine, rigorosamente, se o conjunto formado pelas autofunções ψ_a e ψ_b são ou não linearmente dependentes, para o caso em que os operadores A e B comutam: $[A, B] = AB - BA = 0$.

Solução

$$AB = BA \Rightarrow AB\psi_a = BA\psi_a$$

⁴ Em mecânica quântica, o conjunto de todas as funções ψ linearmente independentes de um sistema físico forma um espaço vetorial de dimensão infinita denominado Espaço de Hilbert.

ou

$$A(B\psi_a) = B(a\psi_a) = a(B\psi_a)$$

A equação acima mostra que $B\psi_a$ é uma autofunção do operador A com autovalor a . Uma vez que a única autofunção de A é dada por ψ_a , então

$$B\psi_a = \beta\psi_a ; \quad \beta = cte.$$

Uma vez que as autofunções do operador B são as funções ψ_b , a equação acima nos permite escrever:

$$\psi_b = \gamma\psi_a ; \quad \gamma \text{ é um escalar constante}$$

Ou seja, se os operadores A e B comutam, as suas respectivas autofunções ψ_b e ψ_a são linearmente dependentes (LD).

5.5 Regras de seleção

5.6 Equação de continuidade para a probabilidade

Sempre que uma grandeza flui no espaço e é conservada obtém-se uma equação de continuidade. Uma vez que a probabilidade de encontrar uma partícula em todo o espaço é sempre uma constante, espera-se obter uma equação de continuidade de probabilidade análoga, por exemplo, a que existe para a corrente elétrica ou para a onda eletromagnética (ver o vol. Física 3).

O ponto de partida é a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi$$

Multiplicando a equação acima por Ψ^* ,

$$i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi \right)$$

tomando o seu conjugado complexo,

$$-i\hbar \Psi \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi^* \right)$$

e subtraindo as duas equações acima, obtemos o seguinte resultado:

$$\underbrace{i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right)}_{\partial(\Psi^*\Psi(\mathbf{r},t))/\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(\Psi^* \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t))}_{\nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)}$$

Após alguns cálculos, chegamos à equação de continuidade de probabilidade da mecânica quântica:

$$\nabla \cdot ((i\hbar/2m)(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)) + \frac{\partial(\Psi^* \Psi(\mathbf{r}, t))}{\partial t} = 0 \quad (5.6.10)$$

A grandeza $\rho = \Psi^* \Psi$ na derivada parcial em relação ao tempo é a densidade de probabilidade proposta por Born, enquanto no divergente está o que se define como *densidade de corrente de probabilidade* \mathbf{J} :

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (5.6.11)$$

Observe que \mathbf{J} é um vetor com componentes reais.

Das definições acima, podemos reescrever a equação de continuidade de probabilidade:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

A interpretação para $\rho = \Psi^* \Psi(\mathbf{r}, t)$, como vimos, é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula em um ponto localizado em \mathbf{r} no instante t . Veremos agora a interpretação de \mathbf{J} .

\mathbf{J} é um vetor que informa para onde e com que intensidade a probabilidade flui pelo espaço. Fazendo uma analogia com a corrente elétrica e a sua equação de continuidade, a Eq.[5.6.11] diz que, se há uma corrente de probabilidade através de uma superfície fechada S arbitrária, a probabilidade de encontrar uma partícula fora da superfície fechada varia de dP no intervalo de tempo dt , enquanto a probabilidade de encontrá-la fora da superfície varia de $-dP$ no mesmo intervalo de tempo. Todo este processo está relacionado à variação da densidade de probabilidade ρ no interior de S .

A densidade de corrente \mathbf{J} é útil no cálculo da probabilidade de uma partícula, ao chegar na interface entre regiões de diferentes potenciais sofrer reflexão ou transmissão. Por exemplo, o cálculo da probabilidade de transmissão através de uma superfície de separação de área infinitesimal $d\mathbf{s}$, sendo \mathbf{J}_i a corrente incidente e \mathbf{J}_t a transmitida, é dada por:

$$P_t = \frac{|\mathbf{J}_t \cdot d\mathbf{s}|}{|\mathbf{J}_i \cdot d\mathbf{s}|}$$

onde os módulos foram aplicados para garantir que P_t seja não negativo.

Analogamente, para o cálculo da probabilidade de reflexão, temos:

$$P_r = \frac{|\mathbf{J}_r \cdot d\mathbf{s}|}{|\mathbf{J}_i \cdot d\mathbf{s}|}$$

Uma vez que a cada interface a probabilidade é transmitida e/ou refletida, temos:

$$P_r + P_t = 1$$

A analogia com a corrente elétrica, por exemplo, é direta. Imagine que dn_i elétrons incidam sobre uma superfície no intervalo de tempo dt , enquanto dn_t consigam atravessá-la. Sendo assim, a probabilidade de que um elétron atravesse a superfície orientada $d\mathbf{S}$ é igual a $P_t = dn_t/dn_i$. Mas $dn_t/dn_i = (dn_t/dt)/(dn_i/dt) = i_t/i_i = |\mathbf{J}_t \cdot d\mathbf{s}|/|\mathbf{J}_i \cdot d\mathbf{s}|$.

5.7 Colapso da função de onda e realidade na mecânica quântica

A forma como se observa a realidade na mecânica quântica é radicalmente distinta da que se tem a partir da mecânica clássica. Considere, por exemplo, uma onda clássica gerada pela superposição de ondas quando se toca um instrumento musical. A onda resultante é real, observável.

Quando resolvemos a equação de Schrödinger para uma partícula, a solução é uma onda dada pela superposição de todas as soluções da equação:

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n$$

Cada ψ_n é uma onda que está associada a uma realidade única. Ou seja, se $\psi_n \neq \psi_{n'}$, então a partícula terá autovalores e distribuição de probabilidades distintos para cada uma destas autofunções.

Em outras palavras, a superposição dada por ψ não é uma realidade observável. Apenas após a realização de uma medida sobre o sistema ocorre o que se conhece como o *colapso da função de onda*, quando apenas um desses estados passa a ser observado, e não há como saber, a priori, qual das autofunções (realidade) irá colapsar.

Problemas

1) Considere um sistema quântico onde as duas únicas soluções (normalizadas) da equação de Schrödinger são dadas por:

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} \quad \text{e} \quad \Psi_2(x, t) = \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

Sabendo que a solução de onda completa é dada por

$$\Psi(x, t) = a_1\Psi_1(x, t) + a_2\Psi_2(x, t) ; \quad \text{onde } a_1 \text{ e } a_2 \text{ são constantes,}$$

Calcule e justifique os resultados do que se pede abaixo:

- a) $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx ;$
- b) $|a_1|^2 + |a_2|^2 .$

2) Em um sistema quanto-mecânico com uma dimensão espacial, a função de onda da partícula é dada por:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ \alpha\sqrt{x}e^{-\alpha x/2}e^{-iEt/\hbar} & \text{se } x \geq 0 , \end{cases}$$

- a) Calcule o valor esperado \bar{x} da posição da partícula.
 - b) Calcule a posição x_m em que a densidade de probabilidade é máxima.
 - c) Esboce o gráfico que dá a densidade de probabilidade *versus* x . Marque na abscissa as posições aproximadas de \bar{x} e x_m .
- 3) Uma partícula possui a seguinte função de onda espacial:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{2/3a}(1 - \cos(2\pi x/a)) & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{se } x < 0 \text{ ou } x > a , \end{cases}$$

onde $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 .$

- a) Esboce o gráfico da curva $|\psi(x)|^2 \times x .$
 - b) Calcule \bar{x} (valor esperado de x) .
- 4) Se a integral abaixo envolvendo os estados $\psi_n(x)$ e $\psi_{n'}(x)$ é diferente de zero, então a transição entre eles é possível, e vice-versa, o que caracteriza a "regra de seleção".

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\psi_{n'}^*(x)dx .$$

As funções de onda em um estado arbitrário n desse sistema apresentam a seguinte propriedade: $\psi_n(x) = (-1)^n\psi_n(-x)$. Encontre os valores de Δn para que as transições sejam permitidas.

5) Duas autofunções espaciais (não normalizadas) para um problema unidimensional são dadas abaixo, onde $E_1 \neq E_2$. Considerando $x \in (-\infty, \infty)$. Verifique, segundo a *regra de seleção*, se há possibilidade ou não de ocorrer transição entre os estados ψ_1 e ψ_2 .

$$\psi_1(x) = (x - 2)e^{-x^2} \quad ; \quad \psi_2(x) = (2x^2 - 1)e^{-2x^2} .$$

6) Para $0 < x < \infty$, a função de onda espacial para uma partícula de massa m e energia total E é dada por

$$\psi(x) = Axe^{-x} \ ; \ A > 0 .$$

Considerando que para $x \leq 0$ a energia potencial é infinita, calcule:

- a) o valor de A ;
- b) o valor de x_o para o qual a densidade de probabilidade é máxima;
- c) a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $[x_o, \infty)$;
- d) a energia potencial $U(x)$ para $x > 0$.

7) Uma partícula desloca-se unidimensionalmente entre $x = 0$ e $x = L$ com momento linear de módulo constante, dado por $|p_x| = \hbar n \pi / L$, onde $n = 1, 2, 3, \dots$. Calcule o produto das incertezas Δx e Δp_x . Verifique se o seu resultado está de acordo com o valor mínimo do produto $\Delta x \Delta p_x$, exigido pelo princípio da incerteza de Heisenberg.

Sugestão: $\Delta f = \sqrt{\overline{f^2} - \overline{f}^2}$

Capítulo 6

Aplicações da equação de Schrödinger

6.1 Introdução

6.2 Partícula livre em uma dimensão

A equação de Schrödinger espacial para uma partícula livre é dada por:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(\mathbf{r}) = 0$$

Se a partícula é livre para se deslocar no eixo x , basta fazer $\mathbf{r} \rightarrow x$ e $\nabla^2 \rightarrow d^2/dx^2$, de onde vem:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 ; \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$$

Não é difícil ver que $\psi(x) = \exp(ax)$ é a solução da equação diferencial acima a partir da substituição direta

$$a^2e^{ax} + k^2e^{ax} = 0$$

desde que $a^2 + k^2 = 0$ ou $a = \pm ik$. A combinação linear com os valores $a = \pm ik$ fornece a solução espacial:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

A solução completa para o estado estacionário com energia $E = \omega\hbar$ é dada por $\Psi(x, t) = e^{-i\omega t}\psi(x)$, de onde temos:

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

Observe que as soluções $e^{i(kx-\omega t)}$ e $e^{-i(kx+\omega t)}$ têm exatamente a mesma forma que utilizamos para obter a equação de Schrödinger.

As soluções $e^{i(kx-\omega t)}$ e $e^{-i(kx+\omega t)}$ são, respectivamente, ondas caminhantes para a direita e para a esquerda. Nos casos em que a partícula se desloca exclusivamente para a direita, $B = 0$, e vice-versa. Em outros casos, poderá ocorrer reflexão da onda, quando então A e B serão não nulos.

6.3 Poço de potencial finito unidimensional

Um poço de potencial finito unidimensional representado na Fig.[6.2] tem um comportamento realista, pois a função que descreve o potencial $U(x)$ é contínua.

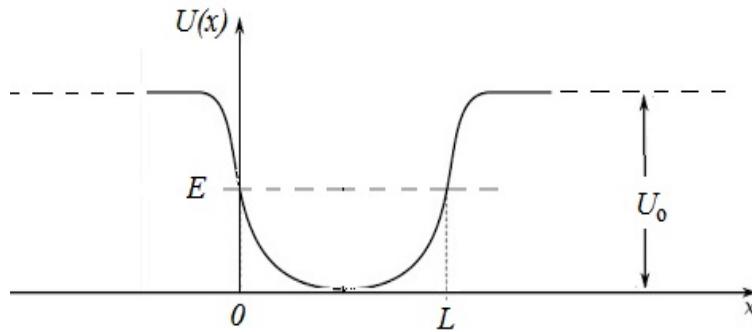


Figura 6.1: Barreira de potencial finito unidimensional contínua.

O potencial contínuo permite que se aplique a continuidade da função de onda assim como a da sua derivada nas coordenadas do eixo x em que a reta de energia E intercepta a curva de $U(x) \times x$. Entretanto, a solução de $\psi(x)$ a partir da equação de Schrödinger seria extremamente difícil de ser calculada.

Então, a fim de facilitar os cálculos, usaremos a representação aproximada de $U(x)$, dada pela curva na Fig.[6.2], aplicando a continuidade de $\psi(x)$ e de $\psi'(x)$ nas coordenadas mencionadas acima.

Iremos considerar uma partícula com energia E onde $0 < E < U_0$.

A equação de Schrödinger é dada por

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi(x) = 0$$

onde $U = U_0 > 0$ para $x < 0$ e $x > L$ e $U = 0$ para $0 \leq x \leq L$.

Região 1

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi(x) = 0$$

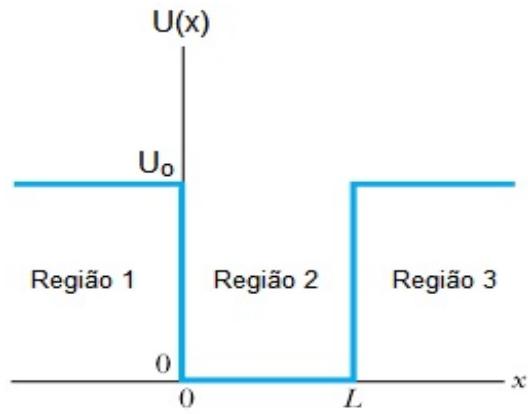


Figura 6.2: Barreira de potencial finito unidimensional descontínua.

Onde $k_1 = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar$. Seguindo os passos da solução obtida para a partícula livre, vem:

$$\psi_1(x) = a_1 e^{k_1 x} + b_1 e^{-k_1 x} ; \quad x < 0$$

onde as exponenciais têm argumentos reais porque $U_0 > E$.

Nesta região, a contribuição $a_1 e^{k_1 x}$ cresce indefinidamente quando $x \rightarrow -\infty$, o que resultaria em um valor infinito na probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $(-\infty, 0)$. Uma vez que a integral sobre $|\psi|^2$ deve ser finita, conclui-se que $b_1 = 0$, de onde vem:

$$\psi_1(x) = a_1 e^{k_1 x} ; \quad x < 0$$

Região 2

Nesta região, $U = 0$ e $k_2 = \sqrt{2mE} / \hbar$, então:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi(x) = 0$$

$$\psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x} ; \quad 0 \leq x \leq L$$

Região 3

A solução nesta região é análoga a que encontramos para a região 1. Seguindo os passos observando que $k_3 = k_1$, temos:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k_3^2\psi(x) = 0$$

Onde $k_3 = k_1 = \sqrt{2m(U_\circ - E)}/\hbar$ e

$$\psi_3(x) = a_3e^{k_1x} + b_3e^{-k_1x} ; \quad x > L$$

ou

$$\psi_3(x) = b_3e^{-k_1x} ; \quad x > L$$

Onde $b_3 = 0$ a fim de que a integral sobre $|\psi|^2$ convirja no intervalo (L, ∞)

Condições de contorno

As condições de contorno para a onda $\psi(x)$ são dados por:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) ; \quad \frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) ; \quad \frac{d\psi_2(L)}{dx} = \frac{d\psi_3(L)}{dx}$$

Os cálculos são fáceis, mas tediosos. Das funções em cada região e das condições de contorno, podemos ver que nas regiões 1 e 2 ela é decrescente para $x \rightarrow -\infty$ e para $x \rightarrow \infty$, respectivamente, e oscilante para $0 \leq x \leq L$. A Fig.[6.3] ilustra algumas das funções de onda para o poço de potencial finito unidimensional para diferentes valores da energia E (valores crescentes de E da curva de baixo para a de cima).

6.4 Poço de potencial infinito

Dos resultados obtidos para o poço de potencial finito e tomando o limite $U_\circ \rightarrow \infty$, temos:

$$\psi_1 = \psi_3 = 0$$

pois neste caso $k_1 = k_3 = \sqrt{2m(U_\circ - E)} \rightarrow \infty$.

A função ψ_2 , dada por:

$$\psi_2(x) = a_2e^{ik_2x} + b_2e^{-ik_2x} ; \quad 0 \leq x \leq L$$

não se altera, mas as condições de contorno impõem que:

$$\psi_2(0) = \psi_2 = 0 ; \quad \psi_2(L) = \psi_3 = 0$$

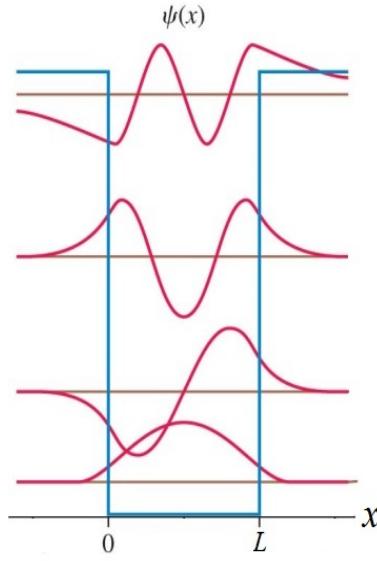


Figura 6.3: Curvas da função de onda para uma partícula em um poço de potencial finito com $E < U_0$.

