Quantização da energia e dualidade onda-partícula

Flaviano Williams Fernandes

Instituto Federal do Paraná
Campus Irati

24 de Junho de 2022

Sumário

A antiga teoria quântica

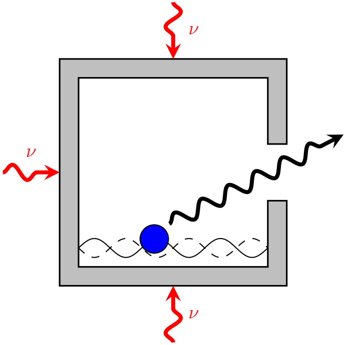
- ✓ *Numa reunião da sociedade alemã de física em 1900, Max Planck apresentou o seu artigo "Sobre a teoria da lei de distribuição de energia do espectro normal". Esse dia marca o nascimento da física quântica.*
- ✓ *Até o surgimento da equação de Schroedinger, diversos estudos foram desenvolvidos demonstrando falhas na física clássica. Esses estudos, chamados de antiga teoria quântica, marcam os fundamentos da física quântica atual.*
- ✓ *Assim como a teoria da relatividade, a física quântica representa uma generalização da física clássica, que inclui as leis clássicas como casos especiais.*

Corollary

Os fenômenos ligados a física quântica abrangem todas as áreas da física clássica: mecânica, termodinâmica, ondas, mecânica estatística e eletromagnetismo.

O que é um corpo negro?

O corpo negro é um objeto que absorve toda a radiação que incide sobre ele. Sabendo que a radiação transporta energia por área e tempo, é de se esperar que os elétrons do material absorva a radiação, adquirindo energia cinética e aumentando assim a temperatura do objeto. Pela teoria do eletromagnetismo, cargas em movimento emitem radiação com a mesma frequência que elas oscilam. Portanto, a radiação observada poderá ser reconhecida como aquela emitida pelo corpo negro que se encontra a temperatura T.



Radiação emitida pelo corpo negro.

Lei de Stefan-Boltzman

- ✓ *A radiação (intensidade) incidente aumenta a vibração dos átomos, aumentando a temperatura do corpo negro;*
- ✓ *A radiação emitida somente depende da temperatura do corpo negro;*
- ✓ *De acordo com a teoria clássica, a radiação aumenta indefinidamente com a frequência da radiação emitida.*

Chegando a lei de Stefan-Boltzman que relaciona a radiação emitida por um objeto com a sua temperatura T,

$$R(T) = \sigma T^4.$$

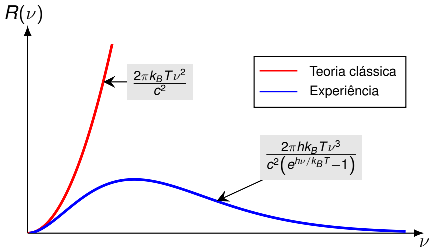
onde $\sigma = 5{,}6704 \times 10^{-8}\,\mathrm{W\,m^{-2}\,K}$ *Utilize a animação para ver como a área abaixo da curva da densidade de radiação aumenta com a temperatura.*

Catástrofe do ultravioleta

A catástrofe do ultravioleta representa a enorme discrepância entre a teoria clássica e os resultados experimentais, medidas para a radiação do corpo negro. Resumindo

- ✓ *Para baixas frequências a teoria clássica se aproxima do resultado experimental;*
- ✓ *Para frequências maiores, a teoria clássica se afasta do resultado experimental.*

Utilize a animação para ver o máximo de radiância atingida e também o seu valor tendendo a zero para comprimentos de onda maiores.



Comparação entre radiância calculada pela teoria clássica e os dados experimentais.

Radiância e radiação emitida pelo material

Pela teoria do eletromagnetismo, a radiância, ou seja, radiação emitida por cada onda de frequência ν ($R(\nu)$), que sai da cavidade de um corpo negro é dado por

$$R(\nu) = \frac{c}{4}u(\nu),$$

onde $u(\nu)$ é a energia armazenada na cavidade por volume. Neste caso, a quantidade de energia na faixa de radiação com frequências entre ν e $\nu + d\nu$ vale $u(\nu)d\nu$. Portanto, a quantidade de radiação dR emitida neste intervalo vale

$$dR = R(\nu)d\nu = \frac{c}{4}u(\nu)d\nu.$$

Para determinar a radiação total emitida pelo corpo negro, integramos a equação acima (o que deve estar condizente com a lei de Stefan-Boltzman),

$$R = \frac{c}{4}\int_0^\infty u(\nu)d\nu.$$

Relação entre energia e temperatura

Pela termodinâmica, a energia de agitação dos elétrons por volume está associado estatisticamente com o valor médio da energia E multiplicado pelo número de cargas elétricas oscilantes,

$$u(\nu) = \langle E \rangle \, n(\nu),$$

No caso acima, podemos dizer que cada elétron ao oscilar emite uma onda eletromagnética de frequência ν. Essa onda eletromagnética confinada em uma cavidade se comporta como uma onda estacionária contendo um modo normal de vibração específico. Portanto, a onda eletromagnética produzida pelas cargas oscilantes podem escapar da cavidade, sendo em seguida captada pelo sensor como a radiância $R(\nu)$. É possível mostrar que a quantidade de modos de vibração por volume e por frequência é dado por (veja o apêndice D)

$$\boxed{n(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}.}$$

Valor médio da energia para uma distribuição contínua de energia

Para determinar o valor médio da energia $\langle E \rangle$, usamos a expressão abaixo

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty E f(E) dE}{\int_0^\infty f(E)},$$
$$f(E) = A e^{-E/k_B T}.$$

onde $f(E)$ é conhecida como distribuição de Boltzmann e k_B é chamado constante de Boltzmann. Substituindo na expressão teremos

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty \cancel{A} E e^{-E/k_B T} dE}{\int_0^\infty \cancel{A} e^{-E/k_B T} dE},$$
$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty E e^{-E/k_B T} dE}{\int_0^\infty e^{-E/k_B T} dE}.$$

É possível provar que o resultado da equação acima equivale a

$$\boxed{\langle E \rangle = k_B T.}$$

A equação de Rayleigh-Jeans

Considerando uma distribuição contínua de energia para a radiação emitida pelo corpo negro, teremos que a densidade de energia $u(\nu)$ é dado por

$$u(\nu) = \langle E \rangle \, n(\nu);$$
$$u(\nu) = (k_B T) \left(\frac{8\pi\nu^2}{c^3} \right).$$

Substituindo na fórmula da radiação,

$$R = \frac{c}{4} \int_0^\infty u(\nu) d\nu.$$

$$R = \frac{\cancel{c}}{4} \int_0^\infty \frac{8\pi k_B T}{\cancel{c}^3} \nu^2 d\nu,$$
$$R = \frac{8\pi k_B T}{c^2} \int_0^\infty \nu^2 d\nu,$$
$$R = \frac{8\pi k_B T}{3c^2} \nu^3 \Big|_0^\infty = \infty.$$

Vemos que se considerarmos uma distribuição contínua de energia para $u(\nu)$, quando $\nu \to \infty$ teremos $R \to \infty$, o que resulta na catástrofe do ultravioleta.

A lei de Planck e o nascimento da física quântica

Para explicar a catástrofe do ultravioleta, duas causas são possíveis

✓ *Contagem errada do número de estados* $n(\nu)$*;*

✓ *Valor da energia para cada modo vibracional está errado.*

Hipótese de Planck

Como opção, Planck sugeriu que a energia das cargas oscilantes, e consequentemente a radiância emitida por ela, ao invés de assumir qualquer valor, ela deverá ter valores discretos bem definidos, e deve também ser proporcional a frequência da radiação emitida,

$$E_n = nh\nu, \;\; n = 0, 1, 2, \cdots$$

h é conhecido como a constante de Planck.

