Aula 22

Professor:

Mauricio Kischinhevsky

Estrutura da matéria (Parte 2)

Conteúdo:

Estrutura da matéria: A dualidade onda-partícula e a física quântica.

Interpretação da função de onda

Equação de Schrödinger

A função de onda relativa às ondas em uma corda é o deslocamento dos pontos da corda. Da mesma forma a das ondas sonoras pode fornecer o deslocamento longitudinal das moléculas de ar. Também as ondas eletromagnéticas têm, na função de onda, a descrição dos valores dos campos elétricos e magnéticos. O que poderia, então, fornecer a função de onda das ondas de elétrons? Concluiu-se que ela representaria uma densidade de probabilidade (P(x)), ou seja, a probabilidade de se encontrar a partícula na região em questão quando multiplicada pelo infinitésimo correspondente à região, dx. Há que se considerar que, se a partícula se encontra no domínio, a "probabilidade" de encontrá-la, seja lá onde for, é "1 Isto provê a condição de normalização. Assim,

$$P(x) = \psi^2(x) \text{ sendo } \int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)dx = 1.$$

Exemplo:

Uma partícula puntiforme clássica move-se na região confinada $0<x<8$. Determine a densidade de probabilidade $P(x)$; a probabilidade de encontrar a partícula em $x=2$; a probabilidade de encontrar a partícula entre $x=3{,}0$ e $x=3{,}4$.

Resposta:

Como a posição inicial da partícula não é conhecida ela pode estar em qualquer lugar de 0<x<8, com a mesma probabilidade. Assim, P(x)=P0, e P(x)=0, x<0 ou x>8. O valor P0 deve resultar da condição de normalização.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)dx = P_0 \times (8cm) = 1 \rightarrow P_0 = \frac{1}{8cm}.$$

Evidentemente, a probabilidade de a partícula estar no ponto específico (intervalo de tamanho nulo em torno do ponto) x=2 é P(Δ2). Δx= x/(8cm)=0
No caso do intervalo de tamanho Δ x=3,4cm-3,0cm=0,4cm, ter-se-á a probabilidade Δ x/(8cm)=0,4/8=0,05 (5%).

A dualidade onda-partícula se relaciona diretamente com a ambigüidade de ondas eletromagnéticas e partículas poderem exibir propriedades corpusculares e ondulatórias. Qual seria, então o formalismo adequado para descrever seus comportamentos? Considere o caso do experimento das duas fendas em que se envia apenas um elétron a partir da fonte antes do anteparo com as fendas. Ocorre de o elétron ser muito provavelmente detectado nos pontos correspondentes a máximos de interferência e a chance de ele ser detectado em pontos em que a diferença de percurso a partir das duas fendas coincide com um número ímpar de meios comprimentos de onda.

Princípio da Incerteza

Este princípio fundamental estabelece que é impossível medir simultaneamente a posição e o momento de uma partícula com muita precisão.

Observe que, para "ver" uma partícula é preciso enviar pelo menos um fóton sobre ela. Por causa da difração, determina-se a posição com uma incerteza da ordem de $\Delta X \sim \lambda$. Para reduzir a imprecisão pode-se utiliza radiação de pequeno comprimento de onda.

Para determinar o momento p_x de uma partícula pode-se medir a posição em dois instantes de tempo vizinhos e calcular sua velocidade. Se a luz usada tiver comprimento de onda λ , os fótons terão momento h/p_x . Com o espalhamento do fóton, o momento da partícula se altera de modo incontrolável. Portanto, a incerteza do momen Δ p_x do corpo introduzida pela observação com os fótons é da ordem de h/λ . Ou, grosso modo,

$$\Delta X . \Delta p_x \sim h.$$

Continuação:

Finalmente, enunciando de forma precisa essa descrição por meio do cálculo rigoroso dos desvios-padrão das medidas de posição e momento, obtém-se o enunciado conforme formulado por Werner Heisenberg em 1927, ou seja,

$$(\Delta x) \cdot (\Delta p_x) \geq \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi},$$

sendo $h/2\pi$ denominado $\hbar$ ("h cortado"). Na prática, as incertezas das medidas experimentais normalmente são muito maiores do que os limites inferiores acima