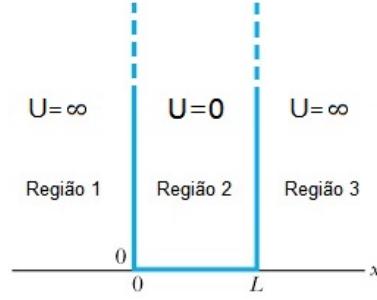


Figura 6.4:

de onde vem:

$$\psi_2(0) = a_2 + b_2 = 0 \quad ; \quad \psi_2(L) = a_2 e^{ik_2 L} + b_2 e^{-ik_2 L} = 0$$

Então,

$$\psi_2(L) = 2ia_2 \sin(k_2 L) = 0$$

o implica que $k_2 L = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$ ($n \leq 0$ está descartado, pois k_2 e L são não negativos, enquanto $n = 0$ está descartado, pois anularia a função de onda). Então, a função ψ_2 fica dada por:

$$\psi_2(x) = 2ia_2 \sin(n\pi x/L) \quad ; \quad 0 \leq x \leq L$$

Para o cálculo de a_2 , devemos normalizar a função de onda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_0^L |\psi_2|^2 dx = 4|a_2|^2 \int_0^L \sin^2(n\pi x/L) dx = 2|a_2|^2 \left(x - \frac{\sin(2n\pi x/L)}{2n\pi/L} \right) \Big|_0^L = 1$$

ou

$$|a_2| = \frac{1}{\sqrt{2L}}$$

Então, escrevendo a função de onda espacial no poço de potencial como $\psi_2(x) \rightarrow \psi_n(x)$, temos:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L) ; n = 1, 2, 3, \dots ; 0 \leq x \leq L}$$

Quantização da energia

A energia da partícula é dada por:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}$$

onde $k_2 \rightarrow k_n = n\pi/L$; $n = 1, 2, 3, \dots$; de onde vem:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 ; n = 1, 2, 3, \dots$$

Este resultado mostra que o espectro de energia da partícula não é contínuo e sim discreto. Diz-se que a energia é quantizada. Observe que o valor mínimo não é nulo, o que decorre dos valores do momento: $p_n = \hbar k_n = \hbar n\pi/L$; $n = 1, 2, 3, \dots$. A Fig.[6.5] mostra os resultados dos três primeiros estados quânticos. Observe que as funções de onda têm comportamento análogo ao das ondas harmônicas para uma corda vibrante de extremos fixos.

Incertezas na posição e momento da partícula na caixa

As funções de onda $\psi_n(x)$ permitem que se calcule a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer região no intervalo $[0, L]$, logo, a incerteza na posição é dada por

$$\Delta x = L$$

Quanto ao momento, para cada estado quântico n , o valor mínimo de p_x , dado por $\hbar n\pi/L$, dará uma medida da incerteza Δp_x , pois o valor da grandeza não pode ser menor do que a sua incerteza; de onde vem:

$$\Delta p_x = \hbar n\pi/L$$

Observe que o produto aproximado entre Δx e Δp_x está de acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p_x = \hbar n\pi \geq \hbar\pi > \hbar/2$$

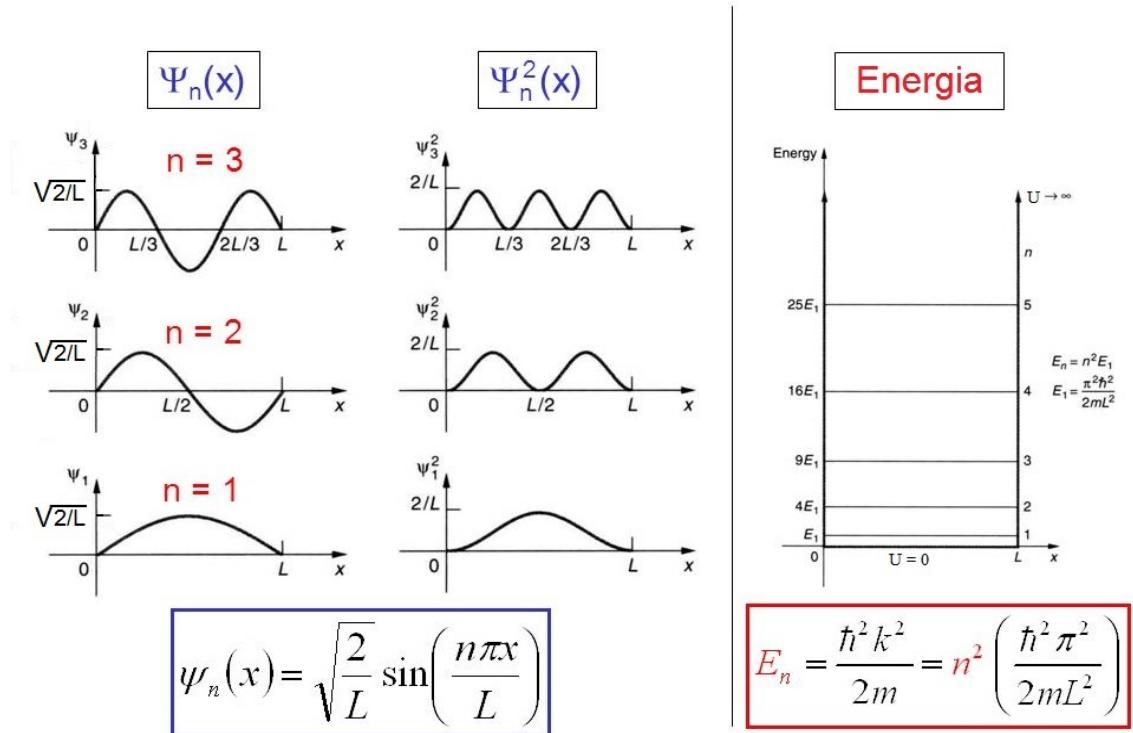


Figura 6.5:

6.5 Barreira de potencial finita - Efeito túnel

Para se ter uma ideia do que é o efeito túnel, podemos fazer a seguinte analogia clássica: alguém chuta uma bola com energia total cinética E para que ela passe por cima de um muro de altura h . Se a energia total for menor do que a gravitacional, $E < mgh$, a bola não ultrapassará o muro. O efeito túnel seria, mesmo que $E < mgh$, o efeito de a bola atravessar o muro como se ele não existisse!

Se o efeito túnel é comum em algumas circunstâncias, por que não o observamos no dia a dia? A resposta, mais uma vez, vem da probabilidade prevista pela mecânica quântica em cada escala espacial: significativa para dimensões espaciais muito pequenas, desprezível nas dimensões macroscópicas.

Uma vez que a energia total é dada pela soma da energia cinética com o potencial, $E = K + U$, e $K = E - U \geq 0$, uma partícula, segundo a mecânica clássica, só pode estar em regiões em que $E \geq U$. Nesta seção, calcularemos a probabilidade de que uma partícula atravesse uma região classicamente proibida.

Sendo assim, considere uma partícula de massa m (Fig.[6.6]), cuja energia total é menor do que a barreira de potencial: $E < U_0$. U_0 é a energia potencial na região entre $x = 0$ e $x = L$. A partícula desloca-se inicialmente da esquerda para a direita na região em que

$x < 0$.

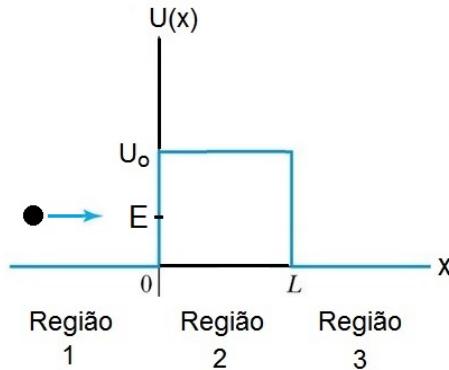


Figura 6.6:

- Região 1: $E = \hbar^2 k_1^2 / 2m$; $\psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}$ ($x < 0$)
- Região 2: $E = \hbar^2 k_2^2 / 2m + U_0$; $\psi_2(x) = a_2 e^{k_2 x} + b_2 e^{-k_2 x}$ ($0 \leq x \leq L$)
- Região 3: $E = \hbar^2 k_3^2 / 2m = \hbar^2 k_1^2 / 2m$; $\psi_3(x) = a_3 e^{ik_1 x}$ ($x > L$)

Na região 3, a exponencial $e^{-ik_1 x}$ representaria uma onda caminhante para a esquerda. Caso a partícula venha da esquerda e alcance esta região, ela não inverterá o sentido, pois o potencial é sempre constante para $x > L$. Se fosse assim, uma partícula poderia ser refletida em qualquer ponto, mesmo na ausência de barreiras!

As condições de contorno entre os três meios são as seguintes:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) ; d\psi_1(0)/dx = d\psi_2(0)/dx ;$$

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) ; d\psi_2(L)/dx = d\psi_3(L)/dx$$

De onde se obtém o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 + b_1 = a_2 + b_2 \\ ik_1 a_1 - ik_1 b_1 = |k_2| a_2 - |k_2| b_2 \\ a_2 e^{k_2 L} + b_2 e^{-k_2 L} = a_3 e^{ik_1 L} \\ k_2 a_2 e^{k_2 L} - k_2 b_2 e^{-k_2 L} = ik_1 a_3 e^{ik_1 L} \end{array} \right. \quad (6.5.1)$$

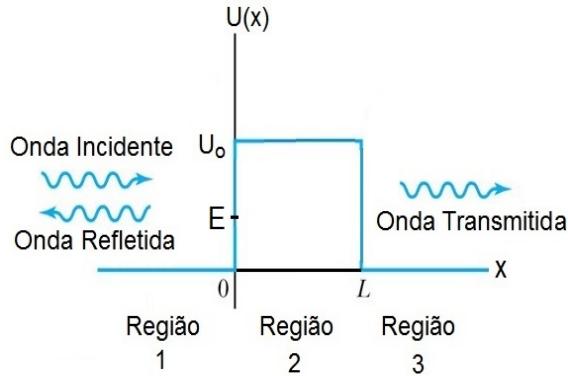


Figura 6.7:

O sistema acima fornece as quantidades necessárias para o cálculo da probabilidade de transmissão para que a partícula atravesse a barreira. Lembrando que esta probabilidade é dada por:

$$P_t = \frac{|\mathbf{J}_t \cdot d\mathbf{s}|}{|\mathbf{J}_i \cdot d\mathbf{s}|}$$

e que neste caso \mathbf{J}_i e \mathbf{J}_t são paralelos a $d\mathbf{s}$, então:

$$P_t = \frac{|\mathbf{J}_t|}{|\mathbf{J}_i|}$$

Substituindo $\mathbf{J} = i\hbar(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)/2m$, temos:

$$P_t = \frac{(|\Psi_3 \partial\Psi_3^*/\partial x - \Psi_3^* \partial\Psi_3/\partial x|)_t}{(|\Psi_1 \partial\Psi_1^*/\partial x - \Psi_1^* \partial\Psi_1/\partial x|)_i}$$

Realizando os cálculos, obtemos:

$$P_t = \frac{k_3 |a_3|^2}{k_1 |a_1|^2} = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2}$$

A tarefa agora restringe-se ao cálculo de $|a_3|^2/|a_1|^2$, que é feita a partir do sistema de equações. O resultado, obtido após um cálculo simples porém tedioso, está mostrado abaixo:

$$P_t = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sinh^2(k_2 L)} \quad ; \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \quad ; \quad E < U_0 \quad (6.5.2)$$

Para muitos casos práticos ou naturais, $k_2 L \gg 1$, o que nos permite escrever:

$$P_t \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) e^{-2k_2 L} \quad ; \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \quad ; \quad E < U_0$$

Na Fig.[6.8] as funções de onda $\psi(x)$ do elétron nas três regiões:

- 1 - superposição das ondas incidente e refletida em $x < 0$;
- 2 - onda no interior do túnel em $0 \leq x \leq L$;
- 3 - onda transmitida em $x > L$, caracterizando o efeito túnel.

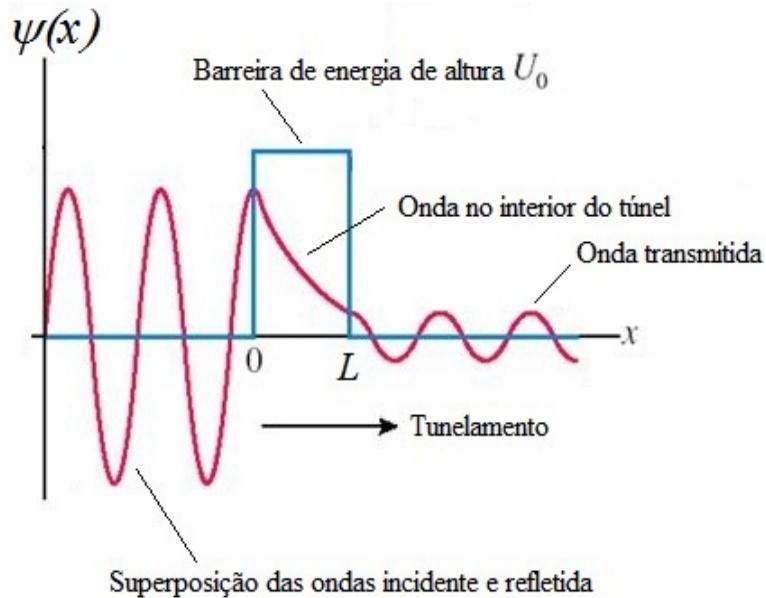


Figura 6.8:

Problema Resolvido

Considere uma partícula de massa m e energia E submetida ao potencial abaixo:

$$U(x) = \begin{cases} \infty & , x < 0 \text{ (intervalo 1)} \\ 0 & , 0 \leq x < L \text{ (intervalo 2)} \\ U_0 > 0 & , x \geq L \text{ (intervalo 3)} \end{cases}$$

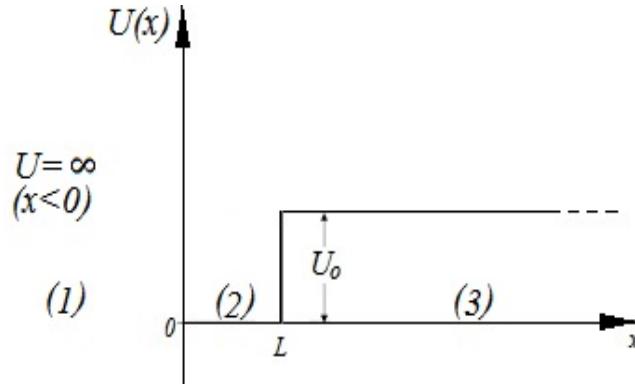
Para $E \in (0, U_0)$:

a) resolva a equação de Schrödinger para cada intervalo do eixo x ; aplique as condições de contorno sobre as funções de onda encontradas;

- Equação de Schrödinger espacial unidimensional:

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

- Solução da equação de onda em cada região:



(1): $\psi_1(x) = 0$ (resultado obtido após dividir a eq. de Schrödinger por U e fazer $U \rightarrow \infty$)

$$(2): \psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x} ; \quad k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$(3): \psi_3(x) = a_3 e^{k_3 x} + b_3 e^{-k_3 x} ; \quad k_3 = |\sqrt{2m(E - U_0)}|/\hbar$$

- Condições de contorno:

$$i: \psi_1(0) = \psi_2(0) = 0$$

$$ii: \psi_2(L) = \psi_3(L)$$

$$iii: \lim_{x \rightarrow \infty} \psi_3(x) = 0$$

$$iv: \psi'_2(L) = \psi'_3(L)$$

- Das condições acima, vem:

$$(4): 2ia_2 \sin(k_2 L) = b_3 e^{-k_3 L}$$

$$(5): 2ia_2 k_2 \cos(k_2 L) = -b_3 k_3 e^{-k_3 L}$$

b) obtenha a equação que fornece a energia da partícula em função de m , L e U_0 . A energia é quantizada? Explique a partir da equação obtida.

Das equações (4) e (5), temos:

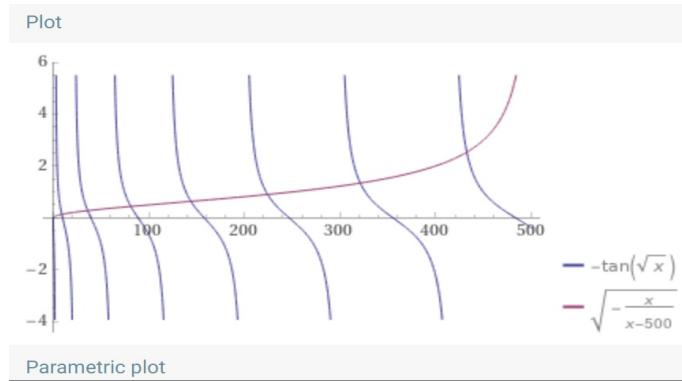
$$\tan(k_2 L) = -\frac{k_2}{k_3}$$

ou

$$-\tan(\sqrt{2mE} L / \hbar) = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$$

A equação acima é transcendente em E ; portanto, não há solução analítica. Mas podemos obter graficamente os valores de E que satisfazem a equação acima.

A figura abaixo mostra as curvas de $-\tan(\sqrt{2mE}L/\hbar)$ e de $\sqrt{\frac{E}{U_0-E}}$ para $0 < E < U_0$. Pode-se ver claramente os pontos de interseção entre as curvas, caracterizando um espectro de energia discreto nos valores de E na abcissa do gráfico. Portanto, a energia da partícula é quantizada.



6.6 Partícula em uma caixa cúbica

Considere uma partícula confinada no interior de um cubo de aresta a . A condição física para o confinamento se dá pelas seguintes configurações do potencial $U(x, y, z)$:

$$U(x, y, z) = 0 \text{ no interior do cubo}$$

$$U(x, y, z) = \infty \text{ fora do cubo}$$

A função de onda fora do cubo é obtida a partir da equação de Schrödinger abaixo:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

Dividindo a equação por $E - U$ e tomando $U \rightarrow \infty$, vem:

$$\underbrace{\lim_{U \rightarrow \infty} \frac{\nabla^2\psi}{E - U}}_{=0} + \frac{2m}{\hbar^2}\psi = 0 \implies \psi = 0$$

Para o interior do cubo, a função de onda será obtida resolvendo a equação de Schrödinger abaixo:

$$\nabla^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

Escrevendo a função de onda como $\psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z)$, vem:

$$f''(x)g(y)h(z) + f(x)g''(y)h(z) + f(x)g(y)h''(z) + \frac{2mE}{\hbar^2}f(x)g(y)h(z) = 0$$

ou

$$\frac{g''(y)}{g(y)} + \frac{h''(z)}{h(z)} = -\frac{f''(x)}{f(x)} - \frac{2mE}{\hbar^2}$$

O lado direito depende apenas de x , o esquerdo de y e z , mas estas variáveis são independentes, então:

$$-\frac{f''(x)}{f(x)} - \frac{2mE}{\hbar^2} = \text{constante}$$

Como $2mE/\hbar^2$ também é constante, podemos afirmar que $f''(x)/f(x)$ é constante. O mesmo argumento pode ser aplicado às parcelas dependentes de y e de z .

Do que foi dito acima, vem:

$$\frac{f''(x)}{f(x)} = -k_1^2 = \text{constante}$$

$$\frac{g''(y)}{g(y)} = -k_2^2 = \text{constante}$$

$$\frac{h''(z)}{h(z)} = -k_3^2 = \text{constante}$$

A escolha de constantes negativas é necessária para anular a parcela positiva $2mE\hbar^2$ na equação de Schrödinger.