Valor médio da energia para uma distribuição discreta de energia

O valor médio da energia $\langle E \rangle$ para uma distrição discreta de energias é dado por

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E\left(\cancel{A}e^{-E/k_B T}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty}\left(\cancel{A}e^{-E/k_B T}\right)},$$

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E e^{-E/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E/k_B T}}.$$

Como temos valores discretos de energia, a integral é substituída por uma somatória de valores de energia E_n. É possível provar que o resultado equivale a

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}.}$$

Substituindo em $u(\nu)$ teremos

$$\boxed{u(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3\left(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1\right)}.}$$

O resultado acima em $R(\nu)$ reproduz perfeitamente os dados experimentais.

Lei de Planck para baixas frequências

Pela teoria clássica temos que a teoria se aproxima do resultado experimental quando $\nu << 1$, usando a expansão

$$e^{\frac{h\nu}{k_B T}} = 1 + \frac{h\nu}{k_B T} + \frac{1}{2}\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)^2 + \cdots,$$

podemos dizer que $e^{\frac{h\nu}{k_B T}} \approx 1$ se $h\nu << k_B T$. Substituindo em $u(\nu)$ resulta em

$$u(\nu) \approx \frac{8\pi \cancel{h}\nu^{\cancel{3}} T}{c^3\left(\cancel{1} + \frac{\cancel{h}\cancel{\nu}}{k_B \cancel{T}} - \cancel{1}\right)},$$

$$u(\nu) \approx \frac{8\pi k_B T \nu^2}{c^3},$$

o que corresponde a lei de Rayleigh-Jeans da teoria clássica da radiação.

Corollary

Para $h\nu/k_B T << 1$ a equação de Planck se resume na lei de Rayleigh-Jeans.

Lei de Planck para frequências elevadas

Considerando a emissão de radiação de altas frequências, onde $h\nu \gg kT$. Isso faz com que $e^{\frac{h\nu}{k_B T}} \gg 1$, portanto podemos dezprezar o valor 1 do denominador de $u(\nu)$. Temos assim

$$u(\nu) \approx \frac{8\pi h\nu^3}{c^3 e^{\frac{h\nu}{k_B T}}} \Rightarrow \left(\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right) e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}.$$

Pela definição de radiância, onde $R(\nu) = cu(\nu)/4$ temos

$$R(\nu) = \frac{2\pi\nu^3}{c^2} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}.$$

Sabendo que $e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} \to 0$ para $h\nu \gg kT$, podemos dizer que $R(\nu \to \infty) \to 0$, concordando com o resultado experimental.

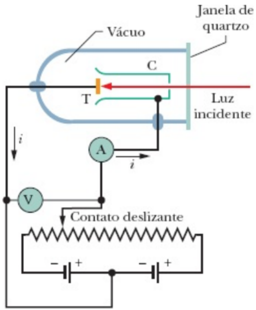
Corollary

Para $h\nu/k_B T \gg 1$ a equação de Planck se resume ao limite de Wien, onde $R(\nu \to \infty) \to 0$.

Efeito fotoelétrico

Vamos considerar um equipamento por onde incide uma luz de determinada frequência no alvo T de um metal específico. A experiência mostra que os elétrons são ejetados do material gerando uma corrente i que pode ser registrada pelo amperímetro A.

Uma diferença de potencial V é ajustada entre os terminais do aparelho com a intenção de frear os elétrons até pararem, registrando assim uma corrente zero no amperímetro. Dessa maneira, a energia cinética máxima K deve ser igual a eV_F.



Montagem usada para o estudo do efeito fotoelétrico.

O que era esperado pela teoria clássica

De acordo com a teoria do eletromagnetismo, a intensidade da onda I eletromagnética é dado por $I = \frac{E_m^2}{2\mu_0 c}$, ou seja, depende somente da amplitude do campo elétrico E_m e não da frequência da luz. Além do mais, como a intensidade é potência por área, era de se esperar que o metal absorvesse cada vez ao longo do tempo. Assim o elétron teria energia cinética o suficiente para escapar do material. Portanto, era de se esperar que

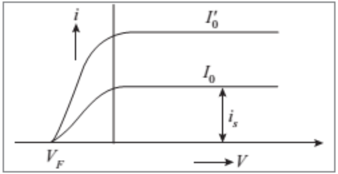
- ✓ *a energia cinética dos elétrons deveria depender da intensidade da onda;*
- ✓ *o efeito fotoelétrico deveria ocorrer com a luz de qualquer frequência;*
- ✓ *deveria haver um retardo de tempo, de modo que o elétron absorvesse energia do feixe continuamente.*

O que foi observado experimentalmente

Foi observado que a energia cinética K, onde

$$K = eV_F,$$

independe da luz incidente. Aumentando a intensidade, apenas aumenta a corrente no circuito, mas o potencial de corte V_F permanece o mesmo.



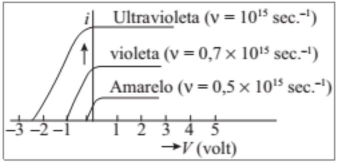
Variação da corrente com o potencial.

Corollary

O efeito fotoelétrico independe da intensidade da luz incidente.

O que foi observado experimentalmente

Foi observado que para cada material existe um limiar de frequência ν_0. Caso a frequência da luz incidente for menor que ν_0, o efeito fotoelétrico não ocorre para aquele material. A figura apresenta um metal alcalino, onde para cada luz incidente, existe um potencial de corte. Nesse caso, o efeito fotoelétrico deixaria de ocorrer para a luz vermelha, que possui frequência menor que a amarela ($\nu_{verm} = 0{,}4 \times 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$).



Variação da corrente para diversos valores da frequência da luz.

Corollary

Para frequências menores que ν_0 o efeito fotoelétrico não ocorre, qualquer que seja a intensidade da iluminação.

Hipótese de Einstein

Para explicar as divergências observadas no efeito fotoelétrico, Einstein propôs que a luz é constituídas por pacotes de energia chamada fóton, onde cada fóton carrega a quantidade de energia

$$\boxed{E = h\nu.}$$

Assim, a energia cinética K dos elétrons que saem do material é dado por

$$K = eV_F = h\nu - \phi.$$

ϕ é denominado função trabalho, que representa a energia necessária para remover o elétron do material.

Explicações plausíveis para o efeito fotoelétrico

- ✓ *O efeito fotoelétrico independe da intensidade da luz incidente.* Um aumento na intensidade significa mais fótons com a mesma energia $h\nu$ colidindo com elétrons diferentes, o que justifica o aumento na corrente elétrica. Mas se a energia de cada fóton não equivaler a função trabalho, os elétrons não conseguem escapar do material independente da quantidade fótons.
- ✓ *Para frequências menores que ν_0 o efeito fotoelétrico não ocorre, qualquer que seja a intensidade da iluminação.* Na colisão dos fótons com os elétrons, uma energia equivalente a $h\nu$ é absorvida pelo elétron. Se essa energia não equivaler a função trabalho, o elétron não consegue escapar do material.
- ✓ *Assim que a luz incide no metal, os elétrons são imediatamente removidos, não havendo um retardo de tempo.* Na colisão, a energia dos fótons é imediatamente absorvida, não havendo a necessidade de mais colisões.

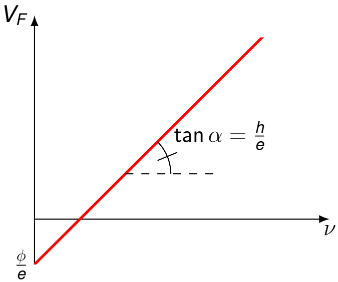
Como obter a constante de Planck e o limiar de frequência?

Isolando o potencial de corte V_F anteriormente teremos

$$eV_F = h\nu - \phi,$$
$$V_F = \frac{h}{e}\nu - \frac{\phi}{e}.$$

Considerando V_F como função da frequência da luz incidente, podemos representá-la em um gráfico V_F versus ν, onde o coeficiente angular da reta representa o valor da constante de Planck,

$$\boxed{h = 6{,}57 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}.}$$

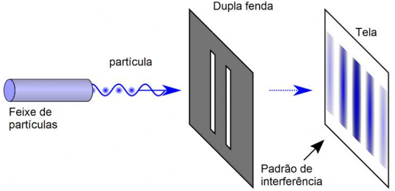


Representação de h a partir do gráfico potencial de corte versus frequência.

Hipótese de de Broglie

Devido a simetria da natureza, o dualismo onda-partícula é um fenômeno absolutamente geral, ou seja, assim como foi observado que a luz possui comportamento corpuscular, é esperado que a partícula também possua comportamento ondulatório. De forma geral, podemos resumir

$$\nu = \frac{E}{h},$$
$$\lambda = \frac{h}{p}.$$



Fenômeno de interferência ondulatória envolvendo um feixe de elétrons.

Apêndice A - Observações[1]

Esta apresentação está disponível para download no endereço
https://flavianowilliams.github.io/education

[1] Este material está sujeito a modificações. Recomenda-se acompanhamento permanente.

Apêndice B - Demonstração do valor kT para a energia média

Considere a energia média $\langle E\rangle$ onde definimos $\beta = 1/kT$,

$$\langle E\rangle = \frac{\int_0^\infty Ee^{-\beta E}dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E}dE}$$

Podemos ver que $-\frac{d}{d\beta}e^{-\beta E} = Ee^{-\beta E}$,

$$\langle E\rangle = \frac{\int_0^\infty \left(-\frac{d}{d\beta}e^{-\beta E}\right)dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E}dE}$$

$$\langle E\rangle = \frac{-\frac{d}{d\beta}\left(\int_0^\infty e^{-\beta E}dE\right)}{\int_0^\infty e^{-\beta E}dE}.$$

Definindo $F(\beta) = \int_0^\infty e^{-\beta E}dE$ teremos

$$\langle E\rangle = -\frac{\frac{dF(\beta)}{d\beta}}{F(\beta)},$$

Assim poderemos obter $\langle E\rangle$ sem a necessidade de resolver a integral.

Apêndice B - Demonstração do valor kT para a energia média

Pela propriedade do logaritmo e empregando a regra da cadeia, temos que a sua derivada é dada por

$$\frac{d\ln\left[1/F(\beta)\right]}{d\beta} = \left(\frac{d\ln(1/F)}{dF}\right)\left(\frac{dF}{d\beta}\right)$$

Porém, sabemos que $\frac{d\ln F}{dF} = 1/F$, portanto

$$\frac{d\ln\left[F(\beta)\right]}{d\beta} = \left(\frac{1}{F}\right)\left(\frac{dF}{d\beta}\right)$$

Assim podemos ver que

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= -\frac{d}{d\beta}\ln[F(\beta)],\\ &= -\frac{d}{d\beta}\ln\left(\int_0^\infty e^{-\beta E}dE\right).\end{aligned}$$

Resolvendo a integral teremos

$$\langle E\rangle = \frac{d\ln(\beta)}{d\beta} = 1/\beta,$$

$$\boxed{\langle E\rangle = kT.}$$

Apêndice C - Demonstração do valor médio da energia segundo Planck

Segundo Planck, para o cálculo da energia média, devemos adotar a somatória ao invés de uma integral, assim

$$\langle E\rangle = -\frac{d}{d\beta}\ln\left(\sum e^{-\beta E}\right),$$

Levando em consideração que

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E} = \frac{1}{e^{\beta E}-1}$$

teremos

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \frac{d}{d\beta}\ln\left(e^{\beta E}-1\right),\\ &= \frac{d}{dx}\ln x\left(\frac{dx}{d\beta}\right),\\ &= \frac{E}{e^{\beta E}-1}.\end{aligned}$$