Partícula em uma caixa

Quando uma partícula clássica está confinada, a regra de que ela tem um comprimento de onda de deBroglie associado não é observada e quaisquer valores para a posição e o momento seriam possíveis. No caso de uma partícula para a qual a visão quântica é necessária, tem-se que a localização da partícula corresponderá à densidade de probabilidade. Os comprimentos de onda permitidos para a partícula serão correspondentes a

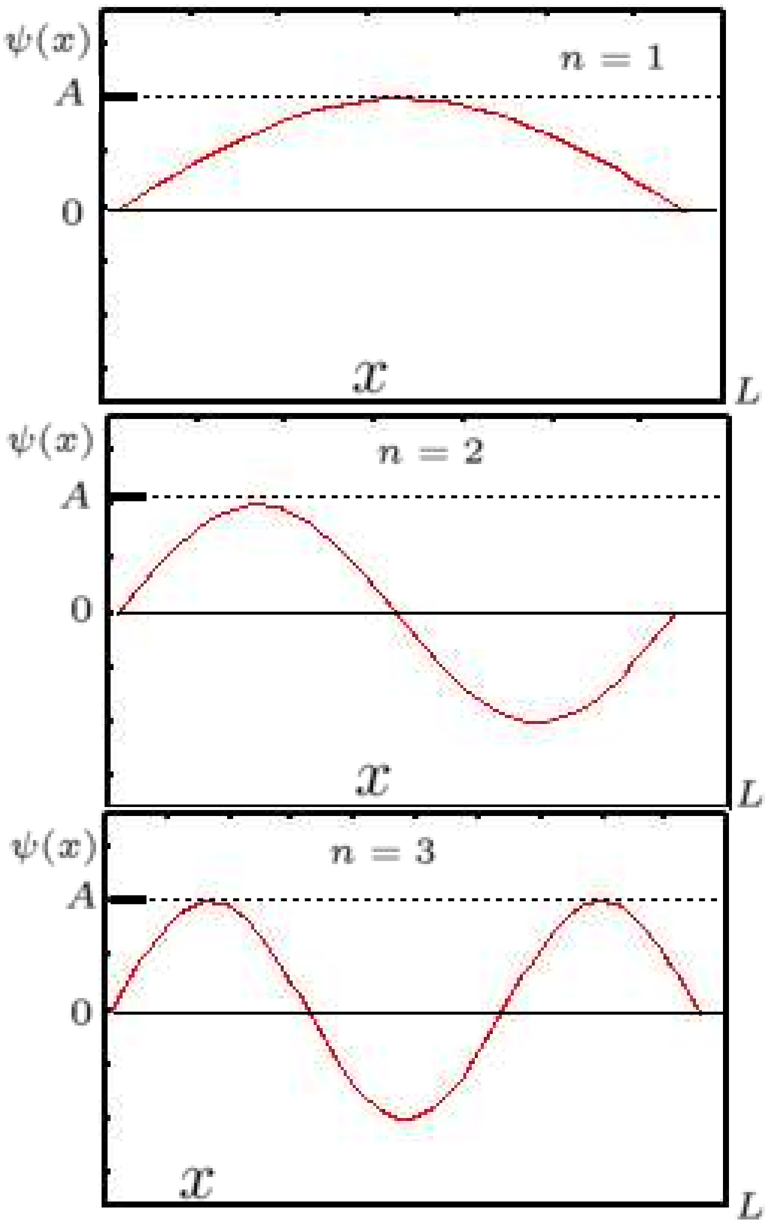
$L = n.\lambda_n/2$, n=1,2,3,...

Com ajuda da relação de deBroglie $p_n = h/\lambda_n$, pode-se calcular a energia cinética como $E_n = p_n^2/(2.m) = h^2/(2.m.\lambda_n^2)$.