As soluções para as EDOs acima são análogas àquela que resolvemos para o poço de potencial infinito, cujas soluções serão dadas por:

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) ; \quad k_1 = n\pi/a ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$g(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(q\pi y/a) ; \quad k_2 = q\pi/a ; \quad q = 1, 2, 3, \dots$$

$$h(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(s\pi z/a) ; \quad k_3 = s\pi/a ; \quad s = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi_{nqs} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin(n\pi x/a) \sin(q\pi y/a) \sin(s\pi z/a)$$

Ao substituir as constantes k na equação de Schrödinger obtemos a energia quantizada da partícula:

$$E_{nqs} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n^2 + q^2 + s^2)$$

Degenerescência da função de onda

Observe que a energia E_{nqs} é invariante sob uma troca arbitrária dos números quânticos n , q e s , mas o mesmo não ocorre quando se faz trocas dos mesmos números na função de onda (exceto se forem todos iguais!). Por exemplo, se $n = 1$, $q = 2$ e $s = 3$, teremos:

$$\psi_{123} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin(\pi x/a) \sin(2\pi y/a) \sin(3\pi z/a)$$

e

$$E_{123} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (1^2 + 2^2 + 3^2)$$

Fica claro que, por exemplo, $E_{123} = E_{213}$, mas $\psi_{123} \neq \psi_{213}$. Portanto, neste sistema físico a partícula poderá ter comportamentos distintos para diferentes estados quânticos que estarão associados à mesma energia. Diz-se, então, que este sistema apresenta estados quânticos degenerados.

6.7 Oscilador harmônico simples na mecânica quântica

A Fig.[6.9] mostra um oscilador harmônico simples de massa m acionado por uma mola ideal de constante elástica k , onde as forças de atritos são consideradas desprezíveis.

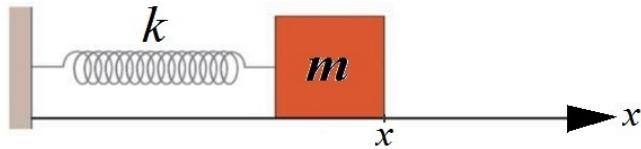


Figura 6.9:

A energia potencial é dada por $U(x) = kx^2/2$, onde x é a coordenada de posição do oscilador sendo $x = 0$ a posição de equilíbrio. Sendo a energia total dada por E , a Equação do Schrödinger espacial fica escrita como:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi(x) = 0$$

A equação diferencial acima será resolvida representando a função $\psi(x)$ por uma série infinita. Porém, faremos algumas considerações para reescrever $\psi(x)$ a fim de que os cálculos sejam mais fáceis.

Fazendo as definições abaixo

$$y = \sqrt{\frac{\sqrt{km}}{\hbar}} x ; \quad \alpha = \frac{2E}{\hbar\omega} ; \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

a equação diferencial fica reescrita como:

$$\psi''(y) + (\alpha - y^2)\psi(y) = 0$$

A função $\psi(y)$ pode ser reescrita realizando o seguinte:

$$\psi(y) = (\psi(y)e^{y^2/2})e^{-y^2/2}$$

Definindo $f(y) = \psi(y)e^{y^2/2}$, vem:

$$\psi(y) = f(y)e^{-y^2/2}$$

o que faz com que a equação diferencial fique descrita como:

$$f''(y) - 2yf'(y) + (\alpha - 1)f(y) = 0$$

A equação acima é a equação diferencial de Hermite.

Escrevendo a função $f(y)$ como uma série infinita dada por

$$f(y) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j y^j$$

teremos, após a substituição da série na equação diferencial, obtemos a seguinte equação:

$$a_{j+2} = \frac{2j + 1 - \alpha}{(j+1)(j+2)} a_j \quad ; \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Uma vez que a integral $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 dy$ deve convergir, então os limites abaixo devem ocorrer

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \psi = \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{f(y)}{e^{y^2/2}} = 0$$

Para avaliar tal limite, deve-se avaliar o comportamento das funções $f(y)$ e $e^{y^2/2}$ quando $y \rightarrow \pm\infty$. Uma vez que os termos de ordens superiores ($j \gg 1$) são dominantes quando y cresce, devemos comparar os coeficientes das séries para $f(y)$ e $e^{y^2/2}$ nestes casos. Sendo assim, escrevendo a função $e^{y^2/2}$ em série, temos:

$$e^{y^2/2} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(y^2/2)^j}{j!} = \sum_{j=0,2,4,\dots} \frac{1}{2^{j/2}(j/2)!} y^j$$

Então, sendo o coeficiente de $e^{y^2/2}$ igual a $b_j = 1/(2^{j/2}(j/2)!)$, o comportamento entre termos sucessivos de a_j e b_j é dado pelas seguintes equações:

$$\frac{a_{j+2}}{a_j} = \frac{2j + 1 - \alpha}{(j+1)(j+2)}$$

e

$$\frac{b_{j+2}}{b_j} = \frac{2^{j/2}(j/2)!}{2^{(j+2)/2}(j/2+1)!} = \frac{1}{j+2}$$

A fim de comparar os termos para $j \gg 1$, tomemos as expressões assintóticas para este caso:

$$\frac{a_{j+2}}{a_j} \approx \frac{2}{j} \quad ; \quad j \gg 1$$

e

$$\frac{b_{j+2}}{b_j} \approx \frac{1}{j} \quad ; \quad j \gg 1$$

As expressões acima mostram que para $|y| \gg 1$ a função $f(y)$ cresce com o dobro da taxa da função $e^{y^2/2}$, o que inviabilizaria a convergência da integral $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 dy$. Sendo assim, a

única forma de garantir a convergência seria truncar a série obtida para $f(y)$. Truncar uma série significa garantir que todos os termos a_j a partir de um dado j sejam nulos; ou seja, $f(y)$ passaria a ser um polinômio.

Se $\alpha = 2n + 1$, um número inteiro ímpar arbitrário, com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, a relação de recorrência será nula para $j \geq n$, pois

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-(2n+1)}{(n+1)(n+2)} a_n = 0 \quad \text{para } j = n+2, n+4, n+6, \dots$$

Quantização da energia do oscilador harmônico

Vimos que ao truncar a série para gerar o polinômio chegamos à seguinte equação para α : $\alpha = 2n + 1 = 2E/\hbar\omega$. Isolando a energia E , chega-se à quantização da energia do oscilador harmônico quântico:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

(6.7.3)

Observe que no estado fundamental a energia do oscilador é maior do que zero: $E_0 = \hbar\omega/2$. Este resultado é ainda mais intrigante do que já se mostra aqui. Uma vez que a energia de um campo eletromagnético de frequência ω é dado também por $E_n = (n + 1/2) \hbar\omega$, onde n é o número de fôtons, conclui-se que na ausência de fôtons, quando $n = 0$, ainda há uma energia residual, chamada de energia do vácuo. Considerando que há infinitas frequências, a energia do vácuo em qualquer volume finito seria infinita! O físico holandês Hendrik Casimir publicou um trabalho em 1948, em que teorizou um fenômeno a partir do qual poder-se-ia medir esta energia, desde que o vácuo estivesse confinado em ao menos uma dimensão espacial. A partir de 1958, este fenômeno vem sendo medido em laboratório em experimentos cada vez mais precisos.

A Fig.[6.10] ilustra a energia potencial elástica em função da coordenada de posição x do oscilador e os valores de energia total $E_n = (n + 1/2) \hbar\omega$, destacando as separações idênticas entre níveis de energia sucessivos, iguais a $\Delta E_n = \hbar\omega$.

Para verificar o princípio de correspondência entre a mecânica quântica e a mecânica clássica neste caso, basta ver que quanto maior o número quântico maior a energia e menor se torna o caráter quantizado. Comparando as diferenças sucessivas entre estados energéticos e a energia em um estado quântico n ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta E_n}{E_n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta((n + 1/2)\hbar\omega)}{(n + 1/2)\hbar\omega} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2}{2n + 1} = 0$$

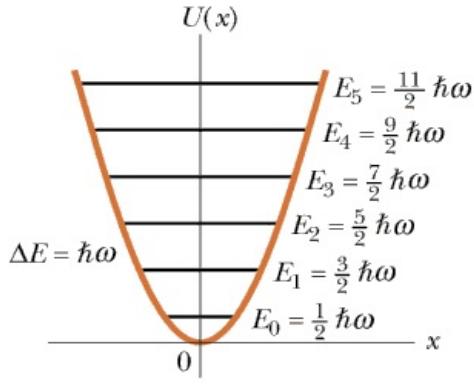


Figura 6.10: Níveis de energia do oscilador harmônico em um gráfico de $U(x)$.

Comparação entre ΔE_n e E_n

Pêndulo clássico

Para efeito de comparação, um pêndulo típico de relógio de parede tem uma frequência da ordem de $\omega = 5 \text{ s}^{-1}$, o que dá $\Delta E_n = \hbar\omega \approx 5 \cdot 10^{-34} \text{ J}$. Este valor de energia é muito menor do que os valores encontrados nos sistemas macroscópicos, o que explica porque passa despercebido nos casos em geral e dá a impressão de continuidade nos valores da energia.

Sabendo ainda que a energia total aproximada de um pêndulo de relógio é dada por $E_n \approx 0,1 \text{ J}$, temos:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{5 \cdot 10^{-34} \text{ J}}{0,1 \text{ J}} = 5 \cdot 10^{-33} \ll 1$$

o que demonstra que as mudanças de energia são desprezíveis comparadas à energia do sistema.

Para se ter uma ideia do grau do polinômio neste caso, basta fazer:

$$0,1 = (n + 1/2)5 \cdot 10^{-34}$$

ou

$$n \approx 2 \cdot 10^{32} \gg 1$$

Espectro de emissão-absorção de oscilação molecular

Por outro lado, quando se compara ΔE_n com a energia de oscilação de uma molécula E_n , observa-se que

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \sim 1$$

o que mostra que, nestas escalas, a diferença de energia entre os níveis energéticos é significativa.

Funções de onda espaciais para o oscilador harmônico

As funções de onda espaciais de um oscilador harmônico são construídas a partir da relação de recorrência já obtida:

$$a_{j+2} = \frac{2j + 1 - \alpha}{(j + 1)(j + 2)} a_j \quad ; \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

e podem ser reescritas separando os termos em pares e ímpares:

$$f(y) = \sum_{j=0,2,4,\dots}^{\infty} a_j y^j + \sum_{j=1,3,5,\dots}^{\infty} a_j y^j$$

Então, se $\alpha = 2n + 1$ com n par, os termos a partir de a_{n+2} serão nulos, pois

$$a_{n+2} = \frac{2n + 1 - (2n + 1)}{(n + 1)(n + 2)} a_n = 0$$

Isto acarretará uma solução dada por:

$$f(y) = \sum_{j=0,2,4,\dots}^n a_j y^j + \sum_{j=1,3,5,\dots}^{\infty} a_j y^j$$

Neste caso a série com j ímpar comprometerá a solução, segundo o que vimos sobre a convergência de ψ . Portanto, quando n for par, $a_1 = 0$, e toda a série para j ímpar será nula graças à relação de recorrência. Obviamente, o mesmo se dará quando n for ímpar e neste caso $a_0 = 0$, anulando a série para j par, restando apenas um polinômio com j ímpar.

Seguem abaixo soluções normalizadas $\psi_n(y) = f_n(y)e^{-y^2/2}$ para alguns valores de n :

$$\psi_0(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-y^2/2}$$

$$\psi_1(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{2}ye^{-y^2/2}$$

$$\psi_2(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}}(2y^2 - 1)e^{-y^2/2}$$

$$\psi_3(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}}(2y^3 - 3y)e^{-y^2/2}$$

onde

$$y = \sqrt{m\omega/\hbar}x$$

As funções $f_n(y)$ acima são exemplos dos *polinômios de Hermite*.

Observe os gráficos de algumas funções de onda para o oscilador harmônico nos estados de $n = 0$ a $n = 6$ (Fig.[6.11]). As funções ψ_n apresentam valores não nulos mesmo nas

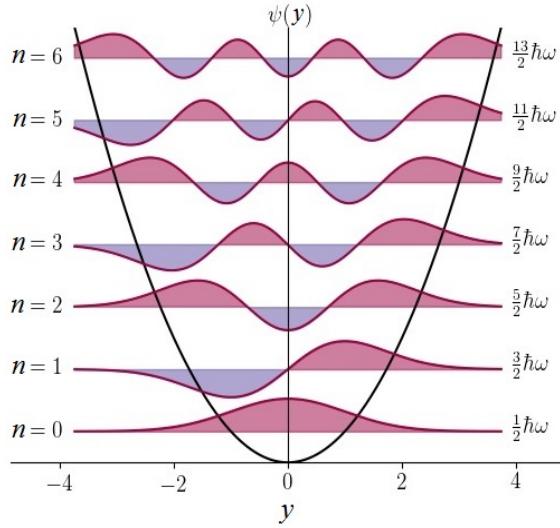


Figura 6.11: Funções de onda espaciais para o oscilador harmônico simples para os sete primeiros estados.

regiões classicamente proibidas ($U > E$). Estes são os pontos são as raízes dos polinômios de Hermite. Além disso, há pontos nos estados para $n \geq 1$ em que $\psi = 0$, ou seja, pontos onde a partícula não pode ser encontrada.

A Fig.[6.12] mostra as densidades de probabilidade $|\psi(y)|^2$ para os mesmos estados da figura anterior. Para n cada vez maiores, as previsões da mecânica quântica tendem a ser as mesmas da mecânica clássica, de acordo com o princípio da correspondência.

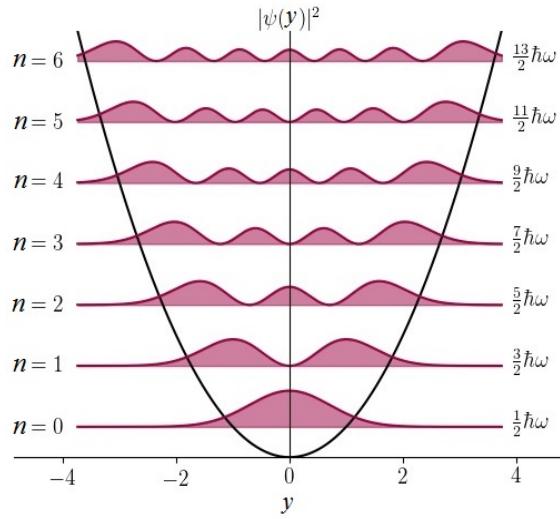


Figura 6.12: Densidade de probabilidade para o oscilador harmônico simples para os sete primeiros estados.

Observe que para os estados de menor energia (menores valores de n) a penetração nas regiões classicamente proibidas é mais pronunciada. A razão se deve ao fato de que para maiores valores de n a curva de energia potencial $U(x)$ se estende para valores maiores da

coordenada espacial, onde o fator exponencial $e^{-y^2/2}$ é cada vez menor.

Problema resolvido

A energia potencial entre duas partículas idênticas de massa m no eixo x é dada por:

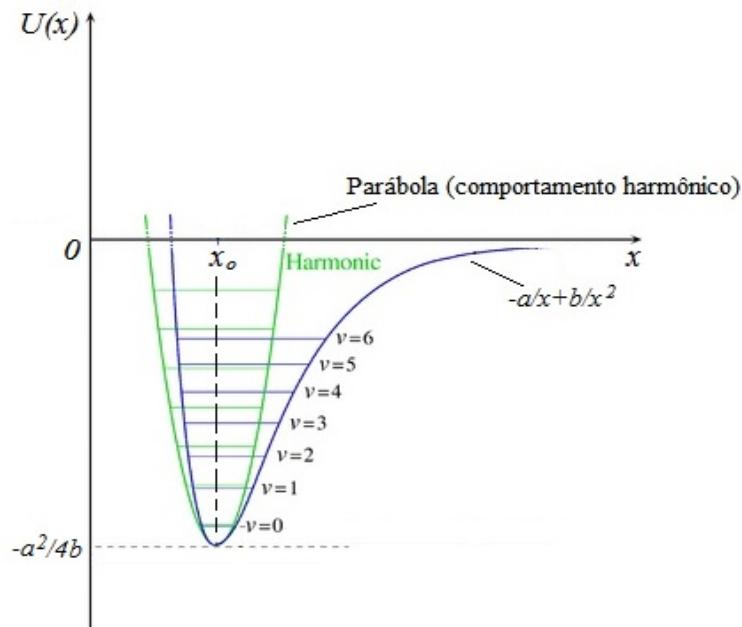
$$U(x) = -\frac{a}{x} + \frac{b}{x^2},$$

onde x é a distância entre elas e a e b são constantes positivas.

As partículas oscilam em torno do seu centro de massa, que está em repouso. Sabendo que a energia total do sistema é negativa e que a amplitude do movimento é pequena o suficiente para considerar a oscilação como quase harmônica.

- a) Calcule o comprimento de onda do fóton emitido em uma transição entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental do sistema;

A figura abaixo mostra as curvas do potencial e da parábola com vértice no ponto de mínimo de $U(x)$.



O enunciado afirma que para pequenas amplitudes a oscilação entre as partículas é aproximadamente harmônica. Isso indica que, em torno da coordenada de equilíbrio x_0 , a curva de $U(x)$ é dada por uma parábola.

A expansão em série de Taylor de $U(x)$ em torno de x_0 até o termo quadrático é dada por:

$$U(x) \approx U(x_0) + U'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2$$

A coordenada $x = x_0$ do ponto de equilíbrio é calculada fazendo a derivada primeira de $U(x)$ igual a zero:

$$U'(x) = \frac{a}{x^2} - \frac{2b}{x^3} = 0$$

então,

$$x_0 = \frac{2b}{a}$$

Escrevendo a energia potencial até o termo quadrático para $x_0 = 2b/a$, vem:

$$U(x) \approx -\frac{a^2}{4b} + \frac{1}{2} \frac{a^4}{8b^3} \left(x - \frac{2b}{a} \right)^2$$

onde $a^4/8b^3$ é a derivada segunda $U''(x_0)$.

Fica então demonstrado que o sistema comporta-se como um oscilador harmônico para pequenas oscilações em torno de $x_0 = 2b/a$.