Definindo $E = h\nu$ e $\beta = 1/k_B T$ teremos

$$\boxed{\langle E\rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T}-1}}$$

Apêndice D - Contagem dos modos normais de vibração em uma cavidade

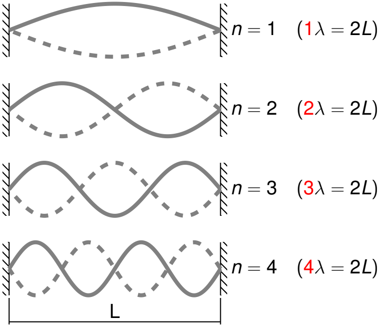
Considere ondas eletromagnéticas polarizadas e confinadas em uma cavidade de comprimento L. Uma onda confinada apresenta o comportamento de ondas estacionárias de função

$$E(x,t) = E_m \sin(kx)\sin(\omega t),$$

onde temos

$$\nu = \frac{nc}{2L},$$

e n representa os modos normais de vibração.



Modos normais de vibração.

Apêndice D - Contagem dos modos normais de vibração em uma cavidade

Para uma cavidade cúbica devemos considerar modos normais de vibração nas direções x, y e z, e os valores possíveis para n podem ser representados em um gráfico como mostra a figura ao lado. Assim, para um dado valor n poderemos ter N modos de vibração diferentes, ou seja,

$$N(n) = \frac{4\pi n^2}{8},$$

onde n é um número inteiro positivo e

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2.$$

conteúdo...

Apêndice D - Contagem dos modos normais de vibração em uma cavidade

Sabendo que

$$n = \frac{2L}{c}\nu,$$
$$\Delta n = \frac{2L}{c}\Delta\nu.$$

podemos dizer que a cada intervalo de frequência $\Delta\nu$ teremos a seguinte quantidade de modos normais

$$N(\nu)\Delta\nu = \left(\frac{\pi}{2}\right)\left(\frac{2L\nu}{c}\right)^2\left(\frac{2L\Delta\nu}{c}\right).$$

$$N(\nu)\Delta\nu = \frac{4\pi L^3\nu^2}{c^3}\Delta\nu.$$

Esse valor representa a quantidade de modos de vibração em um intervalo $\Delta\nu$, para saber a quantidade por volume devemos dividir por L^3, e considerando o caso mais geral de uma onda não-polarizada devemos multiplicar por 2,

$$\boxed{n(\nu)\Delta\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\Delta\nu.}$$

Apêndice E - A hipótese de Planck e a lei de Stefan-Boltzman

Utilizando a expansão em série da função $1/(e^x + 1)$ teremos

$$\frac{1}{\left(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1\right)} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}$$

Substituindo na fórmula de $u(\nu)$ segundo Planck teremos

$$R = \frac{c}{4}\int_0^{\infty} u(\nu) d\nu.$$

$$R = \frac{2\pi h}{c^2}\int_0^{\infty} \nu^3 \sum e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}} d\nu,$$

$$R = \frac{2\pi h}{c^2}\sum \int_0^{\infty} \nu^3 e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}} d\nu.$$

Resolvendo a integral através do método de integração por partes chegamos a

$$R = \left(\frac{12\pi k_B^4}{c^2 h^3}\sum 1/n^4\right) T^4,$$

$$R = \sigma T^4.$$

Referências

- D. Halliday, R. Resnick, J. Walker, Fundamentos de física. Eletromagnetismo, v.4, 10. ed., Rio de Janeiro, LTC (2016)
- R. D. Knight, Física: Uma abordagem estratégica, v.3, 2nd ed., Porto Alegre, Bookman (2009)
- H. M. Nussenzveig, Curso de física básica. Eletromagnetismo, v.4, 5. ed., São Paulo, Blucher (2014)