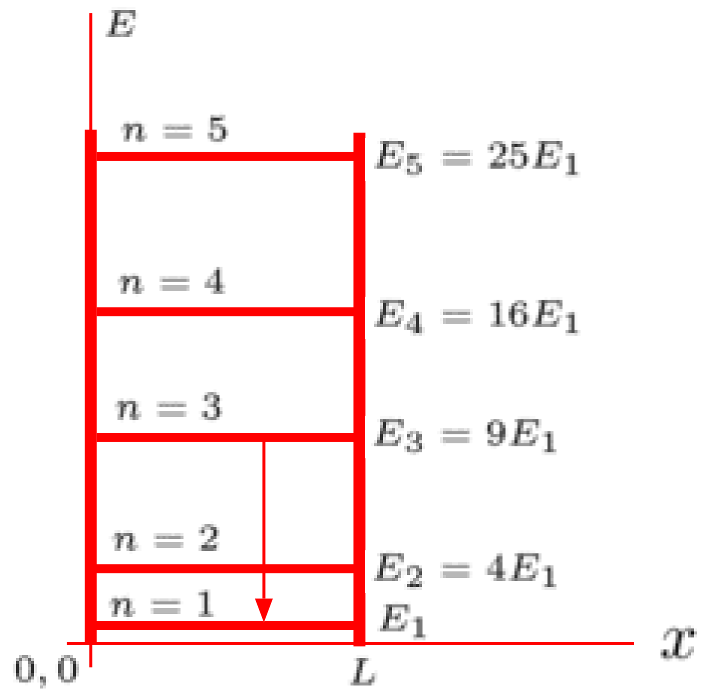
Ou seja, $E_n = n^2.E_1$, $E_1=h^2/(8.m.L^2)$.

Funções de onda

Para o problema da partícula na caixa escreve-se (normalização)