Sabe-se que um oscilador harmônico quântico de uma partícula de massa m com potencial dado por $U(x) = kx^2/2$ tem a sua energia total dada por:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

onde $\omega = \sqrt{k/\mu}$.

O valor de k é igual a $U''(x_0) = a^4/8b^3$ e a massa é dada por $\mu = m/2$, que é a massa reduzida do sistema.

Em uma transição entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental, a energia do fóton será dada por:

$$E_f = \frac{hc}{\lambda} = \hbar\omega = \frac{h}{2\pi} \sqrt{k/\mu} = \frac{h}{2\pi} \sqrt{(a^4/8b^3)/(m/2)} = \frac{ha^2}{4\pi b \sqrt{mb}}$$

Do que foi dito acima, vem:

$$\boxed{\lambda = \frac{4\pi bc\sqrt{mb}}{a^2}}$$

b) Calcule a energia do sistema no estado fundamental.

Uma vez que a parábola do sistema em questão está com vértice em $U(x_0) = -a^2/4b$ e não em $U = 0$, a energia neste caso será dada por:

$$E_n = -\frac{a^2}{4b} + (n + 1/2)\hbar\omega ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

e a energia do estado fundamental é dada por:

$$\boxed{E_0 = -\frac{a^2}{4b} \left(1 - \frac{\hbar}{\sqrt{mb}} \right)}$$

Problema resolvido

Considere o oscilador harmônico quântico de massa m e frequência angular ω .

a) (1,0) Calcule a constante de normalização A da função de onda no estado estacionário abaixo:

$$\psi_1(x) = Axe^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

Solução

Fazendo $\alpha = m\omega/\hbar$, temos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^2 dx = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -A^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx$$

ou

$$-A^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \right) = 1$$

Mas $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$, então:

$$-A^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1$$

ou

$$A = \sqrt{2\alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}$$

$$A = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4}$$

b) (1,5) Calcule a densidade de probabilidade ρ_c para o oscilador clássico com a energia E_1 ($E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$). Esboce os gráficos da densidade de probabilidade clássica ρ_c e da densidade de probabilidade quântica ρ_q .

Solução

Considere um oscilador harmônico simples cuja amplitude seja x_0 e período T . A probabilidade de encontrar um oscilador harmônico clássico entre x e $x + dx$ é dada por:

$$dP_c = \frac{dt}{T/2}$$

onde dt e $T/2$ são os intervalos de tempo que ele leva para se deslocar entre x e $x + dx$ e entre $-x_0$ para x_0 , respectivamente.

A equação acima pode ser reescrita como:

$$dP_c = \frac{2}{T} \frac{dt}{dx} dx = 2f \frac{dx}{v}$$

Onde v é a velocidade do oscilador e $f = \omega/2\pi$ a sua frequência de oscilação.

Mas v pode ser dada em função de x a partir da equação da energia:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 ; v = \sqrt{\frac{2E - kx^2}{m}}$$

Como $\rho_c = dP_c/dx$, temos:

$$\boxed{\rho_c = \frac{\omega}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2E - kx^2}}}$$

Como $E = E_1 = 3\hbar\omega/2$ e $\omega = \sqrt{k/m}$, vem:

$$\boxed{\rho_c = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{3\hbar - \omega mx^2}}}$$

c) (1, 0) Qual é o valor da razão P_c/P_q você esperaria quando o $n \rightarrow \infty$? Explique.

Solução

Pelo princípio da correspondência, $P_c/P_q \rightarrow 1$ quando $n \rightarrow \infty$.

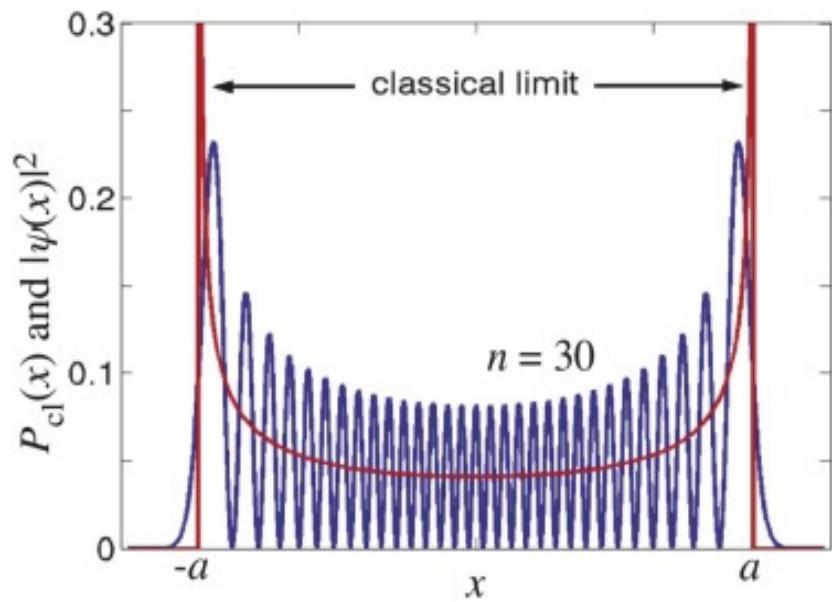


Figura 6.13: Razão entre as densidades de probabilidade clássica e quântica ($n = 30$), ρ_c/ψ^2

Problemas

- 1) Confirme que uma função da forma e^{-gx^2} , onde $g = cte.$, é uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o estado fundamental do oscilador harmônico. Encontre uma expressão para g em termos de massa m e da frequência angular ω do oscilador.
- 2) Considere uma barreira de potencial de altura V , onde $V = 0$ para $x < 0$ igual a $V_0 = cte.$ para $x \geq 0$. A função de onda é igual $\psi = Ne^{-\kappa x}$ para $x \geq 0$.
 - a) Calcule a função de onda espacial para $x < 0$.
 - b) Determine a probabilidade de que a partícula esteja no interior da barreira.
 - c) Calcule a profundidade de penetração média da partícula no interior da barreira.
- 3) Considere uma partícula de massa m confinada em uma caixa bi-dimensional retangular de lados L_x e L_y , localizada no 1º quadrante do plano xy .
 - a) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para a partícula em coordenadas cartesianas.
 - b) Use a técnica de separação de variáveis e obtenhas as soluções $\psi = \psi(x, y)$ e as correspondentes energias, incluindo a constante de normalização.
 - c) Considere $L_x = L$ e $L_y = L$. Escreva as funções de onda e as respectivas energias para os números quânticos (n_x, n_y) para os valores $(1,2)$ e $(2,1)$. Que fenômeno físico está envolvido nesta situação e qual é a característica do sistema físico que o provoca?
- 4) Uma partícula de massa m e energia cinética constante K , propaga-se ao longo de uma barreira de potencial de altura $2K$ situada em $x < 0$. Calcule:
 - a) A função de onda $\psi_1(x)$, para $x < 0$, e $\psi_2(x)$, para $x \geq 0$.
 - b) O coeficiente de transmissão em $x = 0$.
- 5) Um elétron de energia total E incide da esquerda para a direita numa região em que a energia potencial é dada por:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & , x \leq 0 \\ 0 & , x > 0 \end{cases}$$

Considerando que $E > U_0$, determine:

- a) a função de onda deste elétron em todo o espaço (a menos de uma constante);
- b) o valor numérico da probabilidade de transmissão desse elétron, considerando $E = 14$ eV e $U_0 = 7$ eV.
- 6) Considere uma partícula de massa m confinada a uma caixa bidimensional de lados L_x e L_y no 1º quadrante do plano xy .

a) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para a partícula e obtenhas as soluções normalizadas de ψ assim como o seu espectro de energia.

b) O que é um estado degenerado? Sob que condição o sistema em questão poderia ser considerado degenerado?

7) Considere uma barreira de potencial dada por $U = \infty$ para $x < 0$, $U = 0$ para $0 \leq x < L$ (*região 1*) e $U = U_0 > 0$ para $x \geq L$ (*região 2*), onde a energia total de uma partícula é dada por E , onde $0 < E < U_0$.

a) Sendo a e b as constantes de normalização nas regiões com $U = 0$ e $U = U_0$, respectivamente, mostre que

$$a = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{L - \frac{\sin(2k_1 L)}{2k_1} + \frac{\sin^2(k_1 L)}{k_2}}} = \frac{b e^{-k_2 L}}{\sin(k_1 L)},$$

onde k_1 e k_2 são os módulos dos números de onda nas *regiões 1* e *2*, respectivamente.

b) Com a autofunção completa normalizada, calcule a probabilidade de encontrar a partícula na *região 2*.

8) A função de onda espacial para um oscilador harmônico simples quântico de frequência angular ω e massa m , no primeiro estado excitado, é dada por:

$$\psi_1(x) = a x e^{-bx^2}$$

a) Calcule as constantes a e b , ambas $\in \mathbb{R}_+^*$.

b) Deduza a equação que dá a densidade de probabilidade clássica normalizada para um oscilador com a mesma frequência e mesma massa.

9) Considere um pêndulo simples como um oscilador harmônico quântico (pequenas oscilações tal que $\sin(x) \simeq x$)

Mostre que as amplitudes angulares possíveis (em radianos) são dadas por

$$\theta_n = \frac{1}{g^{1/4} \ell^{3/4}} \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \sqrt{2n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

e calcule o valor de θ_n , também em graus, quando o número quântico $n = 1,524 \cdot 10^{29}$.

Dados:

Comprimento do pêndulo: $\ell = 10\text{cm}$

Massa do pêndulo: $m = 10\text{g}$

$\hbar \simeq 10^{-34} \text{ J.s}$

Aceleração da gravidade: $g = 10 \text{ m.s}^{-2}$

10) Deduza a expressão para a energia de uma partícula de massa m confinada a um poço quadrado infinito de largura a fazendo a analogia com a corda vibrante fixa em duas extremidades.

11) O coeficiente de transmissão para elétrons em uma barreira de potencial retangular de altura $V_o > E$ e largura a é dado por

$$T = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2(ka)}{\frac{4E}{V_o} \left(1 - \frac{E}{V_o} \right)} \right]^{-1},$$

onde $k = \sqrt{2mV_o(1 - E/V_o)}/\hbar$, $a = 10^{-6}\text{m}$, $m = 9,1 \cdot 10^{-31}\text{kg}$, $E/V_o = 3/4$, $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}\text{J.s}$.

a) Mostre que para $ka \gg 1$, o coeficiente de transmissão reduz-se a

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_o} \left(1 - \frac{E}{V_o} \right) e^{-2ka}.$$

b) Da expressão obtida no item (a), encontre a desigualdade que dá os possíveis valores de V_o para que $T > 2/3$.

c) Se uma corrente de elétrons de $0,12\text{ A}$ incide sobre esta barreira, qual é a “corrente refletida” quando $T = 2/3$?

12) Considere uma partícula confinada em um poço infinito de largura a , tal que no instante inicial ($t = 0$) a função de onda da partícula é dada por:

$$\psi(x, t=0) = \begin{cases} A(Bx - x^2), & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0, \text{ e } x > a \end{cases}$$

onde A e B são constantes reais.

a) determine B em função de a ;

Resp.: $B = a$

b) usando o resultado do item (a), determine a constante A .

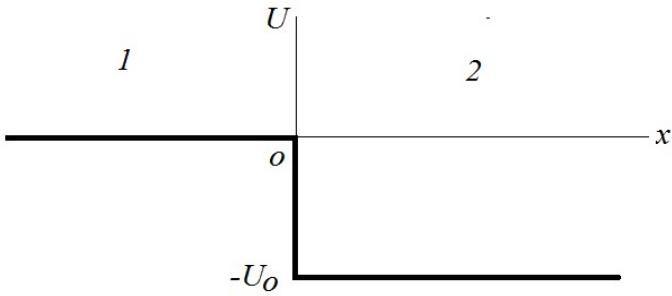
Resp.: $A = \sqrt{30/a^5}$

13)

a) Use a equação de Schrödinger para encontrar a expressão geral para as energias permitidas de um poço quadrado infinito de largura L .

O comprimento de onda da luz emitida por um laser de rubi é $694,3\text{ nm}$, tal que a emissão de um fóton emitido pelo laser pode estar associado à transição de um elétron do nível $n = 2$ pra o nível $n = 1$ desse poço.

b) Calcule a largura L do poço infinito em nm.



14) Uma partícula de massa m e energia $E > 0$ se aproxima de uma queda abrupta de potencial $-U_0 < 0$.

- Escreva a equação de Schrödinger em cada região.
- Escreva as condições de contorno do problema.
- Calcule o coeficiente de reflexão R , considerando que $E = U_0/3$.

Resp.: $R = 1/9$

15) Determine, para qualquer estado de uma partícula em uma caixa rígida unidimensional de tamanho L e massa m :

- a probabilidade de encontrá-la entre $x = 0$ e $x = L/3$;

Resp.: $P = 1/3 - \sin(2n\pi/3)/2n\pi$

b) Aplicando o princípio da correspondência, faça o limite apropriado e obtenha esta probabilidade para o caso clássico.

Resp.: $1/3$

c) Determine, para o estado fundamental, a incerteza Δp_x na quantidade de movimento da partícula.

Sugestão: $\Delta f = \sqrt{\overline{f^2} - \bar{f}^2}$

Resp.: $\Delta p_x = \pi\hbar/L = h/2L$

16) Duas partículas de massas m_1 e m_2 que se movem em uma dimensão interagem entre si. A energia potencial do sistema é dada por:

$$U(x_1, x_2) = a(x_1 - x_2) + b(x_1 - x_2)^2 \quad ; \text{ com } b > 0$$

a) Determine as energias desse sistema de duas partículas.

b) Quais são as funções de onda (autofunções) desse sistema?

Sugestão. Parta da equação de Schrödinger independente do tempo e faça uma mudança de variável conveniente.

Capítulo 7

Átomo de hidrogênio

O átomo de hidrogênio, com número atômico $Z = 1$ é o mais simples da tabela periódica. Ele é formado por um elétron (carga= $-e = -1,6 \cdot 10^{-19}$ C) e um próton (carga= $e = 1,6 \cdot 10^{19}$ C). As massas do elétron e do próton são dadas, respectivamente, por: $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg , $M \approx 1836m$.

A força de interação elétrica entre estas partículas é $2,3 \cdot 10^{39}$ maior do que a gravitacional, o que nos permite desprezar esta última. Sendo assim, a equação de Schrödinger espacial será dada por:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (7.0.1)$$

onde r é a distância entre as partículas e $U(\mathbf{r}) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$ é a energia potencial entre elas. $\mu = mM/(m + M)$ é a massa reduzida do sistema, pois o modelo a ser desenvolvido tem como sistema de referência inercial o centro de massa do sistema.

O potencial coulombiano, tendo simetria esférica, justifica o uso de coordenadas esféricas (Fig.[7.1]) para a solução da equação de Schrödinger, que é dado por:

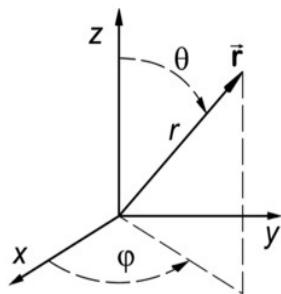


Figura 7.1: Densidade de probabilidade para o oscilador harmônico simples para os sete primeiros estados.

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

Então, a equação de onda espacial para o átomo de hidrogênio fica escrita como:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r})}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (7.0.2)$$

Multiplicando a equação diferencial espacial por $r^2/\psi(\mathbf{r})$ e escrevendo a função de onda como o produto das funções das três coordenadas, $\psi(\mathbf{r}) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, temos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \\ & = -\frac{1}{\Theta(\theta) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\Phi(\phi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

Uma vez que a partícula de massa reduzida μ e carga $-e$ pode se mover livremente em cada uma das três coordenadas, então r não depende de θ ou de ϕ ; logo, o lado esquerdo da equação acima deve ser igualado a uma constante:

$$\boxed{\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = C_1 = cte.} \quad (7.0.3)$$

Seguindo o mesmo procedimento de separação de variáveis, agora aplicado às funções $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\phi)$, temos:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + C_1 \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = C_2$$

ou

$$\boxed{\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + C_1 \sin^2 \theta = C_2} \quad (7.0.4)$$

e

$$\boxed{\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + C_2 \Phi = 0} \quad (7.0.5)$$

7.1 Equação diferencial azimutal

A equação diferencial azimutal Eq.[7.0.5] é a mais simples das três e permite encontrar a constante C_2 , necessária para a solução da Eq.[7.0.4].

As soluções da Eq.[7.0.5], escrita na forma abaixo,

$$\Phi'' + C_2 \Phi = 0$$

são obtidas a partir de:

$$\Phi(\phi) = e^{b\phi}$$

onde b é uma constante. Substituindo na equação diferencial, temos:

$$b^2 e^{b\phi} + C_2 e^{b\phi} = 0$$

ou

$$b = \pm i\sqrt{C_2}$$

Portanto, temos duas soluções possíveis. Uma vez que a equação é linear e homogênea, a solução completa é dada por

$$\Phi(\phi) = A e^{i\sqrt{C_2}\phi} + B e^{-i\sqrt{C_2}\phi}$$

Cálculo de C_2

Uma vez que (r, θ, ϕ) e $(r, \theta, \phi + 2\pi)$ são duas representações para um mesmo ponto no espaço, logo:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + 2\pi)$$

ou

$$A e^{i\sqrt{C_2}\phi} + B e^{-i\sqrt{C_2}\phi} = A e^{i\sqrt{C_2}(\phi+2\pi)} + B e^{-i\sqrt{C_2}(\phi+2\pi)}$$

A equação acima só será satisfeita se C_2 for um número real não negativo que satisfaça a condição abaixo:

$$e^{i2\pi\sqrt{C_2}} = 1$$

ou

$$\sqrt{C_2} = m_\ell = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$$

E a função $\Phi(\phi)$ fica descrita como

$$\Phi(\phi) = A e^{im_\ell \phi} + B e^{-im_\ell \phi} ; \quad m_\ell = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$$

Cálculo de A e B

As constantes A e B podem ser calculadas considerando que a probabilidade dP_ϕ para encontrar o elétron em qualquer região angular $d\phi$ em torno do eixo z , para r e θ fixos, deve ser constante¹:

$$dP_\phi = |\Phi|^2 d\phi = |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2im_\ell \phi} + A^* B e^{-2im_\ell \phi} = \text{cte.}$$

Portanto, A ou B deve ser nulo. Escolhendo $B = 0$, temos:

$$\Phi(\phi) = A e^{im_\ell \phi}$$

Para o cálculo de A , basta lembrar que a probabilidade de encontrar elétron no intervalo em que $\phi \in [0, 2\pi]$ é igual a 1:

$$\int_0^{2\pi} dP_\Phi = \int_0^{2\pi} d\phi |\Phi(\phi)|^2 = |A|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = |A|^2 2\pi = 1$$

ou

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

e a função azimutal fica definitivamente dada por:

$$\boxed{\Phi_{m_\ell}(\phi) = \frac{e^{im_\ell \phi}}{\sqrt{2\pi}} ; \quad m_\ell = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots} \quad (7.1.6)$$

O número m_ℓ é chamado de *número quântico azimutal* ou *número quântico magnético*; nome cujo significado ficará evidente posteriormente.

7.2 Equação diferencial radial

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = C_1 = \ell(\ell+1)$$

Observe que escrevemos $C_1 = \ell(\ell+1)$, sem perda de generalidade.

Reescrevendo $u(r) = rR(r)$, a equação fica dada por:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) u(r) = 0$$

A equação diferencial radial será resolvida por série, assim como a equação diferencial zenital, mas antes de aplicar a representação por série a partir da forma acima, vamos fazer duas considerações para casos assintóticos quando $r \rightarrow \infty$ e quando $r \rightarrow 0$.

¹Uma discussão mais detalhada sobre as densidades de probabilidade será feita posteriormente.

Comportamento para $r \rightarrow \infty$

Neste caso, os termos proporcionais a $1/r$ e $1/r^2$ devem ser desprezados em relação a $2\mu E/\hbar^2$, e a equação diferencial poderá ser reescrita aproximadamente como:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u(r) = 0$$

Uma vez que estamos considerando um elétron ligado, a energia E é negativa; escrevendo $E = -|E|$ e resolvendo a equação, temos:

$$u(r) = Ae^{-\sqrt{2\mu|E|} r/\hbar} + Be^{\sqrt{2\mu|E|} r/\hbar}$$

Uma vez que a segunda solução na combinação linear diverge para $r \rightarrow \infty$, devemos tomar $B = 0$:

$$u(r) = Ae^{-\sqrt{2\mu|E|} r/\hbar} \quad (7.2.7)$$

Comportamento para $r \rightarrow 0$

Neste caso, devemos tomar apenas o termo proporcional a $1/r^2$ entre parenteses:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u(r) = 0$$

Antes de apresentar as soluções da equação diferencial acima, devemos analisar o comportamento da constante $\ell(\ell+1)$. Pode-se mostrar que o valor esperado de L^2 , onde L é o momento angular orbital do elétron, é dado por $L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 \geq 0$; portanto, $\ell(\ell+1)$ é um número não negativo.

Definindo a função parabólica $g(\ell) = \ell(\ell+1)$, percebe-se que suas raízes são: $\ell = -1$ e $\ell = 0$ e que

$$i - g(\ell) \geq 0 \text{ se } \ell \leq -1$$

ou

$$ii - g(\ell) \geq 0 \text{ se } \ell \geq 0$$

A condição i deve ser descartada, pois ela impede que $L = 0$, o que resulta em $\ell \geq 0$.

Voltando à equação diferencial, pode-se mostrar que a sua solução geral é:

$$u(r) = Cr^{\ell+1} + Dr^{-\ell} ; \quad \ell \geq 0$$

O termo $r^{-\ell}$ diverge quando $r \rightarrow 0$, o que nos leva a tomar $D = 0$; logo:

$$u(r) = Cr^{\ell+1} \quad (7.2.8)$$

Solução geral da equação radial

Tomando os dois comportamentos assintóticos acima, propomos a seguinte forma para a solução da equação diferencial em $u(r)$:

$$u(r) = f(r)r^{\ell+1}e^{-\sqrt{2\mu|E|}r/\hbar} \quad (7.2.9)$$

Substituindo a expressão para $u(r)$ obtida acima, obtém-se uma equação diferencial para $f(r)$. Posteriormente, escrevendo $f(r)$ como uma série,

$$f(r) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j r^j$$

chega-se à seguinte relação de recorrência para a_j :

$$(j+1)(j+2\ell+2)a_{j+1} = 2(\alpha j + \alpha(\ell+1) - 1)a_j$$

onde

$$\alpha = \sqrt{\frac{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2|E|}{\mu e^4}}$$

Ao analisar a relação de recorrência, vemos que

$$\frac{a_{j+1}}{a_j} = \frac{2(\alpha j + \alpha(\ell+1) - 1)}{(j+1)(j+2\ell+2)} \rightarrow \frac{2\alpha}{j} \quad (j \gg 1)$$

Portanto, a série para $f(r)$ cresce mais rapidamente do que a exponencial $e^{\sqrt{2\mu|E|}r/\hbar}$, o que causará a divergência da função radial quando $r \rightarrow \infty$. Sendo assim, a série deve ser truncada para se tornar um polinômio e evitar a divergência. Então, fazendo,

$$\alpha j + \alpha(\ell+1) - 1 = \alpha(j+\ell+1) - 1 = 0$$

Logo, o valor máximo de j (j_{max}) deverá satisfazer à seguinte relação:

$$\alpha(j_{max} + \ell + 1) - 1 = 0 \rightarrow (j_{max} + \ell + 1) = \frac{1}{\alpha}$$

Mas $j + \ell + 1 = 1, 2, 3, \dots$, logo, $(j_{max} + \ell + 1) = 1/\alpha = n = 1, 2, 3, \dots$. Portanto, $f(r)$ se tornará um polinômio de grau $j_{max} = n - \ell - 1$:

$$f(r) \rightarrow f_{nl} = \sum_{j=0}^{n-\ell-1} a_j r^j$$

Energia do átomo de hidrogênio

Ao truncar a série para gerar o polinômio $f_{n\ell}$, obtivemos a equação abaixo:

$$(j_{max} + \ell + 1) = \frac{1}{\alpha} = n = 1, 2, 3, \dots$$

Da definição de α , dada por $\alpha = \sqrt{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2|E|/\mu e^4}$, chegamos à seguinte expressão para a energia do átomo de hidrogênio:

$$E_n = \frac{-\mu e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.2.10)$$

O número quântico n é chamado de *número quântico radial ou principal*.

A Fig.[7.2] mostra a curva de energia potencial coulombiana $U(r)$ entre o elétron e o próton no átomo de hidrogênio assim como os valores da energia total quantizada do átomo. Observe que as diferenças entre os níveis energéticos são cada vez menores quando E_n e n aumentam.

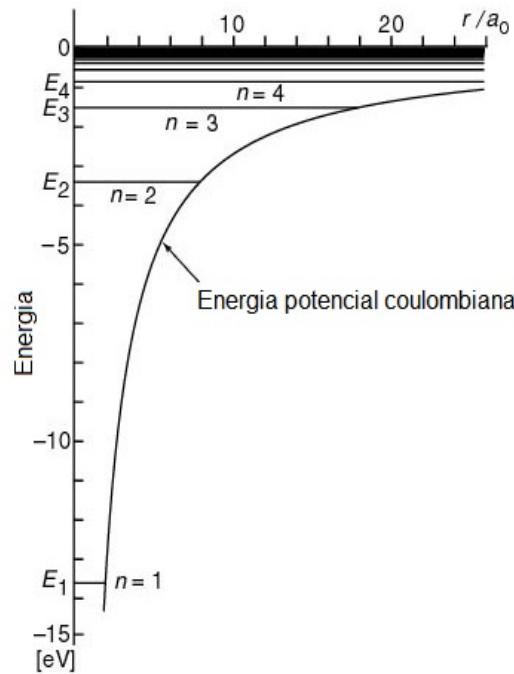


Figura 7.2: Energia quantizada do átomo de H e curva da energia potencial coulombiana $U(r)$ entre o elétron e o próton.

A energia de ionização (E_{i1}) para o estado fundamental ($n = 1$) é igual a energia necessária para que o sistema tenha energia total nula:

$$E_{i1} = 0 - E_1 = -E_1$$

ou

$$E_{i1} = \frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$$

o que nos permite escrever a energia E_n como igual a:

$$E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Quando o átomo está em um estado excitado n' , onde $n' > 1$, ele pode transicionar para qualquer estado com $n < n'$, e a energia excedente ser carregada por um fóton emitido de energia $E_f = h\nu_{n'n}$, onde $\nu_{n'n}$ é a frequência do fóton:

$$E_f = h\nu_{n'n} = E_n - E'_n = -13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

(7.2.11)

A Eq.[7.2.11] permite calcular a frequência da radiação emitida em qualquer transição quântica entre níveis E_n em um átomo de hidrogênio.

Número quântico secundário

A equação radial impõe uma limitação ao número quântico secundário ℓ . Já sabíamos que os números quânticos secundários eram dados por $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$, mas após a resolução da equação radial, pode-se ver que eles ficam limitados a um valor máximo, como podemos ver abaixo:

$$j = n - \ell - 1 \geq 0$$

ou $\ell \leq n - 1$, então

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$$

Exemplos de funções de onda radiais

A função radial, após a mudança de variável realizada e a função $f_n(r)$ obtida, é dada por:

$$R_{n\ell}(r) = f_{n\ell}(r)r^\ell e^{-r/a_\circ}$$

onde $a_\circ = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/\mu e^2 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$ é o raio de Bohr.

Abaixo estão algumas equações das funções radiais e suas respectivas curvas para $R_{n\ell}$. Observe nas abscissas de cada gráfico os valores esperados de $\langle r_{n\ell} \rangle$ para cada estado estacionário $\psi_{n\ell}$.

$$R_{10} = 2 \left(\frac{1}{a_\circ} \right)^{3/2} e^{-r/a_\circ}$$

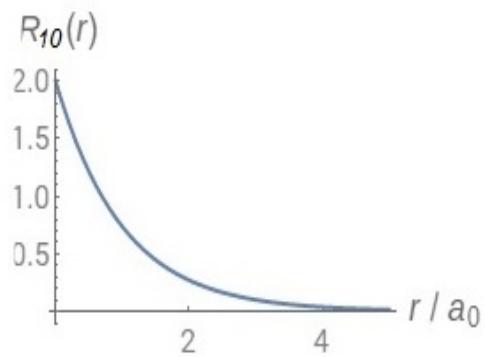


Figura 7.3:

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_\circ} \right)^{3/2} \frac{r}{a_\circ} e^{-r/2a_\circ}$$

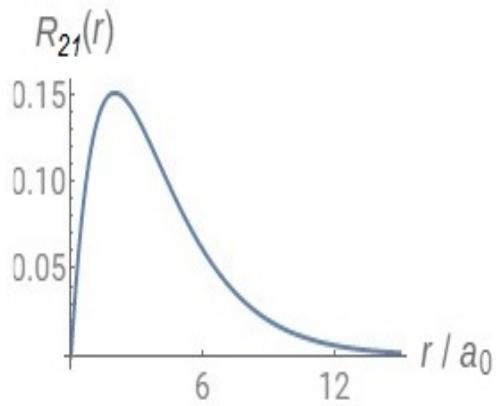


Figura 7.4:

$$R_{20} = 2 \left(\frac{1}{2a_\circ} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_\circ} \right) e^{-r/2a_\circ}$$

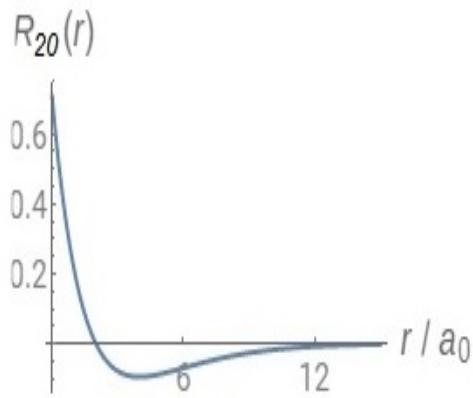


Figura 7.5:

$$R_{32} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{1}{3a_\circ} \right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_\circ} \right)^2 e^{-r/3a_\circ}$$

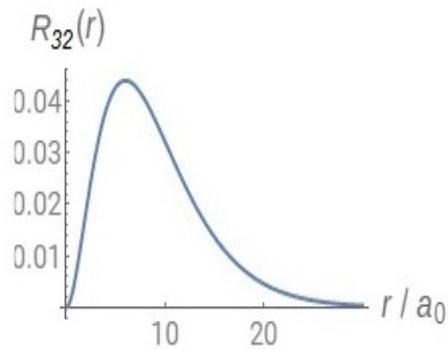


Figura 7.6:

$$R_{41} = \frac{64\sqrt{15}}{3(16a_\circ)^{3/2}} \left[\frac{r}{16a_\circ} - \left(\frac{2r}{16a_\circ} \right)^2 + \frac{16}{5} \left(\frac{r}{16a_\circ} \right)^3 \right] e^{-4r/16a_\circ}$$

7.3 Equação diferencial zenital

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + C_1 \sin^2 \theta = m_\ell^2 \quad (7.3.12)$$

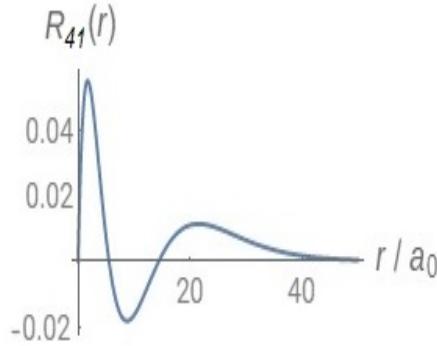


Figura 7.7:

Se fizermos $\cos \theta = x$, chega-se à seguinte equação diferencial *equação diferencial de Legendre associada*:

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P}{dx^2} - 2x \frac{dP}{dx} + \left(C_1 - \frac{m_\ell^2}{1 - x^2} \right) P = 0$$

onde $P(x) := \Theta(\theta)$.

Escrevendo $P(x)$ como

$$P(x) = (1 - x^2)^{m_\ell/2} \left(\sum_{j=0,2,\dots} a_j x^j + \sum_{j=1,3,\dots} a_j x^j \right)$$

obtém-se a seguinte relação de recorrência:

$$a_{j+2} = \frac{(j + m_\ell)(j + m_\ell + 1) - C_1}{(j + 1)(j + 2)} a_j \quad ; \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Entretanto, testes de convergência mostram que esta série não converge, a menos que haja um truncamento. Obviamente, o truncamento ocorre se $C_1 = \ell(\ell + 1)$, desde que ℓ seja um inteiro igual ao valor máximo de $j + m_\ell$, dado por $\ell = j_M + m_\ell$.

Então, a solução será um polinômio, pois

$$a_j = 0 \quad \text{para } j_M > \ell - m_\ell$$

e, portanto, a relação de recorrência será dada por:

$$a_{j+2} = \frac{(j + m_\ell)(j + m_\ell + 1) - \ell(\ell + 1)}{(j + 1)(j + 2)} a_j \quad ; \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell - m_\ell$$

(7.3.13)

Soluções da equação zenital - Polinômios de Legendre

A solução da equação azimutal, como vimos, será truncada para um valor máximo de j , dado por $j_{max} = \ell - m_\ell$. Se $\ell - m_\ell$ for par, o truncamento gerará apenas um polinômio

par, enquanto que para valores ímpares de j teremos uma série infinita, resultando em uma divergência, a menos que a série seja anulada fazendo $a_1 = 0$; o que acarretará na anulação de toda a série com valores ímpares graças à relação de recorrência. Da mesma forma, devemos ter $a_0 = 0$ quando $\ell - m_\ell$ for ímpar. Portanto, a solução final será dada pelos polinômios de Legendre abaixo:

$$P_{\ell, m_\ell}(x) = (1 - x^2)^{m_\ell/2} \sum_{j=0,2,\dots}^{\ell-m_\ell} a_{2j} x^{2j} , \text{ quando } \ell - m_\ell \text{ é par.} \quad (7.3.14)$$

$$P_{\ell, m_\ell}(x) = (1 - x^2)^{m_\ell/2} \sum_{j=1,3,\dots}^{\ell-m_\ell} a_{2j+1} x^{2j+1} , \text{ quando } \ell - m_\ell \text{ é ímpar.} \quad (7.3.15)$$

Funções de onda zenitais - Polinômios de Legendre Associados

Abaixo estão alguns exemplos polinômios de Legendre associados, obtidos da Eq.[7.3.14] e da Eq.[7.3.15]:

$$P_{00} = 1$$

$$P_{10} = \cos \theta$$

$$P_{11} = -\sin \theta$$

$$P_{20} = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_{21} = -3 \cos \theta \sin \theta$$

$$P_{22} = 3 \sin^2 \theta$$

$$P_{30} = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

A Fig.[7.8] mostra algumas curvas para os polinômios de Legendre associados P_{50} , P_{51} , P_{52} , P_{53} , P_{54} , P_{55} . Observe que a paridade das funções: par quando $\ell - m_\ell$ é par e ímpar quando $\ell - m_\ell$ é ímpar. A densidade de probabilidade, entretanto, será sempre par, pois é proporcional é proporcional a $P_{\ell m_\ell}^2$.

A Fig.[7.9] mostra gráficos polares para polinômios de Legendre associados para $\ell = 2$; $m_\ell = 1$ e $\ell = 3$; $m_\ell = 1$; $0 \leq \theta \leq \pi$. Esta representação, após tomar o módulo quadrado da função, tem a vantagem de permitir a visualização espacial da probabilidade de localização do elétron no espaço

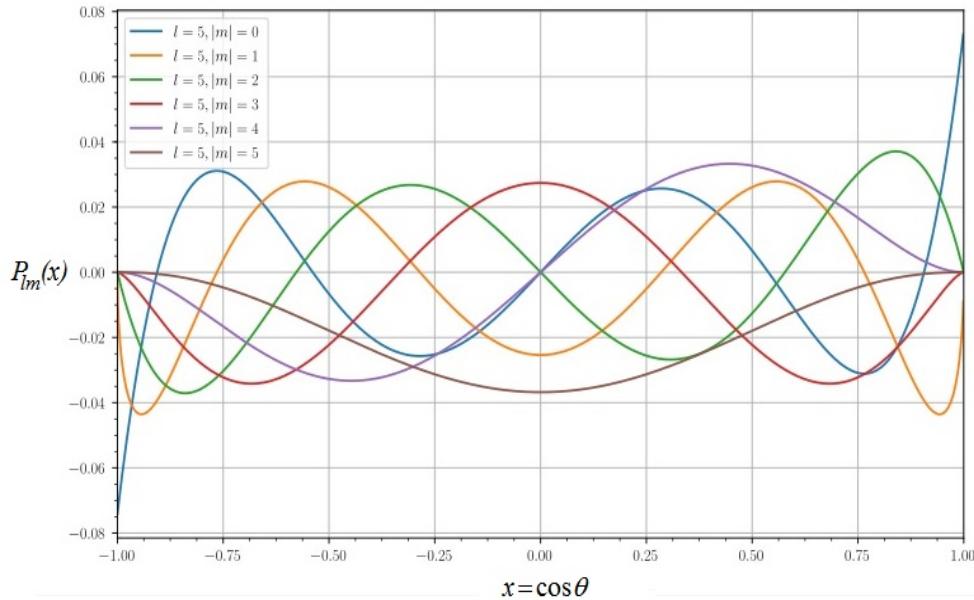


Figura 7.8: Gráficos cartesianos para os polinômios de Legendre associados para $\ell = 5$; $|m_\ell| = 0, 1, 2, 3, 4, 5$; $0 \leq \theta \leq \pi$.

Números quânticos secundário e magnético

Número quântico secundário

Como vimos, a Eq.[7.3.13] diz que

$$j = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell - m_\ell \geq 0$$

Quando $m_\ell = 0$ os valores de j são dados por $j = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell$ logo, os números quânticos secundários são dados por:

$$\boxed{\ell = 0, 1, 2, 3, \dots}$$

Número quântico magnético

Dos valores possíveis de j :

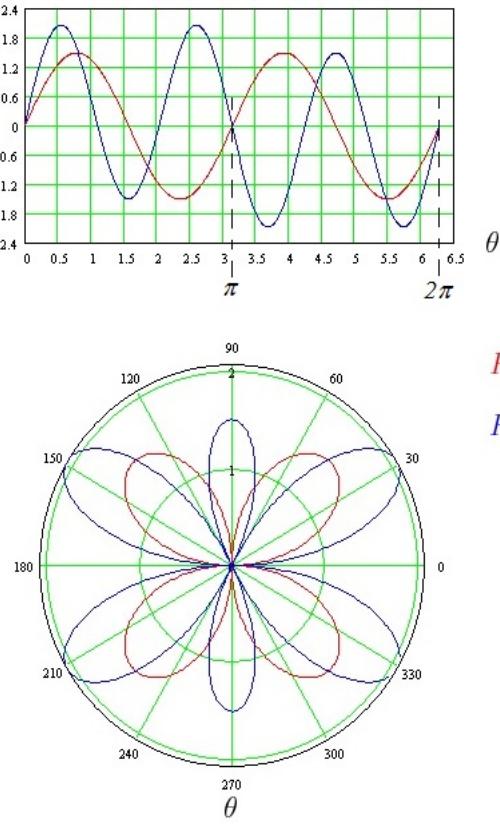
$$j = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell - m_\ell \geq 0$$

vem:

$$m_\ell \leq \ell$$

Digamos que, por hipótese, o m_ℓ na desigualdade acima seja não negativo e dado por m_ℓ^+ , então:

$$m_\ell^+ = m_\ell \leq \ell$$



$$P_2^1(\theta) = -3 \cdot \cos(\theta) \sin(\theta)$$

$$P_3^1(\theta) = -\frac{3}{2}[5\cos^2(\theta) - 1]\sin(\theta)$$

Figura 7.9: Gráficos polares para os polinômios de Legendre associados para $\ell = 2$; $m_\ell = 1$ e $\ell = 3$; $m_\ell = 1; 0 \leq \theta \leq \pi$.

Invertendo a desigualdade para valores não positivos $m_\ell^- = -m_\ell^+ = -m_\ell$, temos

$$-\ell \leq -m_\ell = m_\ell^-$$

o que mostra que, para valores não positivos, o número quântico magnético é maior ou igual a que $-\ell$

Resumindo os resultados acima, conclui-se que:

$$\boxed{-\ell \leq m_\ell \leq \ell}$$

ou

$$\boxed{m_\ell = -\ell, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, \ell}$$

7.4 Orbitais atômicos

Um orbital atômico é um estado estacionário de um elétron em um átomo, caracterizado pela sua função de onda estacionária. Sendo a função de onda identificada completamente

pelos números quânticos, pode-se dizer, então, que um orbital atômico é dado pelo tanto por $\psi_{n\ell m_\ell}$ quanto pelo conjunto n, ℓ, m_ℓ , cujos valores estão dados abaixo:

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

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$$

$$m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, \ell - 1, \ell$$

Portanto, para cada número quântico principal n , há n valores possíveis para o número quântico secundário; e para cada ℓ há $2\ell + 1$ valores possíveis do número quântico magnético m_ℓ .

Para cada n , o número de estados possíveis é dado por:

$$N_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} m_\ell = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \sum_{\ell=0}^{n-1} \ell + \sum_{\ell=0}^{n-1} 1 = 2 \frac{(0 + n - 1)n}{2} + n$$

ou

$$N_n = n^2$$

Obs.: Quando estudarmos o spin do elétron, veremos que o número de orbitais para cada valor de n irá dobrar, fazendo com que $N_n = 2n^2$.

Nomenclatura para números quânticos

A nomenclatura para o número quântico secundário é dada por letras da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \ell = 0 &\rightarrow s \\ \ell = 1 &\rightarrow p \\ \ell = 2 &\rightarrow d \\ \ell = 3 &\rightarrow f \end{aligned} \tag{7.4.16}$$

Os demais seguem em ordem alfabética: $\ell = 4 \rightarrow g$, $\ell = 5 \rightarrow h$, e assim por diante.

Diz-se que um elétron está no estado

$1s$ se $n = 1; \ell = 0; m_\ell = 0$

$2s$ se $n = 2; \ell = 0; m_\ell = 0$

$2p$ se $n = 2; \ell = 1; m_\ell = -1, 0, 1$

$3d$ se $n = 3; \ell = 2; m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$

$4f$ se $n = 4; \ell = 3; m_\ell = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$

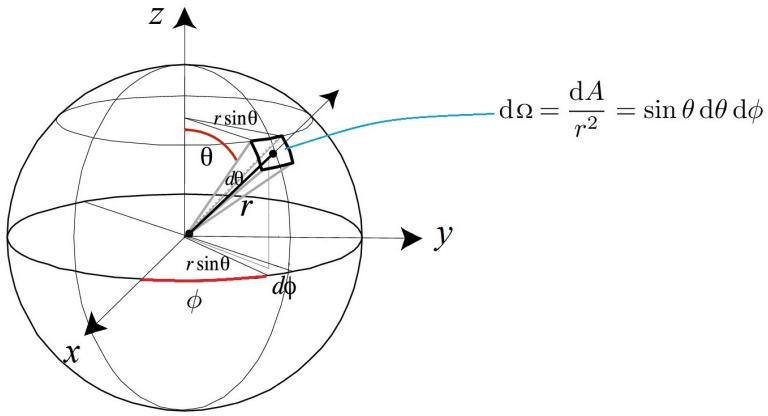


Figura 7.10:

7.5 Densidade de probabilidade eletrônica no átomo de hidrogênio

A probabilidade de encontrar o elétron em um volume dv localizado na vizinhança de um ponto arbitrário (r, θ, ϕ) é dada por

$$dP = \rho dv$$

onde $\rho = |\psi_{n\ell m_\ell}|^2 = |R_{n\ell}(r)|^2|\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2|\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2$ é a densidade de probabilidade, $dv = r^2 dr d\Omega$ é o volume infinitesimal e $d\Omega$ o ângulo sólido (Fig.[7.10]). Então:

$$dP = \underbrace{|R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr}_{dP_r} \underbrace{|\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 |\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2 d\Omega}_{dP_\Omega}$$

A interpretação que se faz da expressão acima é a seguinte: $|R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr$ é a probabilidade dP_r de encontrar o elétron entre r e $r + dr$, para quaisquer θ e ϕ , enquanto $|\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 |\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2 d\Omega$ é a probabilidade dP_Ω de encontrar o elétron no ângulo sólido $d\Omega$ entre θ e $\theta + d\theta$ e entre ϕ e $\phi + d\phi$ para qualquer r . Desta forma, podemos definir as densidades de probabilidade radial e angular:

$$\rho_r = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2$$

e

$$\rho_\Omega = |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 |\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2$$

Uma vez que a densidade ρ_Ω é dada pelo produto de duas funções, uma de θ e outra de ϕ , pode-se ainda dizer que $|\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2$ é a densidade de probabilidade de encontrar o elétron entre θ e $\theta + d\theta$ enquanto $|\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2$ é a densidade de probabilidade de encontrar o elétron entre ϕ e $\phi + d\phi$; entretanto, $|\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2 = 1/2\pi$, o que significa que a probabilidade de encontrar o elétron é a mesma para qualquer ϕ .

Do que foi dito acima, temos:

$$\int_0^\infty \rho_r dr = \int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

e

$$\begin{aligned} \int_{\Omega=0}^{\Omega=4\pi} \rho_\Omega d\Omega &= \int_{\Omega=0}^{\Omega=4\pi} |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 |\Phi_{m_\ell}(\phi)|^2 d\Omega = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \\ &= \int_0^\pi |\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1 \end{aligned}$$

A última integral mostra que $|\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2 \sin \theta$ é normalizada quando integrada de 0 a π , mesmo sendo $|\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)|^2$ a densidade de probabilidade para a coordenada θ .

Densidade de probabilidade radial

As figuras abaixo mostram alguns exemplos de curvas para a densidade de probabilidade radial $\rho_r = r^2 R_{n\ell}^2$. Observe a localização no eixo das abscissas do valor esperado de r .

1s

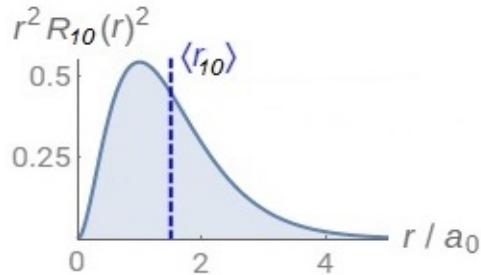


Figura 7.11: $R_{10} = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$

2s

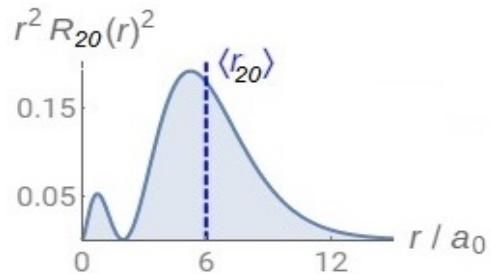


Figura 7.12: $R_{20} = 2 \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$

2p

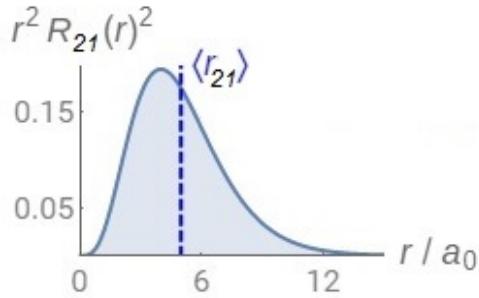


Figura 7.13: $R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_\circ} \right)^{3/2} \frac{r}{a_\circ} e^{-r/2a_\circ}$

3d

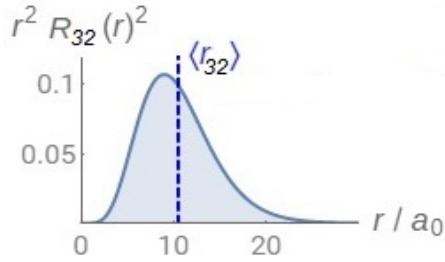


Figura 7.14: $R_{32} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{1}{3a_\circ} \right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_\circ} \right)^2 e^{-r/3a_\circ}$

4p

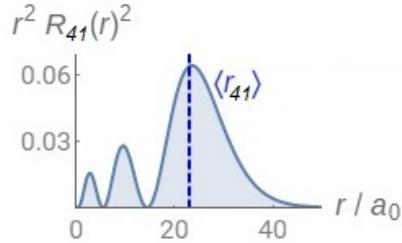


Figura 7.15: $R_{41} = \frac{64\sqrt{15}}{3(16a_\circ)^{3/2}} \left[\frac{r}{16a_\circ} - \left(\frac{2r}{16a_\circ} \right)^2 + \frac{16}{5} \left(\frac{r}{16a_\circ} \right)^3 \right] e^{-4r/16a_\circ}$

Densidade de probabilidade zenital

Abaixo estão algumas densidades de probabilidades $\Theta_{\ell m \ell}^2$

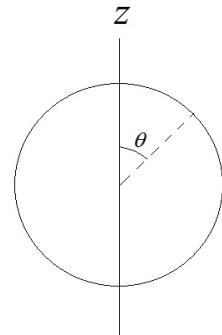


Figura 7.16: $|\Theta_{00}|^2 = 1$

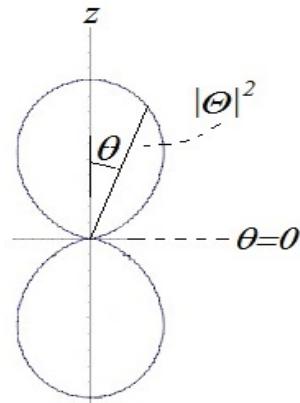


Figura 7.17: $|\Theta_{10}|^2 = \cos^2 \theta$

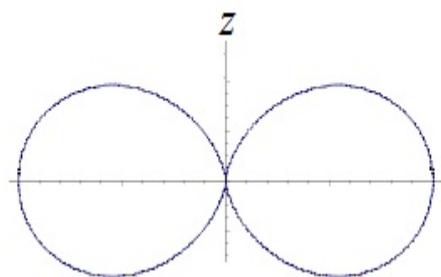


Figura 7.18: $|\Theta_{11}|^2 = \sin^2 \theta$

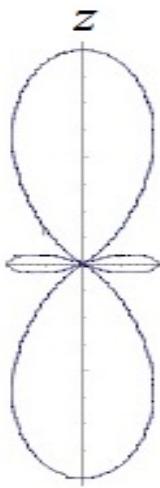


Figura 7.19: $|\Theta_{20}|^2 = (3 \cos^2 \theta - 1)^2$

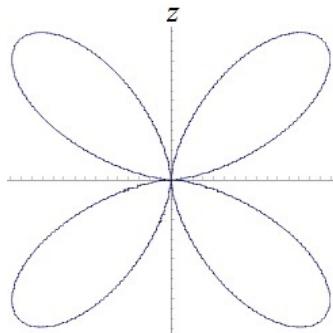


Figura 7.20: $|\Theta_{21}|^2 = \sin^2(2\theta)$

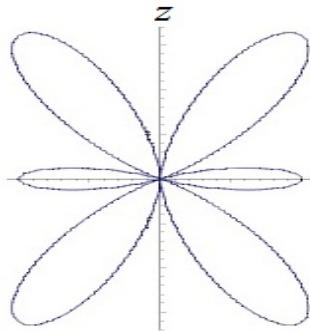


Figura 7.21: $|\Theta_{31}|^2 = (1 - 5 \cos^2 \theta)^2 \sin^2 \theta$

7.6 Gráficos polares de distribuição de probabilidade

A distribuição de probabilidade completa para um elétron em um átomo de hidrogênio pode ser visualizada em gráficos polares. Esses gráficos são elaborados a partir do produto das densidades de probabilidade radial e angular. Uma vez que a densidade para ϕ é uma constante ($\rho_\phi = |\Phi(\phi)|^2 = 1/2\pi$), as densidades radial $|R|^2r^2$ e zenital, $|\Theta|^2$ são suficientes para a construção dos gráficos em três dimensões.

Como primeiro exemplo, tomemos a densidade para o estado ψ_{210} :

$$|\psi_{210}|^2 = |R_{21}|^2|\Theta_{10}|^2|\Phi_0|^2 = |R_{21}|^2|\Theta_{10}|^2/2\pi \quad (n = 2; \ell = 1; m_\ell = 0),$$

Os gráficos cartesiano e polar da densidade de probabilidade radial P_r estão mostrados na Fig.[7.22]. Ao fazermos o produto da densidade radial P_r pela densidade de probabilidade zenital P_θ , ambas nas representações polares, obtemos a representação final da densidade de probabilidade polar para o estado estacionário ψ_{210} . Uma vez que a densidade azimutal é constante, basta fazer uma revolução em torno do eixo z para ter a representação final em 3 dimensões. As áreas hachuradas representam de forma destacada apenas as regiões do espaço em que as densidades de probabilidade são maiores, pois as funções P_r e P_θ são contínuas.

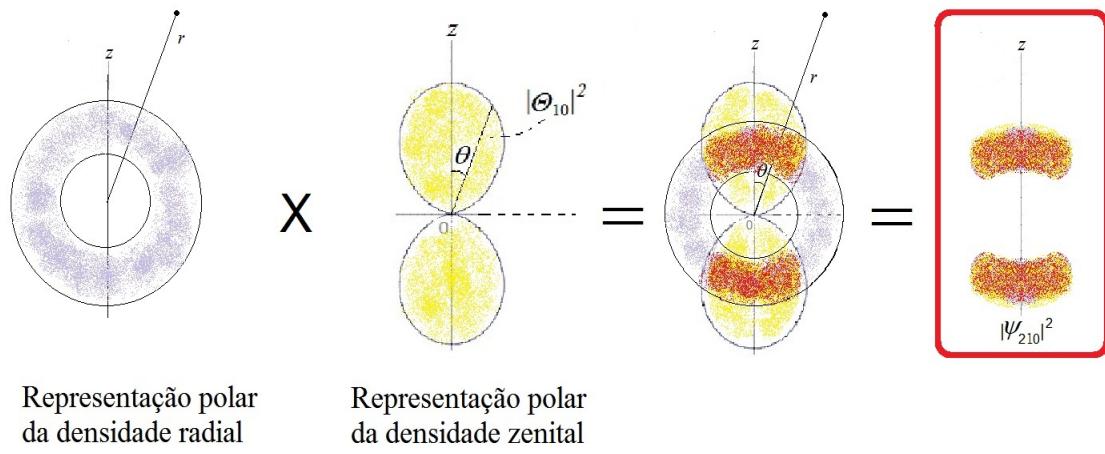
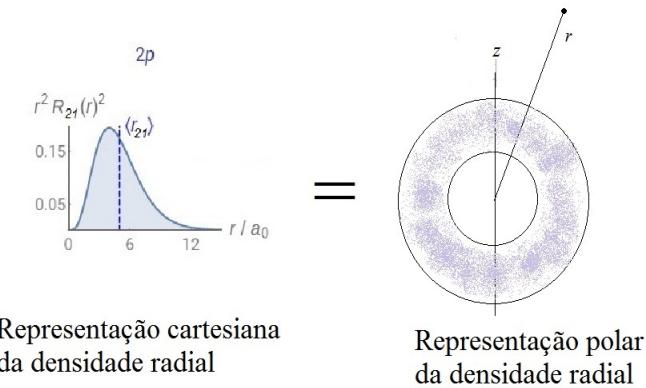


Figura 7.22: Densidade de probabilidade radial e zenithal para o estado ψ_{210} ($n = 2$; $\ell = 1$; $m_\ell = 0$).

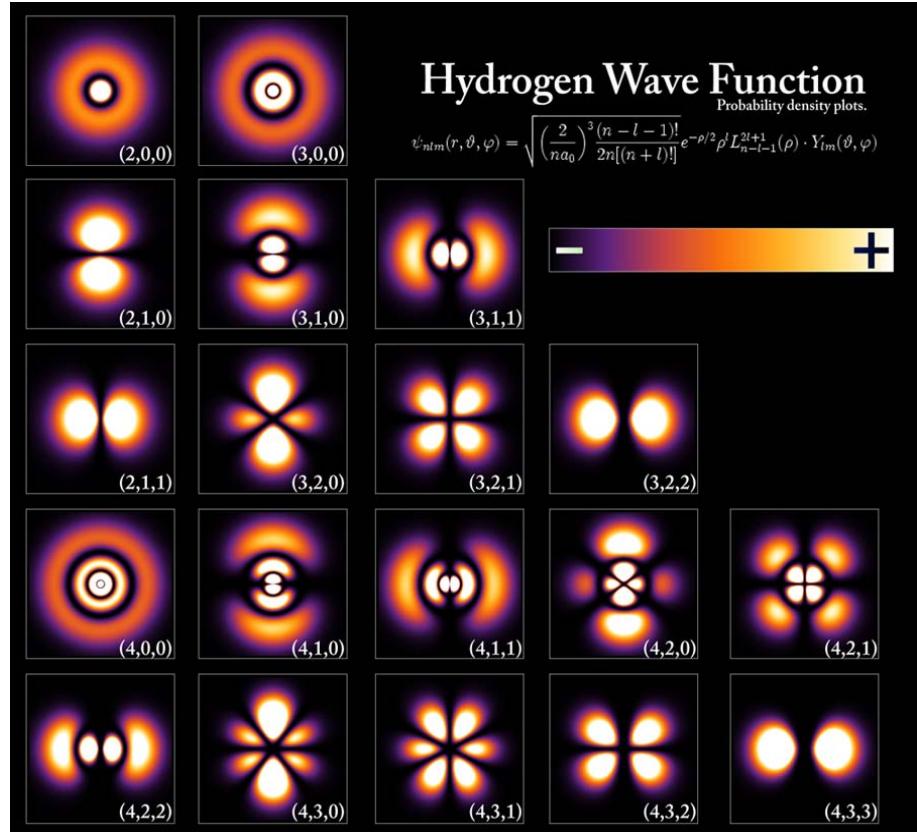


Figura 7.23:

7.7 Momento angular do elétron no átomo de hidrogênio

Nesta seção iremos calcular os autovalores do momento angular total do elétron em um átomo de hidrogênio e suas componentes, de onde serão obtidos os autovalores de \hat{L} , assim como os de \hat{L}_z . Os autovalores L_z apresenta uma quantização espacial, que poderá ser apreciada quando analisarmos os gráficos em três dimensões das distribuições de densidade de probabilidade $|\psi_{n\ell m_\ell}|^2$.

Para o cálculo dos autovalores das componentes do momento angular, assim como do próprio L em um estado estacionário $\psi_{n\ell m_\ell}$, partiremos das seguintes equações de autovalor:

$$\hat{L}_j \psi_{n\ell m_\ell} = L_j \psi_{n\ell m_\ell}$$

onde $j = 1, 2, 3$; $x_1 = x$; $x_2 = y$; $x_3 = z$ e o operador \hat{L}_j é dado por:

$$\hat{L}_j = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})_j = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla)_j$$

Autovalor do operador \hat{L}^2

O momento angular do elétron em um átomo para o estado estacionário $\psi_{n\ell m_\ell}$ é mais facilmente obtido a partir da seguinte equação de autovalor:

$$\hat{L}^2 \psi_{n\ell m_\ell} = L^2 \psi_{n\ell m_\ell}$$

onde

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})^2 = (\mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla))^2 = -\hbar^2(\mathbf{r} \times \nabla)^2$$

Uma vez que já conhecemos as autofunções de um elétron no átomo de hidrogênio, pode-se calcular os autovalores de \hat{L} .

Ao contrário do cálculo para a obtenção do autovalor de \hat{L}_z , os cálculos para se chegar a L^2 são bem mais complicados. Sendo assim, para obter esses autovalores seguiremos um caminho heurístico e semi-clássico.

Abaixo está a equação diferencial radial, que já resolvemos para obter a energia do átomo de hidrogênio e a densidade de probabilidade radial. Agora iremos usá-la para obter os autovalores do operador \vec{L}^2 .

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \ell(\ell+1)$$

A energia E pode ser reescrita como:

$$E = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

onde $\mu v^2/2$ é a energia cinética, que por sua vez pode ser reescrita como a soma de uma parcela radial e outra angular; o que leva a energia total ser dada também por:

$$E = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\mu(r\dot{\alpha})^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

onde α é o ângulo varrido pelo raio r no intervalo dt . Uma vez que o momento angular L é dado por

$$L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = \mu|\mathbf{r} \times \mathbf{v}| = \mu r^2 \dot{\alpha}$$

A energia e a equação radial ficam dadas por:

$$E = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

e

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\mu^2 r^2 \dot{r}^2}{\hbar^2} + \underbrace{\frac{L^2}{\hbar^2}}_{=\mu r^2 \dot{\alpha}^2} = \ell(\ell+1)$$

Observe que a parcela que contém L^2 descreve um comportamento angular, mas a equação diferencial deve dar conta apenas do comportamento radial do elétron, associado ao termo $\mu\dot{r}^2/2$. A interpretação é que o termo constante $L^2/\hbar^2 = \mu r^2 \dot{\alpha}^2$ não pode estar explicitamente presente na equação. A única alternativa é que este termo se cancele com a constante $\ell(\ell+1)$:

$$\frac{L^2}{\hbar^2} = \ell(\ell+1)$$

ou

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \hbar ; \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1 \quad (7.7.17)$$

Portanto, o momento angular do elétron é quantizado! Por esta razão, o número quântico ℓ também é conhecido como *número quântico orbital*.

Componente L_z do momento angular

$$\hat{L}_z = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})_z = (\mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla))_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}_z \Psi(\mathbf{r}, \theta, \phi) = L_z \Psi(\mathbf{r}, \theta, \phi) = L_z(R_{n\ell}(\mathbf{r})\Theta_\ell(\theta)\Phi_{m_\ell}(\phi)) = R_{n\ell}(\mathbf{r})\Theta_\ell(\theta) \left(-i\hbar \frac{\partial\Phi_{m_\ell}(\phi)}{\partial\phi} \right)$$

Mas $\Phi_{m_\ell}(\phi) = e^{im_\ell\phi}/\sqrt{2\pi}$, de onde vem:

$$L_z \Phi_{m_\ell}(\phi) = -i\hbar \frac{\partial \Phi_{m_\ell}(\phi)}{\partial \phi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{e^{im_\ell \phi}}{\sqrt{2\pi}} \right) = m_\ell \hbar \frac{e^{im_\ell \phi}}{\sqrt{2\pi}} = m_\ell \hbar \Phi_{m_\ell}(\phi)$$

$$\boxed{L_z = m_\ell \hbar \quad ; \quad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, \ell-1, \ell} \quad (7.7.18)$$

A Eq.[7.7.18] diz que a componente L_z do momento angular do elétron no átomo é quantizada espacialmente, ou seja, se L_z assume apenas valores que dependem de uma variável discreta m_ℓ , então o valor esperado momento angular total na direção de apenas alguns ângulos, como mostra a Fig.[7.24].

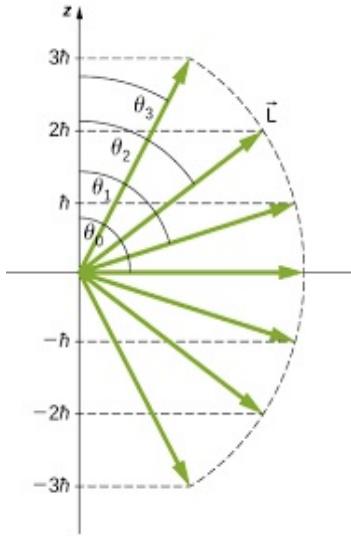


Figura 7.24: Quantização espacial do momento angular L , caracterizada pelos valores da sua componentes L_z .

7.8 Momento magnético orbital

Uma partícula de massa m com velocidade constante em uma órbita circular de raio r e período T , a sua velocidade o seu momento angular serão iguais a $v = 2\pi r/T$ e $L = mrv$. Se a partícula é um elétron, o seu momento magnético orbital será dado por:

$$\mu_L = iA = \frac{-e}{T}\pi r^2 = -\frac{e}{2m} \left(mr \frac{2\pi r}{T} \right) = -\frac{eL}{2m}$$

ou

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e\vec{L}}{2m}$$

Portanto, considerando o elétron em um átomo com momento angular igual a $L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}$, o seu momento magnético será dado por:

$$\mu_L = -\frac{e\hbar}{2m}\sqrt{\ell(\ell + 1)} ; \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$$

7.9 Efeito Zeeman

O efeito Zeeman caracteriza-se pelos desdobramentos das linhas espetrais do átomo, quando este interage com um campo magnético.

Energia magnética orbital

$$U_m = -\mu \cdot \mathbf{B}$$

$$\mathbf{B} = B\hat{z}$$

$$U_m = -\left(-\frac{e\vec{L}}{2m}\right) \cdot B\hat{z} = \frac{eL_z}{2m}B$$

$$L_z = m_\ell \hbar$$

$$U_m = \frac{e\hbar B}{2m}m_\ell ; \quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$$

A regra de seleção diz que as únicas transições permitidas associadas aos números quânticos n , ℓ e m_ℓ são aquelas em que: $\Delta n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, $\Delta m_\ell = 0, \pm 1$ e $\ell = \pm 1$.

$$\Delta U_m = \frac{e\hbar B}{2m}\Delta m_\ell ; \quad \Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

A Fig.[7.25] ilustra as transições permitidas entre os estados $2p$ ($n = 2, \ell = 1$) e $1s$ ($n = 1, \ell = 0$) sem e com campo magnético externo aplicado.

A variação total da energia do átomo, nos casos da Fig.[7.25], será dada pela equação:

$$\Delta E = \Delta E_n + \Delta U_m$$

onde $E_n = -13,6/n^2$ (eV)

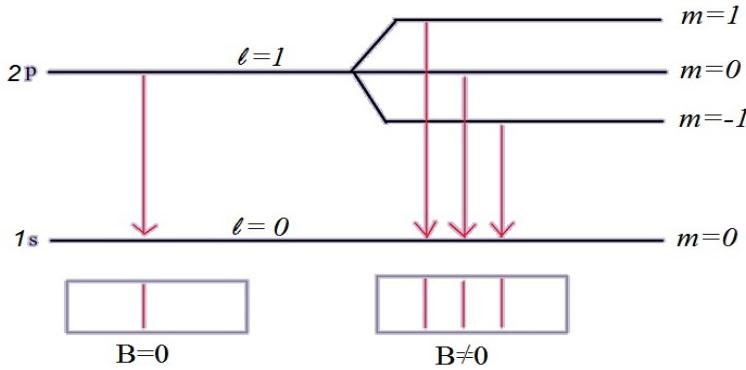


Figura 7.25: Efeito Zeeman: transições com e sem campo magnético externo entre os subníveis $2p$ ($n = 2$, $\ell = 1$) e $1s$ ($n = 1$, $\ell = 0$).

Problema resolvido

Obtenha as expressões das energias de transição para $B = 0$ e para $B \neq 0$ para o caso da Fig.[7.25].

- $B = 0$

$$\Delta E = \left(\frac{-13,6}{1^2} + \frac{13,6}{2^2} \right) + \left(\frac{e\hbar B}{2m} \underbrace{\Delta m_\ell}_{=0} \right) = -\frac{3}{4}13,6$$

- $B \neq 0$

Neste caso, há três valores possíveis:

$$\Delta m_\ell = -1$$

$$\Delta E = \left(\frac{-13,6}{1^2} + \frac{13,6}{2^2} \right) + \left(\frac{e\hbar B}{2m} \underbrace{\Delta m_\ell}_{=-1} \right) = -\frac{3}{4}13,6 - \left(\frac{e\hbar B}{2m} \right)$$

$$\Delta m_\ell = 0 \text{ (resulta no mesmo valor de energia de transição já obtido para } B = 0)$$

$$\Delta E = \left(\frac{-13,6}{1^2} + \frac{13,6}{2^2} \right) + \left(\frac{e\hbar B}{2m} \underbrace{\Delta m_\ell}_{=0} \right) = -\frac{3}{4}13,6$$

$$\Delta m_\ell = +1$$

$$\Delta E = \left(\frac{-13,6}{1^2} + \frac{13,6}{2^2} \right) + \left(\frac{e\hbar B}{2m} \underbrace{\Delta m_\ell}_{=+1} \right) = -\frac{3}{4} 13,6 + \left(\frac{e\hbar B}{2m} \right)$$

7.10 O spin do elétron - Experiência de Stern-Gerlach

A experiência de Stern-Gerlach

Em 1922, os físicos Otto Stern e Walther Gerlach realizaram um experimento que evidenciou que os elétrons possuem um momento magnético intrínseco, chamado de momento magnético de *spin*.

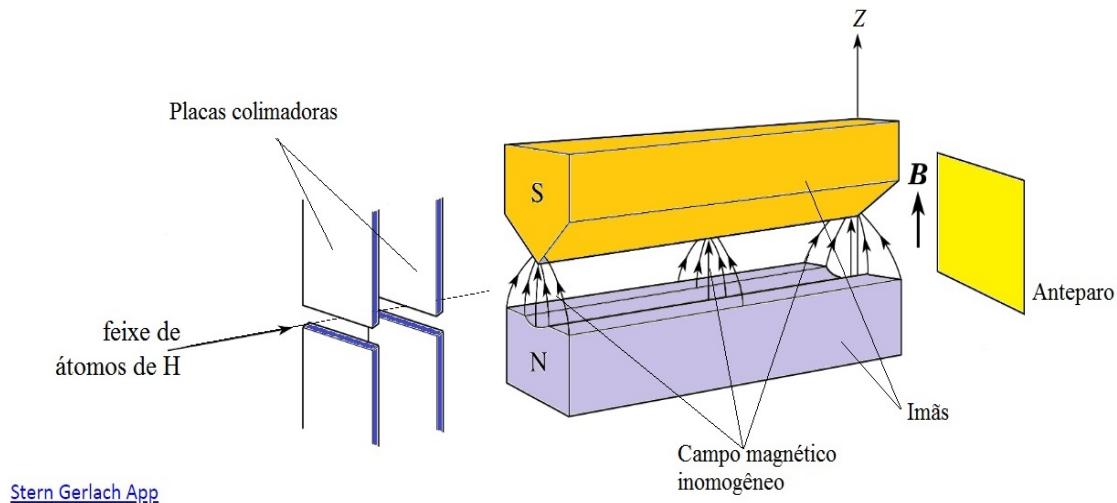


Figura 7.26: Experiência de Stern-Gerlach com feixes de átomos de H no estado 100.

A Fig.[7.26] ilustra esquematicamente o aparato utilizado por Stern e Gerlach. Um feixe de átomos de prata (eletricamente neutros) desloca-se no vácuo através do espaço entre dois imãs paralelos na forma de trilhos. Um dos trilhos tem a sua secção reta na forma de 'V', enquanto o outro tem a seção reta na forma de 'U'. O campo magnético gerado entre os trilhos é não homogêneo e transversal à direção incidente do feixe, o que causa a aceleração perpendicular aos trilhos sobre partículas que possuam momento magnético (veja Fig.[7.27]).

Os átomos de prata são depositados em uma placa de vidro (anteparo), após passarem pelo campo magnético gerado pelos trilhos magnetizados. Duas linhas são observadas na placa, conforme ilustrado na Fig.[7.28], o que evidencia que os átomos possuem apenas duas componentes de momento magnético na direção do campo. Este resultado contrasta com o que seria esperado classicamente, quando as componentes do momento magnético na direção do campo seriam aleatórias, o que resultaria numa distribuição espacial contínua (ver desenho à esquerda na Fig.[7.28]).

As considerações mais detalhadas de Stern e Gerlach se basearam nos fatos descritos a seguir. O momento magnético de um átomo é formado pela totalidade dos momentos magnéticos de todos os seus elétrons (a contribuição do núcleo atômico é insignificante-

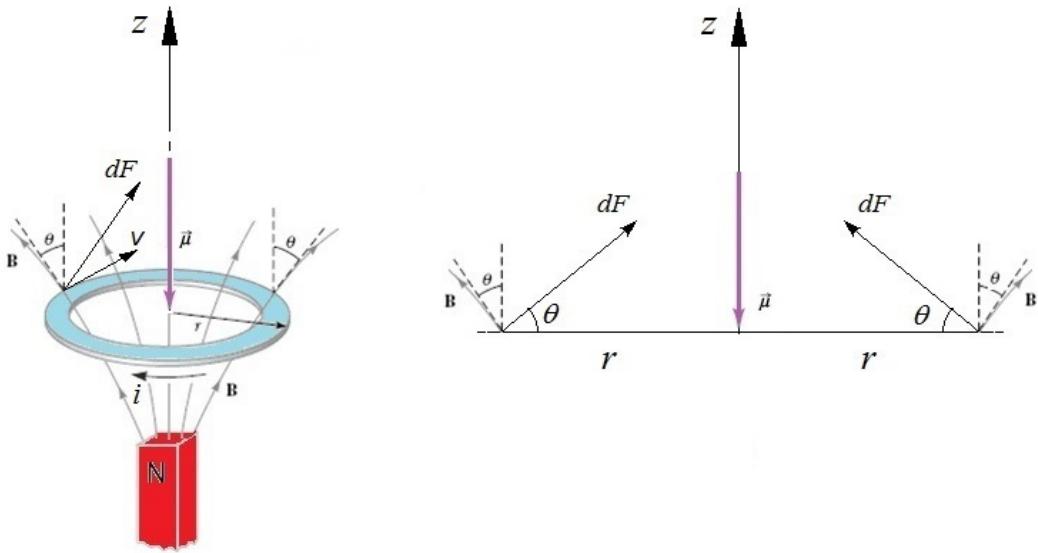


Figura 7.27: Força sobre uma espira em campo magnético inomogêneo: $F_z = 2\mu_z B_r / r$.

pequena neste caso). Nos átomos de prata, apenas o elétron 5s contribuiria para o momento magnético orbital, pois todos os outros elétrons formam camadas fechadas, com momento angular nulo, o que implica em momento angular orbital igualmente nulo. Entretanto, o número quântico do momento angular orbital ℓ é 0 para o elétron 5s, o que resulta em momento angular orbital e momento magnético igualmente nulos. Mais ainda, como o átomo de prata no experimento tem carga elétrica total nula (não haveria força de Lorentz para desviar os átomos), Stern e Gerlach suspeitaram que este elétron teria algum momento magnético intrínseco. Assim, todo átomo de prata se comportaria como uma partícula com momento magnético intrínseco do elétron 5s. Após a comprovação exaustiva da existência deste momento magnético intrínseco, que passou a se chamar *spin do elétron*, o físico Otto Stern ganhou o Prêmio Nobel de Física em 1943.

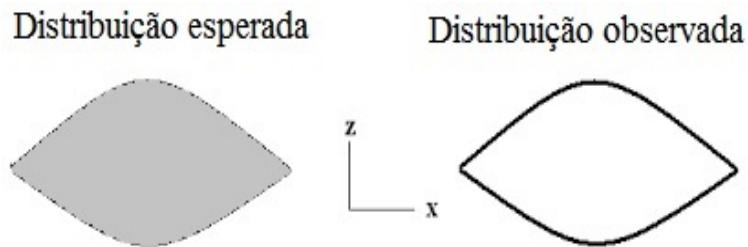


Figura 7.28: Distribuição contínua esperada classicamente e distribuição observada no anteparo (apenas duas linhas de desvio dos átomos).

Modelo teórico proposto por Stern e Gerlach para o spin do elétron

Stern e Gerlach propuseram um modelo baseado naquele já existente para o momento angular orbital do elétron no átomo, cuja expressão matemática é dada por $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ e $L_z = m_\ell\hbar$, para a componente z de L . Então, designando o momento angular de spin como S , escreveram:

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

e

$$S_z = m_s\hbar$$

Para o momento angular, os valores de ℓ são dados por $0, 1, 2, 3, \dots$ e os de $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots -2-1, 0, 1, 2, \dots, \ell-1, \ell$. Uma vez que no experimento de Stern-Gerlach foram observadas apenas duas linhas associadas ao desvio, e a quantidade de linhas é igual ao número de componentes na direção do campo magnético (por definição, direção do eixo z), então devem existir 2 valores para m_s :

$$m_s = -s, s$$

Estendendo a analogia com o modelo do momento angular orbital, em que a diferença entre dois valores sucessivos do número quântico é igual a 1, vem:

$$s - (-s) = 2s = 1 \Rightarrow \boxed{s = \frac{1}{2}}$$

Finalmente, os valores de S e S_z ficam dados por:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{1/2(1/2+1)}\hbar$$

ou

$$\boxed{S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar}$$

e a componente z (componente na direção do campo magnético) assume apenas dois valores dados por:

$$\boxed{S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar}$$

Como vimos, o spin do elétron foi descoberto experimentalmente e o modelo matemático esboçado acima foi desenvolvido posteriormente de forma empírica. De fato, os resultados previstos pela equação de Schrödinger para o átomo não evidencia qualquer momento angular e momento magnético do elétron que não seja apenas o orbital. Apenas dois anos após Schrödinger obter a sua equação, em 1928 Paul Dirac obteve uma equação de onda relativística. Da sua equação, o spin do elétron surge naturalmente, assim como a previsão do que veio a se chamar antimateria.

Problemas

1) Sabendo que a energia do átomo de hidrogênio pode ser obtida por

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \overline{\left(\frac{1}{r_n}\right)},$$

onde $\overline{1/r_n}$ é o valor médio de $1/r$ na subcamada² (n, ℓ), e que a dependência radial da função de onda³ no estado fundamental é dada por

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_o^{3/2}} e^{-r/a_o},$$

calcule E_1 (energia do átomo de hidrogênio no estado fundamental).

2) A função de onda do elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio é dada por:

$$\psi(r, \theta, \phi) = Ae^{-r/a_o},$$

onde A é uma constante de normalização e a_o é o raio de Bohr.

Determine:

- a) o valor de A
- b) a distância mais provável entre o elétron e o próton;
- c) o valor médio do módulo da força elétrica que atua sobre o elétron;
- d) o valor médio da energia potencial do elétron nesse sistema.

3)

a) Calcule o momento magnético $\vec{\mu} = i\vec{A}$ de um elétron de massa m e carga $-e$, movendo-se em um círculo de raio r a cada período T , assim como o seu respectivo momento angular \vec{L} . Dê os resultados em função de e, m, r e T .

b) Utilize os resultados obtidos no item (a) e escreva a equação que relaciona $\vec{\mu}$ a \vec{L} .

c) Considerando os possíveis valores de L e L_z no átomo e a energia magnética, dada por $U_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, onde $\vec{B} = B\hat{z}$ é um campo externo, qual é a expressão da energia magnética no átomo de H ?

4) A função de onda do estado $\psi_{2,1,0}$ do átomo de hidrogênio é dada por:

$$\psi_{2,1,0} = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \text{ onde}$$

$$R(r) = \frac{r}{2\sqrt{6}a_o^{5/2}} e^{-r/2a_o}, \quad \Theta(\theta) \frac{\sqrt{6}}{2} \cos(\theta), \quad \Phi(\phi) \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

²Observe que, para um átomo hidrogenoide, o valor de $\overline{1/r_{n\ell}} = \overline{1/r_n}$, pois a energia só depende do número quântico principal, n .

³A função $R_{10}(r)$ já está normalizada: $\int_0^\infty |R_{10}(r)|^2 r^2 dr = 1$.

- a) Calcule a probabilidade de o elétron ser encontrado na região: $60^\circ < \theta < 120^\circ$.
- b) Calcule a distância mais provável entre o elétron e o próton.
- 5) A função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio é dada por:
- $$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$
- Determine:
- a) a probabilidade de encontrar o elétron a uma distância do próton maior que a_0 .
- b) o valor médio do módulo da força elétrica entre o elétron e o próton.
- 6) Em relação ao módulo do momento angular do elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio, determine:
- a) seu valor de acordo com o modelo de Bohr;
- b) seu valor de acordo com a mecânica quântica (Schrödinger).
- 7) As funções radial R_{21} e zenital Θ_{21} para o átomo de hidrogênio são dadas por:
- $$R_{21} = A r e^{-r/2a_0} ; \quad \Theta_{21} = B \sin(2\theta)$$
- onde A e B são constantes (não é preciso calculá-las!).
- a) Escreva a expressão da densidade de probabilidade radial $P_{21}(r)$; faça um esboço da curva $P_{21}(r)$ versus r .
- b) Escreva a expressão da densidade de probabilidade zenital $P_{21}(\theta)$; faça um esboço da curva $P_{21}(\theta)$ versus θ (gráfico polar!).
- c) Faça um esboço do gráfico da densidade de probabilidade completa (representação orbital) a partir dos itens anteriores.
- 8) Qual é a menor energia possível (em eV) de um elétron no átomo de hidrogênio se o seu momento angular orbital é igual a $\sqrt{12} \hbar$?
- 9) No átomo de hidrogênio, a função de onda espacial do elétron no estado $n = 2, \ell = 1, m_\ell = 0$ é dada por

$$\psi_{210}(r, \theta, \phi) = A r e^{-r/2a_0} \cos \theta ,$$

onde A é uma constante real positiva e a_0 é o raio de Bohr.

- a) Calcule a constante de normalização A .
- b) Calcule o valor esperado de $1/r$. Compare o seu resultado com o que é previsto pelo modelo de Bohr.

c) Esboce um gráfico em coordenadas polares da densidade de probabilidade para esta autofunção, e calcule a probabilidade de encontrar o elétron para $\theta \in [0, \pi/6] \cup [5\pi/6, \pi]$.

10) Na ausência de campo magnético externo, um átomo no estado $l = 1$ decai para o estado $l = 0$, emitindo um fóton de 600 nm.

Calcule, para o caso de um campo magnético externo de 2 T aplicado sobre o mesmo átomo, os comprimentos de onda associados aos sub-níveis de energia resultantes da interação entre o campo externo e o momento magnético orbital do átomo (efeito Zeeman normal).

11) No experimento de Stern-Gerlach, um feixe de elétrons, ao passar por uma região onde existe um campo magnético não-homogêneo, divide-se em dois feixes nitidamente distintos. Se um destes feixes secundários passar por um campo magnético idêntico e paralelo ao primeiro, haverá uma nova divisão do feixe? Justifique.

Capítulo 8

Princípio de Exclusão de Pauli

O princípio de exclusão de Pauli afirma que dois ou mais férmons idênticos (partículas com spin semi-inteiro) não podem ocupar o mesmo estado quântico dentro de um sistema quântico simultaneamente. Este princípio foi formulado pelo físico austríaco Wolfgang Pauli em 1925 para elétrons e mais tarde estendido a todos os férmons com o teorema da estatística de spin de Fierz (1939) e Pauli (1940).

Função de onda para dois elétrons em um mesmo sistema quântico

Considere duas partículas idênticas cujas funções de onda normalizadas são dadas por ψ_1 e ψ_2 . Por serem indistinguíveis, a função de onda do sistema quando as partículas estão nos estados a e b é dada por:

$$\psi_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1a}(\mathbf{r}_1)\psi_{2b}(\mathbf{r}_2) \pm \psi_{1b}(\mathbf{r}_1)\psi_{2a}(\mathbf{r}_2))$$

Observe que, de acordo com a indistinguibilidade quântica, $\psi_{ab} = \pm\psi_{ba}$. Se tomarmos o sinal $+$ de \pm na função de onda, $\psi_{aa} \neq 0$ e $\psi_{bb} \neq 0$, o que permitiria que as partículas estivessem no mesmo estado quântico. Portanto, se as partículas são elétrons, devemos tomar o sinal de $-$ e a função seria dada por:

$$\psi_{ab} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1a}(\mathbf{r}_1)\psi_{2b}(\mathbf{r}_2) - \psi_{1b}(\mathbf{r}_1)\psi_{2a}(\mathbf{r}_2))$$

Veja que, ao fazer $a = b$, temos:

$$\psi_{aa} = \psi_{bb} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1a}(\mathbf{r}_1)\psi_{2a}(\mathbf{r}_2) - \psi_{1a}(\mathbf{r}_1)\psi_{2a}(\mathbf{r}_2)) = 0$$

resultando numa probabilidade nula de encontrar dois elétrons no mesmo estado quântico, como requer o princípio de exclusão de Pauli.

8.1 Princípio de exclusão aplicado ao átomo

De acordo com o que vimos, o princípio de exclusão irá exigir que os elétrons em um átomo multieletônico devem estar em estados quânticos distintos.

Como há 4 números quânticos, teremos para cada elétron um conjunto $\{n, \ell, m_\ell, s\}$ distinto de qualquer outro elétron no átomo. O princípio de exclusão de Pauli contribuiu de forma fundamental para estabelecer a forma de 'preenchimento' de elétrons em um átomo em valores crescentes de energia. Além disso, estabeleceu as bases para a mecânica estatística para férmons (distribuição de Fermi-Dirac).

Por exemplo, para a primeira subcamada, há no máximo dois elétrons:

$$\text{subcamada } 1s: n = 1; \ell = 0; m_\ell = 0; s = +1/2 \text{ e } s = -1/2 \\ \rightarrow 1s^2$$

Números de elétrons por camada eletrônica no átomo

Para cada camada n , há N elétrons, cujo valor é obtido como se segue. Para cada n pode-se ter $\ell = 0, 1, \dots, n-1$; mas cada ℓ possui $2\ell+1$ valores de m_ℓ , do que resulta em um número igual a

$$N = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n-1) = \frac{(1 + (2n-1))n}{2}$$

ou

$$N = n^2$$

Entretanto, ainda falta levar em conta os 2 números quânticos de spin para cada elétron, o que nos leva ao número final de cada camada eletrônica no átomo:

$$N = 2n^2$$

8.1.1 Regra de Hund

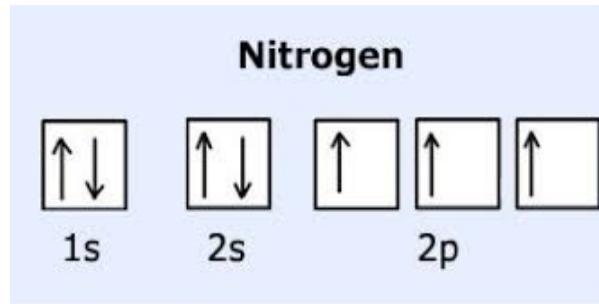


Figura 8.1: Preenchimento eletrônico de orbitais atômicos de acordo com a regra de Hund.

8.1.2 Configuração eletrônica

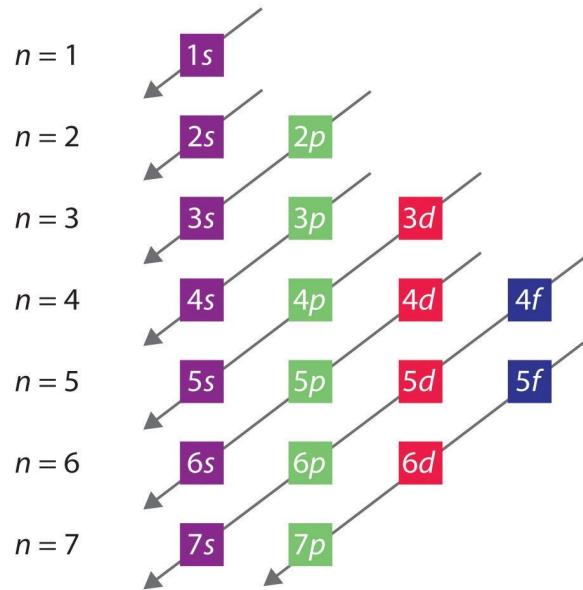


Figura 8.2: Preenchimento das subcamadas atômicas por ordem crescente de energia.

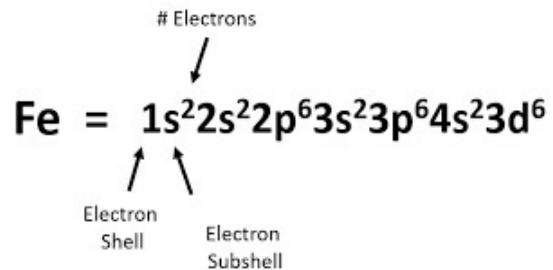
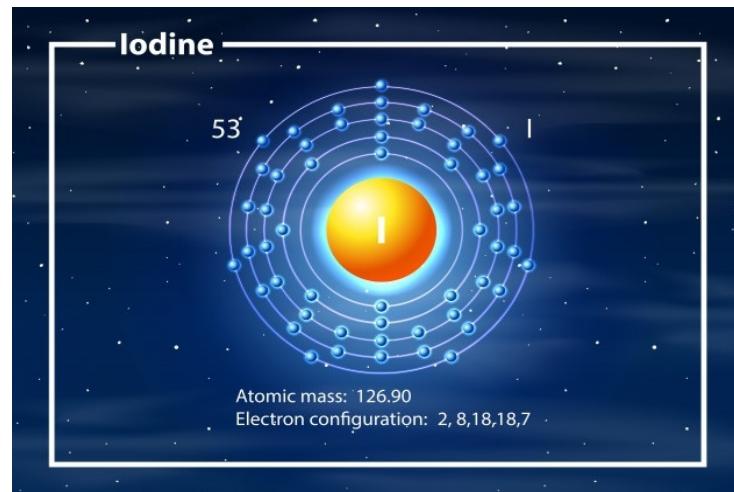


Figura 8.3: Configuração eletrônica do Fe (Ferro; $Z = 26$).



Iodine **I₅₃**

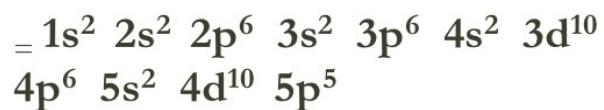


Figura 8.4: Representação esquemática de um átomo de I (iodo; $Z = 53$). Camadas eletrônicas do iodo.

Problemas

- 1) Enuncie o Princípio de Exclusão de Pauli.
- 2) Considere as funções de onda abaixo para um sistema com dois elétrons.

$$\psi_A = C[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)] ; \quad \psi_S = C[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]$$

a) Sabendo que elétrons obedecem ao princípio de exclusão e que $\psi_a(\mathbf{r}_1)$ é a função de onda para a partícula 1 no estado a , e assim por diante, qual das funções de onda acima você considera correta para descrevê-los em um sistema de dois elétrons? Explique.

b) Considerando que as funções ψ_a e ψ_b estão normalizadas, calcule a constante C .

Resp.: $1/\sqrt{2}$

3)

Referências

- [1] FÍSICA BÁSICA, 4 ; H. Moysés Nussenzveig, 5^a Ed., 2014; Edgar Blücher.
- [2] *Fourier series and boundary value problems*; Ruel V. Churchill, 1941; McGraw-Hill.
- [3] FÍSICA IV - Resnick-Halliday-Walker, 10^a Ed.; GEN.
- [4] FÍSICA, vol. III; Alonso e Finn, 1972.
- [5] *Mecânica Quântica* ; David J. Griffiths; Pearson.
- [6] *Mathematical Physics* ; George Arfken, Hans J. Weber; Elsevier.