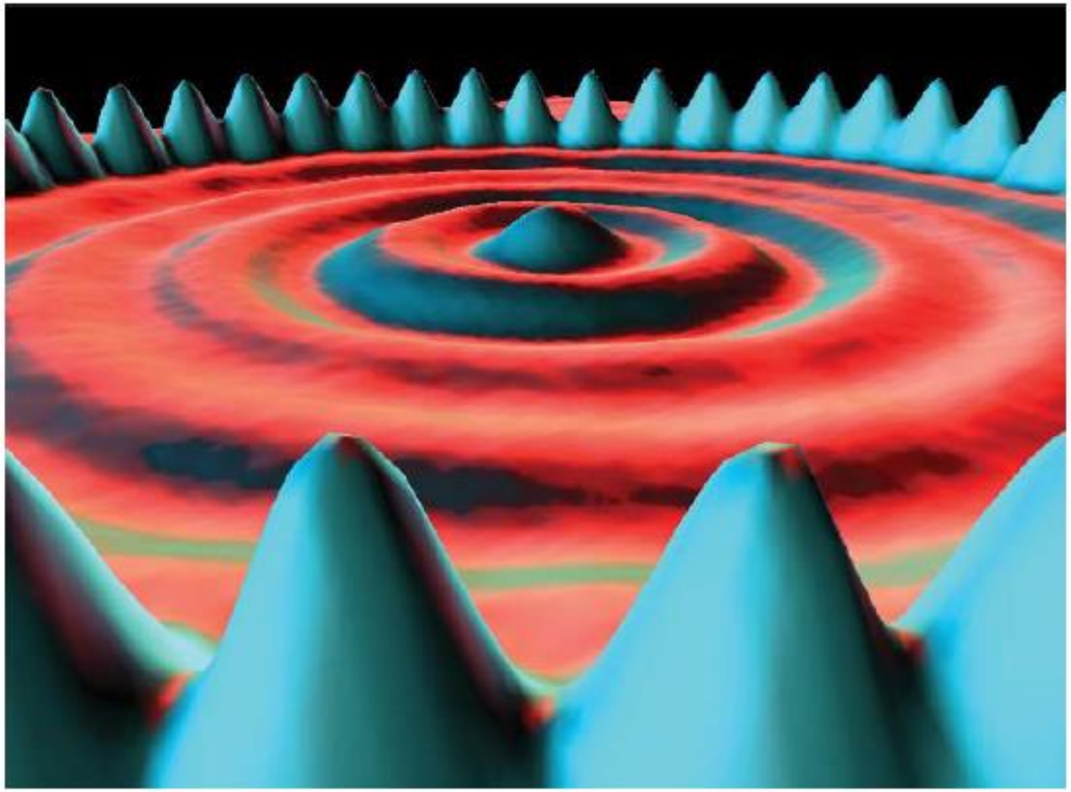
Capítulo 39 – Fótons e Ondas de Matéria



Quando esta imagem de um microscópio de tunelamento foi publicada por pesquisadores da IBM, muitos cientistas e engenheiros ficaram boquiabertos. A imagem mostra *48* átomos de ferro que os pesquisadores “arrastaram” para formar uma circunferência de *14 nm* de diâmetro em uma superfície de cobre especialmente preparada. Esse tipo de arranjo é conhecido como **curral quântico** porque, da mesma forma como um curral de uma fazenda mantém o gado preso, a barreira de átomos de ferro mantém alguma coisa presa. As ondulações ajudam a identificar o que está preso no interior do curral quântico.

O que são as ondulações no interior do curral quântico?

39.1 Mais Ondas de Matéria

- ❖ A premissa básica da Física Quântica é que os elétrons, os prótons e todas as outras partículas que possuem massa se comportam como ondas de matéria que obedecem à equação de Schrödinger.

39.2 Ondas em Cordas e Ondas de Matéria

- ❖ **Princípio de Confinamento:** O confinamento de uma onda em uma região leva à quantização, ou seja, à existência de estados discretos com energias discretas para a onda, cada um com uma frequência f bem definida. A onda pode ter apenas essas energias.

- ❖ Essa observação se aplica a todos os tipos de onda, incluindo as ondas de matéria.

- ❖ No caso das ondas de matéria é mais conveniente lidar com a energia E da partícula associada do que com a frequência f da onda.

39.3 Energia de um Elétron Confinado

Armadilhas Unidimensionais

Vamos examinar a onda de matéria associada a um elétron não-relativístico confinado a uma certa região do espaço. Para isso, podemos usar uma analogia com ondas estacionárias em uma corda de comprimento finito, estendida ao longo do eixo x e presa rigidamente pelas duas extremidades. Como os suportes são rígidos, as extremidades da corda são os nós, pontos em que a corda se mantém imóvel.

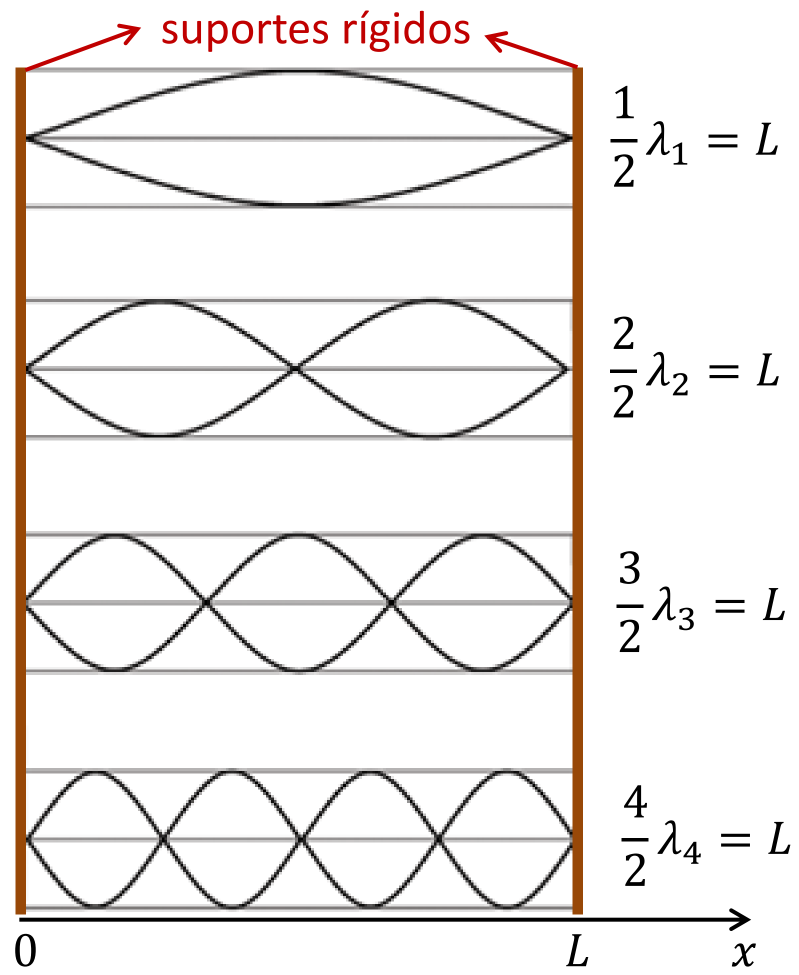
Os estados ou modos permitidos de oscilação da corda são aqueles para os quais o comprimento L da corda satisfaz à seguinte equação:

$$L = \frac{n}{2}\lambda_n, n = 1, 2, 3, \ldots$$

Cada valor de n identifica um estado diferente de oscilação da corda; na linguagem da física quântica, o número n é um **número quântico**.

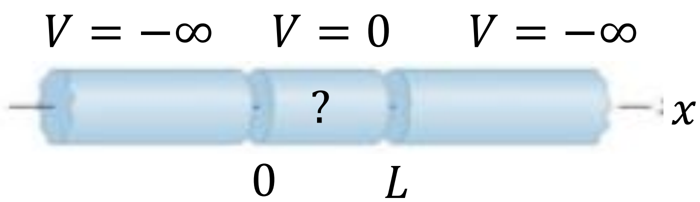
Para cada estado permitido pela equação acima, o deslocamento transversal em um ponto x da corda é dado por

$$y_n(x) = A(t)\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), n = 1, 2, 3, \ldots$$

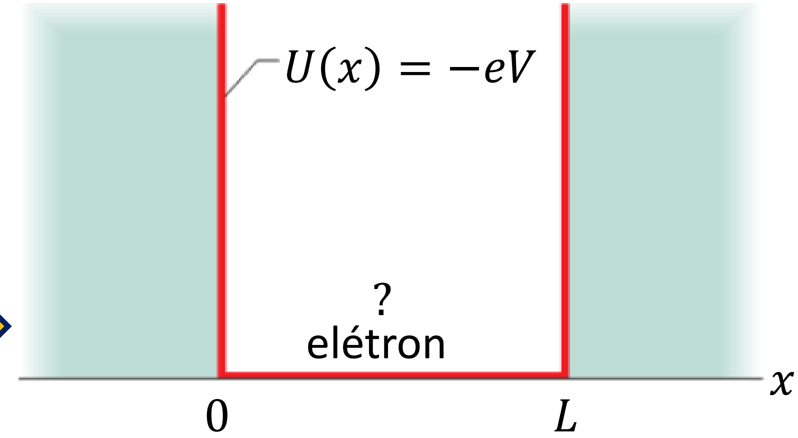


Voltando para Ondas de Matéria...

Elétron confinado entre $0 < x < L$



Elementos de uma armadilha idealizada que confina o elétron ao cilindro central. Os cilindros das extremidades são mantidos a um potencial negativo infinito e o cilindro central a um potencial nulo.



Energia potencial elétrica $U(x)$ de um elétron confinado no cilindro central da armadilha da figura ao lado. O potencial associado a essa armadilha é chamado de **poço de energia potencial infinitamente profundo**.

Cálculo das Energias Quantizadas

No caso de um elétron no interior do cilindro central da figura acima, como $U = 0$, a energia mecânica total $E(= K + U = K + 0)$ é igual à energia cinética. Dessa forma, o comprimento de onda λ de de Broglie do elétron é dada por

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \Rightarrow \lambda^2 = \frac{h^2}{2mE} \Rightarrow E \equiv E_n = \frac{h^2}{2m\lambda^2}, n = 1, 2, 3, \ldots$$

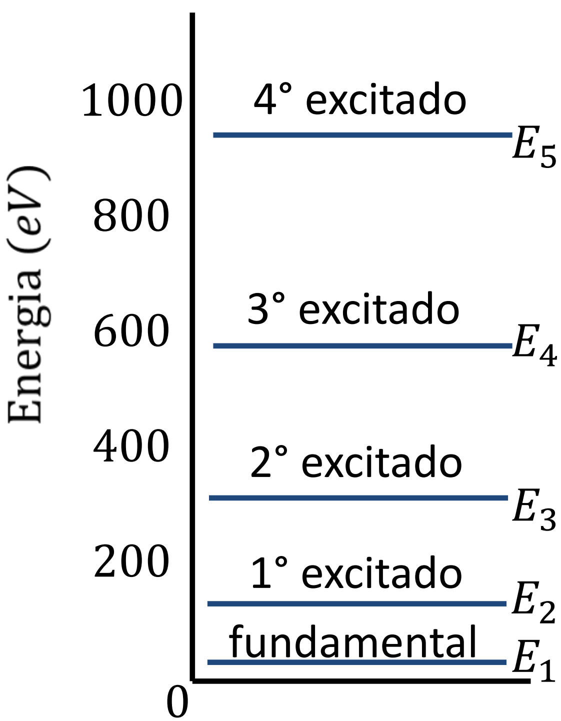
Mas $\lambda_n = \dfrac{2L}{n} \Rightarrow E_n = \dfrac{h^2}{2m\left(\frac{2L}{n}\right)^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \dfrac{h^2 n^2}{8mL^2}, n = 1, 2, 3, \ldots}$

número quântico

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}, n = 1, 2, 3, \ldots$$

A figura abaixo mostra os cinco primeiros valores de energia permitidos para um elétron no interior de um "poço infinito" com $L = 100\ pm$ (dimensão de um átomo típico).

Diagrama de Níveis de Energia



$$E_5 = \frac{h^2 5^2}{8mL^2} = \frac{25h^2}{8mL^2} \text{ (4º estado excitado)}$$

$$E_4 = \frac{h^2 4^2}{8mL^2} = \frac{16h^2}{8mL^2} \text{ (3º estado excitado)}$$

$$E_3 = \frac{h^2 3^2}{8mL^2} = \frac{9h^2}{8mL^2} \text{ (2º estado excitado)}$$

$$E_2 = \frac{h^2 2^2}{8mL^2} = \frac{4h^2}{8mL^2} \text{ (1º estado excitado)}$$

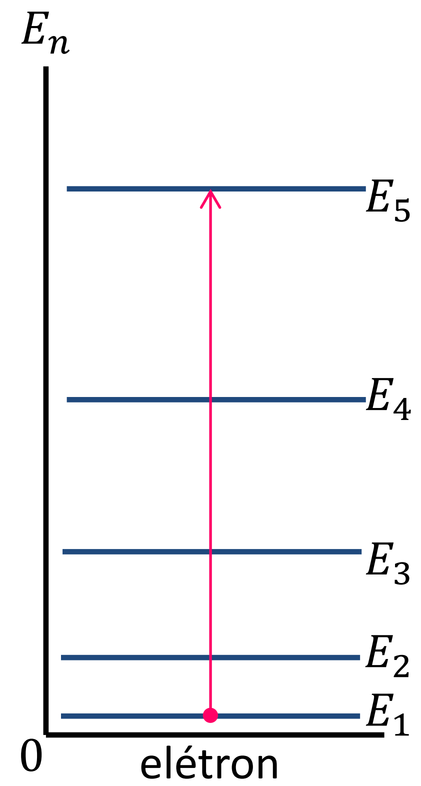
$$E_1 = \frac{h^2 1^2}{8mL^2} = \frac{1h^2}{8mL^2} \text{ (estado fundamental)}$$

Mudanças de Energia

Seja E_{baixa} a energia inicial do elétron e E_{alta} a energia de um dos estados excitados de um elétron que se encontra dentro de um "poço infinito". Nesse caso, a quantidade de energia que deve ser fornecida ao elétron para que mude de estado é dada por

$$\Delta E = E_{alta} - E_{baixa}.$$

Quando um elétron recebe essa energia dizemos que executou um **salto quântico**, sofreu uma **transição** ou foi **excitado** de um estado de menor energia para um estado de maior energia.

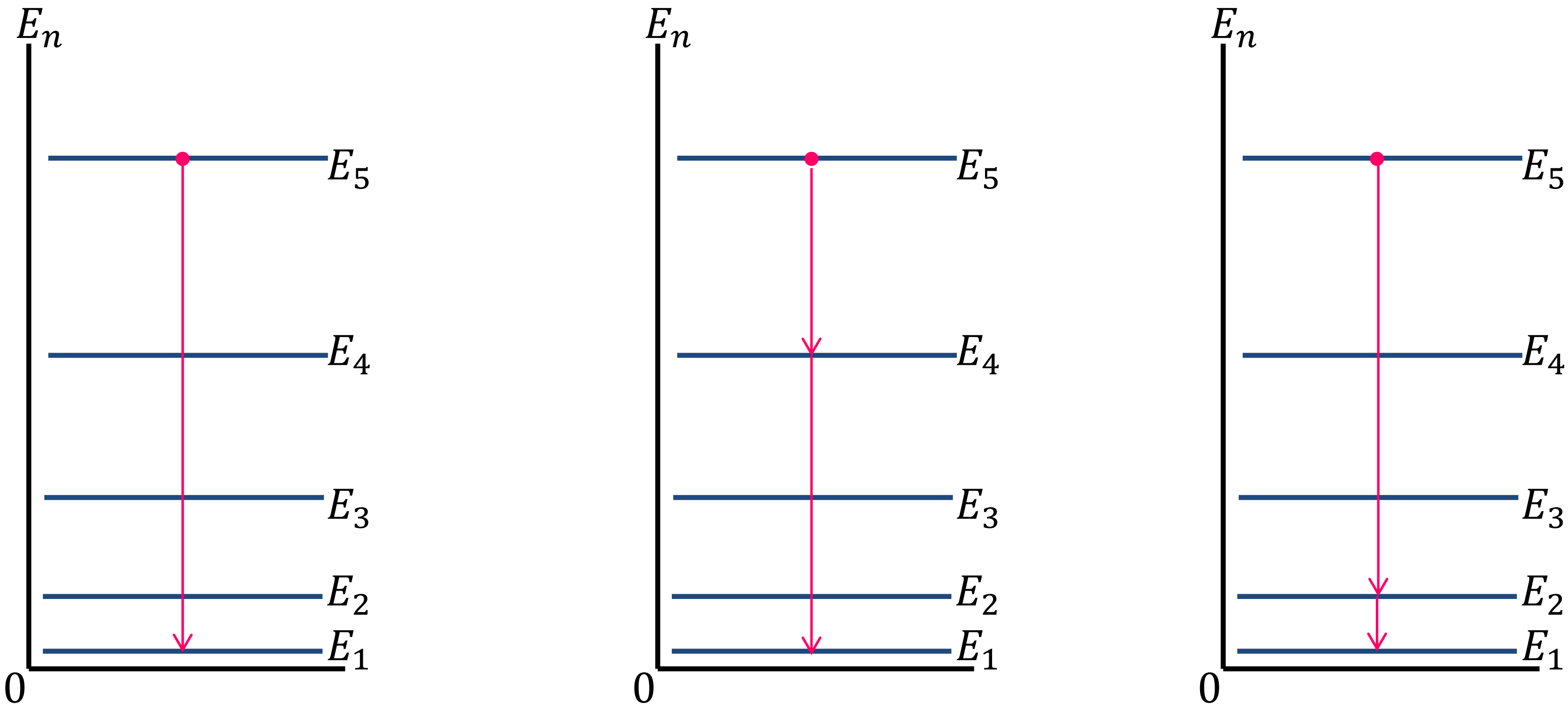


Um das formas de um elétron ganhar energia suficiente para executar um salto quântico é absorver um fóton.

- ❖ Para que um elétron confinado absorva um fóton é preciso que a energia hf do fóton seja igual à diferença de energia ΔE entre a energia do estado inicial do elétron e a energia de outro estado permitido. Em outras palavras, a excitação por absorção de luz só é possível se

$$hf = \Delta E = E_{alta} - E_{baixa}.$$

Quando passa para um estado excitado, o elétron não permanece indefinidamente no novo estado, mas logo decai para estados de menor energia. As figuras abaixo mostram algumas das possibilidades de decaimento de um elétron que se encontra no quarto estado excitado.



- ❖ Para que um elétron confinado emita um fóton é preciso que a energia hf do fóton seja igual à diferença de energia ΔE entre a energia do estado inicial do elétron e a energia de outro estado permitido.

39.4 Funções de Onda de um Elétron Confinado

Resolvendo a equação de Schrödinger para um elétron confinado em um poço de potencial unidimensional infinito de largura L, descobrimos que as funções de onda do elétron são dadas

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), n = 1, 2, 3, \ldots, & \mathrm{se}\ 0 \le x \le L. \\ 0, & \mathrm{se}\ x \le 0\ \mathrm{ou}\ x \ge L. \end{cases}$$

- Observe que as funções de onda $\psi_n(x)$ têm a mesma forma que as funções de deslocamento $y_n(x)$ para uma onda estacionária em uma corda presa pelas extremidades.

Probabilidade de Detecção

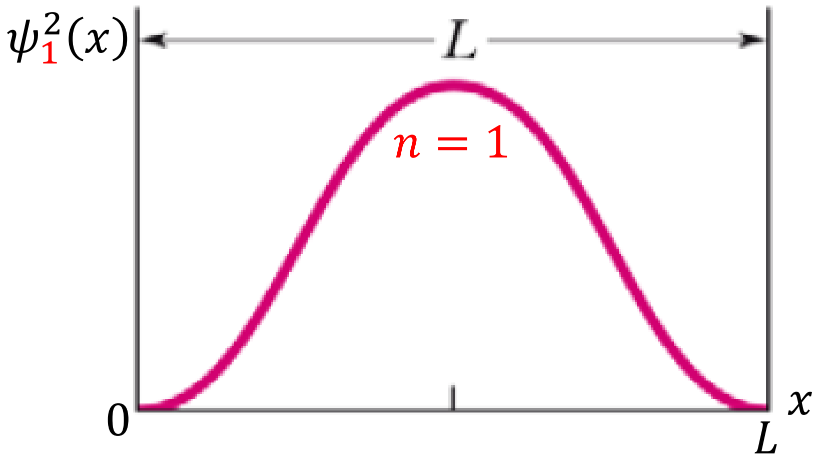
A **densidade de probabilidade** $p_n(x)$ de que um elétron seja detectado em um ponto x no interior do poço é dada por

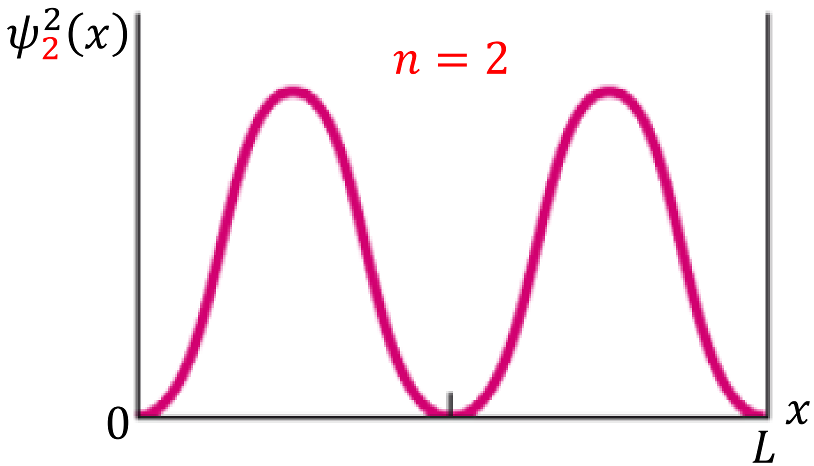
$$p_n(x) = |\psi_n^2(x)| = \psi_n^2(x) = A^2\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \mathrm{para}\ n = 1, 2, 3, \ldots$$

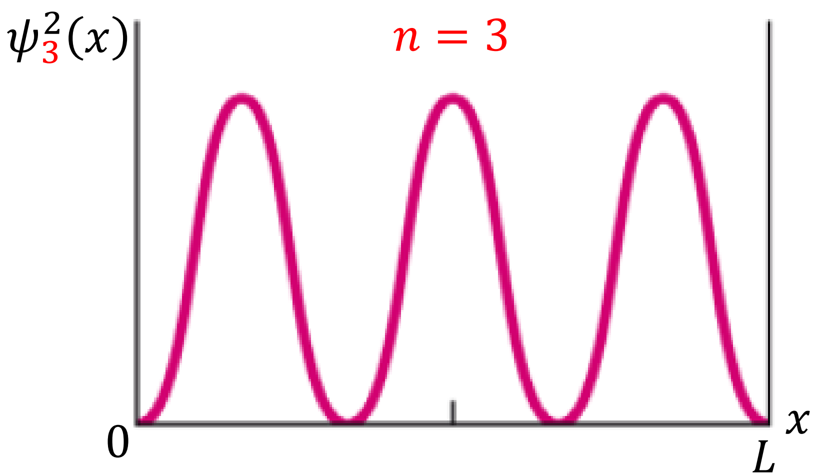
A **probabilidade** $P(x_1 < x < x_2)$ de que um elétron confinado em um poço de potencial unidimensional infinito seja detectado entre os pontos x_1 e x_2 no interior do poço é dada por

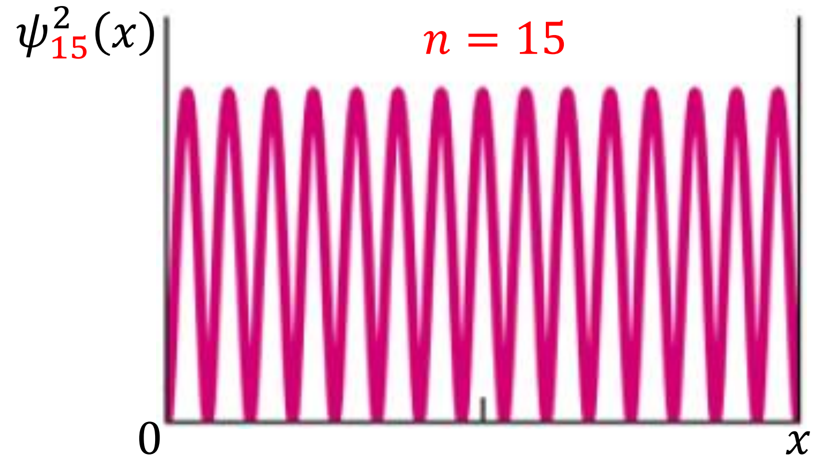
$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} p_n(x)dx = A^2 \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx$$

$$P(x_1 < x < x_2) = \frac{A^2}{4\pi n}\left\{2\pi n(x_2 - x_1) + L\left[\mathrm{sen}\left(\frac{2n\pi}{L}x_1\right) - \mathrm{sen}\left(\frac{2n\pi}{L}x_2\right)\right]\right\}$$









Se a Física Clássica pudesse ser aplicada a um elétron, a probabilidade de encontrar o elétron seria a mesma em todos os pontos no interior do poço de potencial!

O caso de $n = 15$ sugere que que à medida que n aumenta, a probabilidade de detecção se torna cada vez mais uniforme no interior do poço. Este é um exemplo de um princípio geral conhecido como **Princípio da Correspondência:**

- Para grandes valores dos números quânticos, os resultados da Física Quântica tendem para os resultados da Física Clássica.

Normalização

O produto $|\psi_n^2(x)|dx$ corresponde à probabilidade de que o elétron confinado em um poço unidimensional infinito seja detectado no intervalo do eixo x entre x e $x + dx$. Como sabemos que o elétron se encontra em algum ponto do interior do poço de potencial, devemos ter

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(x)dx = 100\% = 1 \Rightarrow A^2 \underbrace{\int_0^L \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx}_{=\frac{L}{2}} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), n = 1, 2, 3, \dots, & \text{se } 0 \leq x \leq L. \\ 0, & \text{se } x \leq 0 \text{ ou } x \geq L. \end{cases}$$

Energia de Ponto Zero

A menor energia possível (energia do estado fundamental) de um elétron em um poço de potencial unidimensional infinito pode ser obtida substituindo $n = 1$ na equação abaixo:

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}, n = 1, 2, 3, \dots \Rightarrow E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \quad \text{(energia de ponto zero)}$$

- Uma das conclusões mais importantes da Física Quântica é a de que em sistemas confinados não podem existir estados de energia zero; deve sempre existir uma energia mínima, conhecida como **energia de ponto zero**.

Exercícios sugeridos das Seções 39.3 e 39.4: 1, 2, 4, 6, 7, 9, 11, 12, 13, 14 e 16.

6) Determine a energia do estado fundamental **(a)** de um elétron e **(b)** de um próton confinado em um poço de potencial infinito unidimensional com $L = 200\ pm$ de largura.

Dicas: $E_n = \dfrac{h^2 n^2}{8mL^2}, n = 1, m_e = 9{,}11 \times 10^{-31} kg; m_p = 1{,}67 \times 10^{-27} kg.$

Respostas: (a) $E_1 = 1{,}51 \times 10^{-18}\ J$. (b) $E_1 = 8{,}225 \times 10^{-22}\ J$.