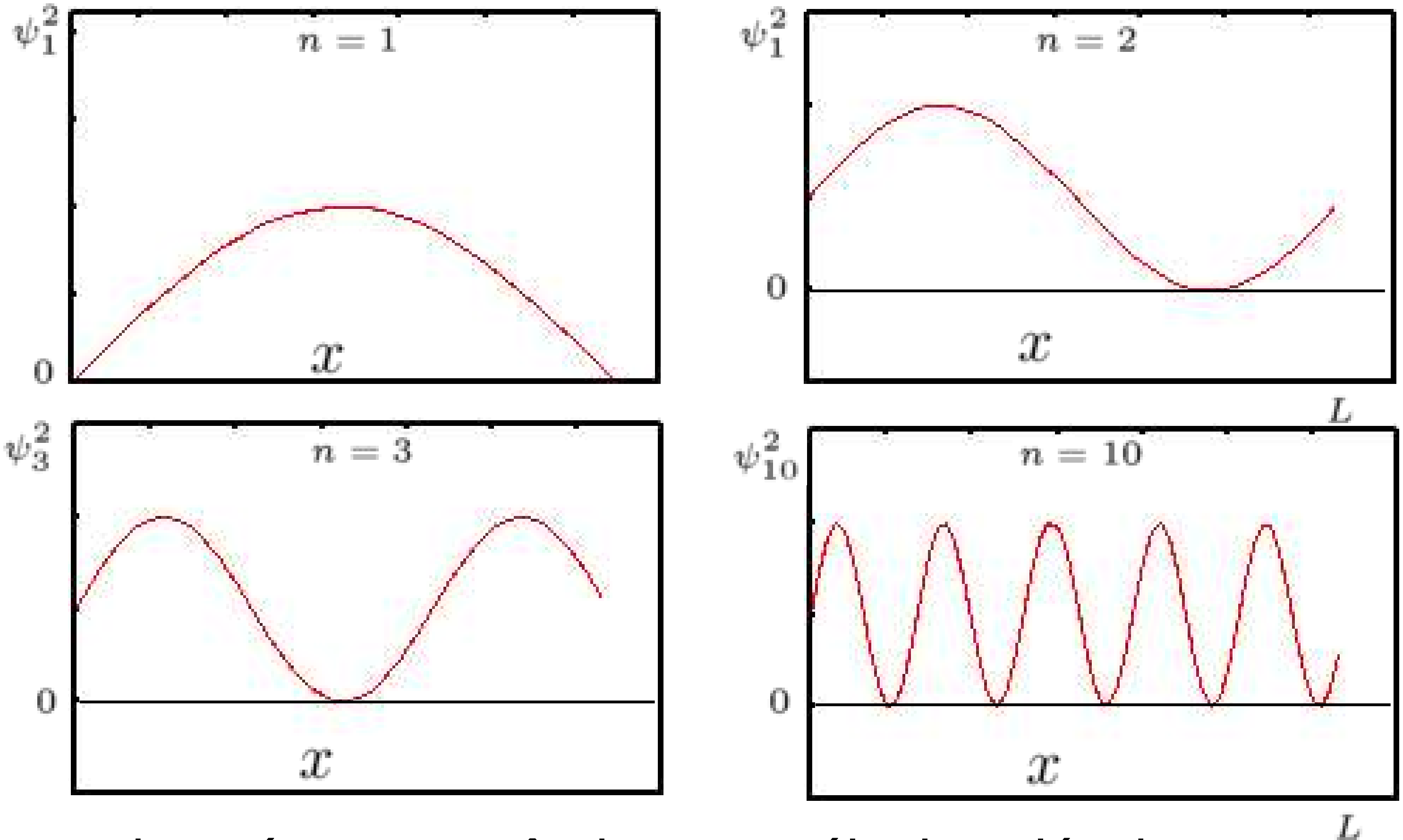


$$\psi_n(x) = A_n \sin(n\pi \frac{x}{L}) \rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$



Continuação:

O número n é denominado número quântico e caracteriza também a energia
(máximos denotam pontos de maior probabilidade).



Para grandes números quânticos os cálculos clássico e quântico fornecem o
mesmo (Princípio da Correspondência de Bohr)

Exemplo:

Um elétron está em uma caixa unidimensional de 0,1nm de comprimento. Determine as energias do estado fundamental até o estado n=3 em elétrons-volt, determinando a seguir os comprimentos de onda dos fótons emitidos em transições de n=3 para n=2 e de n=3 para n=1.

Resposta:

$$E_1 = \frac{(h \cdot c)^2}{8(m \cdot c^2)L^2} = \frac{(1240eV \cdot nm)^2}{8(5,11 \times 10^5 eV)(0,1nm)^2} = 37,6eV,$$

$$E_n = n^2 E_1, \rightarrow E_2 = (2)^2 \cdot E_1 = 150eV, E_3 = 338eV.$$

Assim, os comprimentos de onda pedidos serão

$$\lambda_{32} = \frac{(h \cdot c)}{E_3 - E_2} = \frac{1240eV \cdot nm}{338eV - 150eV} = 6,6nm,$$

$$\lambda_{31} = \frac{(h \cdot c)}{E_3 - E_2} = \frac{1240eV \cdot nm}{338eV - 37,6eV} = 4,13nm,$$

Fundação CECIERJ Consórcio cederj

Valor esperado e quantização de energia

Valores esperados

Também denominado esperança matemática, expressa a ponderação para uma grandeza qualquer sujeita a uma distribuição de probabilidade. Em geral, o valor esperado para uma grandeza f(x) é

$$\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\psi^2(x)dx.$$

Exemplo:

Uma partícula em uma caixa unidimensional de comprimento L está no estado fundamental. Calcule a probabilidade de se encontrar a partícula no intervalo de tamanho 0,01L centrado em L/2 e na região $0<x<L/4$.

Resposta:

no primeiro caso, tratando-se de um intervalo pequeno pode-se considerar como uma integral sobre uma faixa (aproximação por platô); no segundo, a integração é requerida.

Tem-se então, como $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}\sin(\pi\frac{x}{L})}$, temos

$$\psi^2(L/2) = \frac{2}{L}\sin^2(\pi\frac{L/2}{L}) = \frac{2}{L}$$

e, portanto,

$$P = \psi^2(L/2)\cdot(\Delta x) = \frac{2}{L}\times 0,01L = 0,02.$$

Resposta (continuação):

No caso do intervalo que não pode ser considerado infinitesimal, com auxílio de mudança de variável par $\theta = \pi x/L$, tem-se

$$P = \int_0^{L/4} \psi^2(x)dx$$

$$= \int_0^{L/4} \frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi x}{L}dx = \frac{2}{L}\int_0^{\pi/4}\sin^2\theta d\theta = \frac{2}{\pi}\left(\frac{\pi}{8} - \frac{1}{4}\right) = 0,091.$$

Quantização da energia no átomo de hidrogênio

Elétron ligado a um próton através de força relacionada como o inverso do quadrado da distância entre eles. A energia pode ser igualada a zero quando o elétron estiver a distância infinita do próton. Assim, para distâncias finitas a energia é negativa. As energias também são descritas por número quântico n, da seguinte forma: