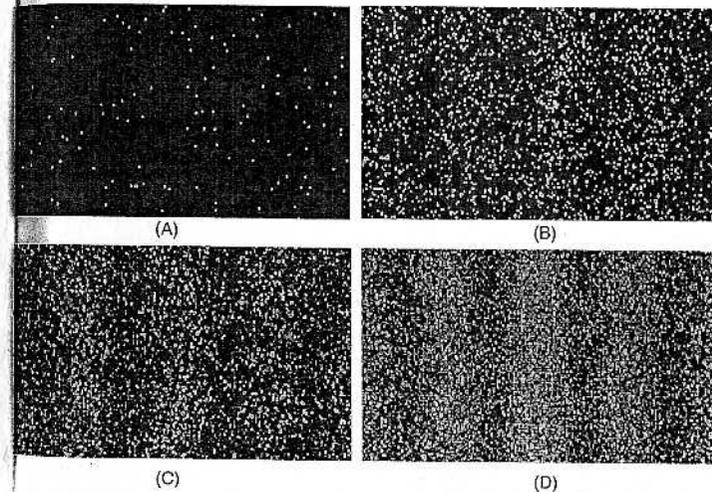


PARTE VI FÍSICA MODERNA: Mecânica Quântica, Relatividade e a Estrutura da Matéria

CAPÍTULO

A Dualidade Onda-Partícula e a Física Quântica

34



FIGURAS DE INTERFERÊNCIA DE ELÉTRONS PRODUZIDOS PELA INCIDÊNCIA DE ELÉTRONS SOBRE UMA BARREIRA QUE CONTÉM DUAS FENDAS: (A) 10 ELÉTRONS, (B) 100 ELÉTRONS, (C) 3000 ELÉTRONS E (D) 70.000 ELÉTRONS. OS MÁXIMOS E MÍNIMOS DEMONSTRAM A NATUREZA ONDULATÓRIA DO ELÉTRON AO ATRAVESSAR AS FENDAS. PONTOS INDIVIDUAIS NA TELA INDICAM A NATUREZA CORPUSCULAR DO ELÉTRON CONFORME TROCA ENERGIA COM O DETECTOR. A FIGURA É A MESMA QUANDO ELÉTRONS OU FÓTONS (PARTÍCULAS DE LUZ) SÃO USADOS.

? Como se pode calcular o comprimento de onda de um elétron? Este procedimento pode ser visto no Exemplo 34-4.

- 34-1 Luz
- 34-2 A Natureza Corpuscular da Luz: Fótons
- 34-3 Quantização da Energia nos Átomos
- 34-4 Elétrons e o Caráter Ondulatório da Matéria
- 34-5 A Interpretação da Função de Onda
- 34-6 Dualidade Onda-Partícula
- 34-7 Partícula em uma Caixa
- 34-8 Valores Esperados
- 34-9 Quantização da Energia em Outros Sistemas

Já foi visto que a propagação de ondas através do espaço é bastante diferente da propagação de partículas. As ondas curvam-se ao redor de obstáculos (difração) e interferem umas nas outras, produzindo figuras de interferência. Uma onda, ao encontrar uma pequena abertura, se espalha ao ultrapassá-la, como se a abertura fosse uma fonte puntiforme. Quando duas ondas de intensidade igual a I_0 , geradas de fontes coerentes, encontram-se no espaço, o resultado pode ser uma onda de intensidade $4I_0$ (interferência construtiva), uma onda de intensidade nula (interferência destrutiva) ou uma onda de intensidade entre zero e $4I_0$, dependendo da diferença de fase entre as ondas nos pontos de encontro.

A propagação de partículas é bastante distinta da propagação de ondas. As partículas se deslocam em linhas retas até colidir com algum obstáculo, e após essa colisão as partículas continuam seguindo trajetórias retas. Se dois feixes de partículas se encontrarem no espaço, eles nunca produzirão figuras de interferência.

Partículas e ondas também trocam energia de maneiras diferentes. As partículas trocam energia em colisões que ocorrem em pontos e instantes específicos. A energia das ondas, por outro lado, se espalha no espaço e é continuamente cedida conforme as frentes de onda interagem com a matéria.

Às vezes a propagação de uma onda não pode ser diferenciada da propagação de um feixe de partículas. Se o comprimento de onda λ for muito pequeno quando comparado aos tamanhos das fendas ou orifícios e dos obstáculos, os efeitos da difração são desprezíveis e a onda se desloca em trajetórias retilíneas. Além disso, os máximos e os mínimos de interferência estão tão próximos no espaço que não podem ser observados. O resultado é que a onda interage com um detector, como um feixe de numerosas pequenas partículas, cada qual trocando uma pequena quantidade de energia. Nessa troca não se pode distinguir partículas de ondas. Por exemplo, uma pessoa não consegue observar as moléculas individuais de ar que colidem com sua face quando o vento sopra sobre ela. Porém, a interação de bilhões de partículas parece ter uma forma contínua, como ocorre em uma onda.

No início do século XX pensava-se que o som, a luz e outras radiações eletromagnéticas, como as ondas de rádio, eram ondas; e que os elétrons, os prótons, os átomos e componentes semelhantes da natureza eram partículas. Nos primeiros 30 anos do século, porém, ocorreram descobertas surpreendentes na física teórica e experimental. Verificou-se que a luz, que se pensava ser uma onda, na realidade trocava energia em pacotes discretos, ou quanta, tal como as partículas. Já os elétrons, que se pensava serem partículas, exibiam efeitos de difração e de interferência conforme se propagavam no espaço, tal como uma onda.

O fato de a luz trocar energia como uma partícula implica que a troca não ocorre de forma contínua, mas de maneira *quantizada*. Analogamente, a natureza ondulatória do elétron, junto com o fato de que a condição de onda estacionária requer um conjunto discreto de frequências, implica que a energia de um elétron em uma região limitada do espaço não seja contínua, mas quantizada, considerando um conjunto discreto de valores.

> Neste capítulo serão discutidas algumas propriedades básicas da luz e dos elétrons, examinando suas características ondulatórias e corpusculares. Em seguida, serão consideradas algumas das propriedades das ondas de matéria, mostrando em particular como as ondas estacionárias levam à quantização de energia. Por fim, serão discutidos alguns aspectos importantes da teoria da física quântica, desenvolvida por volta de 1920, com grande êxito na descrição dos fenômenos da natureza. Atualmente, a física quântica fornece a base de entendimento necessária relativa ao mundo microscópico e ao das temperaturas muito baixas.

34-1 Luz

A questão de saber se a luz consiste em um feixe de partículas ou é o resultado da propagação de ondas em movimento é uma das mais interessantes na história da ciência. Isaac Newton usou uma teoria baseada em partículas de luz, denominada teoria corpuscular da luz, para explicar as leis da reflexão e da refração. Para a refração, porém, Newton precisou admitir que a luz se propagava mais rapidamente na água ou no vidro do que no ar, uma suposição depois constatada não ser verdadeira. Os principais proponentes da teoria ondulatória foram Robert Hooke e Christian Huygens, que explicaram a refração admitindo que a luz se propagava mais lentamente na água ou no vidro do que no ar. Newton rejeitou a teoria ondulatória, pois em sua época acreditava-se que a luz só se propagava em linha reta — o fenômeno da difração ainda não havia sido observado.

Devido à formidável reputação e à grande autoridade de Newton, a teoria corpuscular da luz foi aceita por mais de um século. Em 1801, no entanto, Thomas Young demonstrou a natureza ondulatória da luz em uma famosa experiência, na qual duas fontes coerentes de luz são produzidas por meio da iluminação de um par de fendas paralelas e estreitas usando uma única fonte (Figura 34-1). No Capítulo 33, volume 2, foi visto que quando a luz encontra uma pequena abertura esta age como uma fonte puntiforme de ondas (Figura 33-7). Na experiência de Young, cada fenda age como uma fonte linear, equivalente, em duas dimensões, a uma fonte puntiforme. A figura de interferência é observada em uma tela colocada atrás das fendas. Os máximos de interferência aparecem sob os ângulos que correspondem a diferenças de percurso de números inteiros de comprimentos de onda. Analogamente, os mínimos de interferência ocorrem quando a diferença de percurso for meio comprimento de onda ou qualquer número ímpar de meio comprimento de onda. A Figura 34-1b mostra o padrão de intensidade que aparece na tela. O experimento de Young e muitos outros experimentos realizados demonstraram que a luz se propaga como uma onda.

No início do século XIX, o físico francês Augustin Fresnel (1788–1827) realizou muitas experiências sobre interferência e difração, colocando a teoria ondulatória sobre uma rigorosa base matemática. Fresnel mostrou que a propagação retilínea da luz observada é resultado dos comprimentos de onda muito curtos da luz visível.

A teoria ondulatória clássica da luz chegou ao cume em 1860, quando James Clerk Maxwell publicou a teoria matemática do eletromagnetismo. Esta teoria levava a uma equação de onda que previa a existência de ondas eletromagnéticas que se propagavam com uma velocidade que podia ser calculada pelas leis da eletricidade e do magnetismo. O fato de o resultado desse cálculo ser $c \approx 3 \times 10^8$ m/s, igual à velocidade da luz, sugeriu a Maxwell que a luz era uma onda eletromagnética. A vista humana é sensível a ondas eletromagnéticas com comprimentos de onda no intervalo de aproximadamente 400 nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9}$ m) até 700 nm. Essa gama de valores corresponde à chamada *luz visível*. Outras ondas eletromagnéticas (p. ex., microondas, raios X e ondas de rádio e de televisão) só diferem da luz visível pelo comprimento de onda e pela frequência.

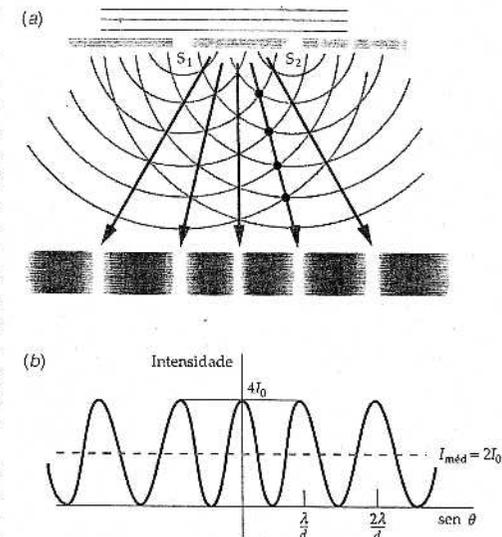


FIGURA 34-1
(a) As duas fendas agem como fontes coerentes de luz para a observação da interferência na experiência de Young. As ondas cilíndricas das fendas se superpõem, provocando a formação de figura de interferência na tela colocada longe das fendas. (b) Gráfico da intensidade produzida na Figura 34-1a. A intensidade é máxima nos pontos onde a diferença de percurso é um número inteiro de comprimentos de onda. A intensidade é nula onde a diferença de percurso é um número ímpar de meios comprimentos de onda.

34-2 A Natureza Corpuscular da Luz: Fótons

A difração da luz e a existência de uma figura de interferência na experiência das duas fendas fornece uma evidência clara das propriedades ondulatórias da luz. Porém, no início do século XX descobriu-se que a energia da luz é trocada em quantidades discretas.

O Efeito Fotoelétrico

A natureza quântica da luz e a quantização da energia foram sugeridas por Albert Einstein em 1905, em sua explicação sobre o efeito fotoelétrico. O trabalho de Einstein marcou o início da teoria quântica. Devido a esse importante trabalho, Einstein recebeu o Prêmio Nobel de física. A Figura 34-2 mostra um diagrama esquemático do aparato básico para estudar o efeito fotoelétrico, no qual a luz de uma única frequência entra em uma câmara de vácuo e incide sobre uma superfície C (C para catodo), causando a emissão de elétrons. Alguns desses elétrons atingem uma segunda placa metálica A (A para anodo), constituindo uma corrente elétrica entre as placas. A placa A é carregada negativamente, assim os elétrons são repelidos por ela. Só os elétrons mais energéticos conseguem alcançá-la. A energia cinética máxima dos elétrons emitidos é medida aumentando-se a voltagem lentamente até fazer a corrente se anular. As experiências realizadas levaram ao resultado surpreendente de que a energia cinética máxima dos elétrons emitidos é independente da intensidade da luz incidente. Pela teoria clássica, esperar-se-ia que aumentando a taxa de incidência da luz sobre a superfície metálica a energia absorvida por cada elétron aumentaria e, então, aumentaria também a energia cinética máxima dos elétrons emitidos. No entanto, experimentalmente isso não ocorre. A energia cinética máxima dos elétrons emitidos é a mesma para um determinado comprimento de onda de luz incidente, não importando a intensidade da luz. Einstein demonstrou que esse resultado experimental poderia ser explicado se a energia da luz fosse quantizada em pequenos pacotes chamados fótons. A energia E de cada fóton é dada por

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} \quad 34-1$$

EQUAÇÃO DE EINSTEIN PARA A ENERGIA DE UM FÓTON

onde f é a frequência e h é uma constante conhecida hoje como a constante de Planck.¹ O valor numérico dessa constante é

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,136 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s} \quad 34-2$$

CONSTANTE DE PLANCK

¹Em 1900 o físico alemão Max Planck introduziu essa constante para explicar as discrepâncias entre as curvas teóricas e os dados experimentais do espectro da radiação do corpo negro. Planck também admitiu que a radiação era emitida e absorvida por um corpo negro em quantas de energia hf , mas ele considerava essa hipótese apenas um dispositivo de cálculo, e não uma propriedade fundamental da radiação eletromagnética. A radiação de um corpo negro foi discutida no Capítulo 20.

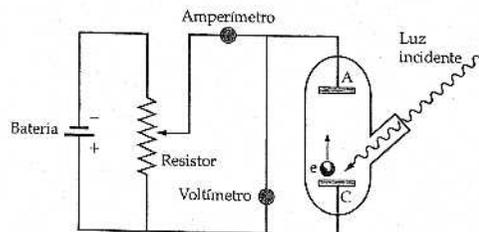


FIGURA 34-2 Desenho esquemático do aparato utilizado para estudar o efeito fotoelétrico. Luz de frequência única entra em uma câmara de vácuo, atingindo o catodo C, que então lança os elétrons. A corrente no amperímetro mede o número de elétrons por unidade de tempo que alcançam o anodo A. O anodo é carregado eletricamente negativo com respeito ao catodo para repelir os elétrons. Apenas os elétrons com energia cinética inicial suficiente para superar a repulsão podem alcançar o anodo. A voltagem entre as duas placas é aumentada lentamente até que a corrente se anule, o que ocorre quando nem sequer os elétrons mais energéticos alcançam a placa A.

A Equação 34-1 é ocasionalmente chamada de equação de Einstein.

No nível fundamental, um feixe de luz consiste em um feixe de partículas — os fótons —, cada qual com a energia hf . A intensidade (potência por unidade de área) do feixe de luz monocromática é o número de fótons por unidade de área e por unidade de tempo vezes a energia de cada fóton. A interação do feixe de luz com a superfície de metal consiste em colisões entre fótons e elétrons. Nessas colisões os fótons desaparecem, cada qual cedendo toda a sua energia a um elétron. Assim, o elétron emitido pela superfície recebe a energia de um único fóton. Se a intensidade da luz for aumentada, mais fótons incidirão sobre a superfície por unidade de tempo, e mais elétrons serão arrancados do metal. Porém, cada fóton ainda terá a mesma energia hf , assim a energia absorvida por cada elétron não se altera.

Se ϕ for a energia mínima necessária para remover um elétron de uma superfície metálica, a energia cinética máxima dos elétrons emitidos é determinada por

$$K_{\text{máx}} = \left(\frac{1}{2}m\bar{v}\right)_{\text{máx}} = hf - \phi \quad 34-3$$

EQUAÇÃO DE EINSTEIN DO EFEITO FOTOELÉTRICO

A grandeza ϕ , denominada **função trabalho**, é uma característica de um dado metal. (Alguns elétrons terão energia cinética menor do que $hf - \phi$ por causa da perda de energia ao se deslocarem pelo metal.)

De acordo com a equação fotoelétrica de Einstein, o gráfico de $K_{\text{máx}}$ em função da frequência f deveria ser uma linha reta com o coeficiente angular h . Esta era uma previsão audaciosa, porque na ocasião não havia nenhuma evidência da aplicação da constante de Planck fora do contexto da radiação do corpo negro. Além disso, não havia dados experimentais da variação de $K_{\text{máx}}$ em função da frequência f , porque ninguém antes havia suspeitado que a frequência da luz estivesse relacionada a $K_{\text{máx}}$. Essa previsão era difícil de ser verificada experimentalmente, porém cuidadosas experiências realizadas por R. A. Millikan, aproximadamente 10 anos depois, mostraram que a equação de Einstein estava correta. A Figura 34-3 mostra um gráfico dos dados de Millikan.

Os fótons com frequências menores do que a frequência do limiar fotoelétrico f_i e, portanto, com comprimentos de onda maiores do que o comprimento de onda limiar $\lambda_i = c/f_i$ não possuem energia suficiente para arrancar um elétron de um certo metal. O limiar de frequência e o limiar de comprimento de onda

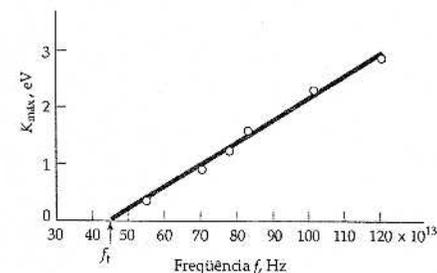


FIGURA 34-3 Dados de Millikan para a energia cinética máxima $K_{\text{máx}}$ em função da frequência f para o efeito fotoelétrico. Os dados estão sobre uma linha reta, cuja inclinação é h , como previsto por Einstein aproximadamente uma década antes de os experimentos serem realizados.

mento de onda correspondente podem ser relacionados à função trabalho ϕ considerando nula a energia cinética máxima dos elétrons na Equação 34-3. Assim,

$$\phi = hf_t = \frac{hc}{\lambda_t} \quad 34-4$$

As funções trabalho dos metais são tipicamente da ordem de alguns elétrons-volt. Considerando que os comprimentos de onda são normalmente dados em nanômetros e as energias dos elétrons em elétrons-volt, é útil ter o valor de hc em elétron-volt-nanômetros:

$$hc = (4,1357 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s})(2,9979 \times 10^8 \text{ m/s}) = 1,240 \times 10^{-6} \text{ eV}\cdot\text{m}$$

ou

$$hc = 1240 \text{ eV}\cdot\text{nm} \quad 34-5$$

EXEMPLO 34-1 ENERGIAS DOS FÓTONS CORRESPONDENTES A LUZ VISÍVEL

Calcule as energias dos fótons de luz de comprimentos de onda de 400 nm (violeta) e 700 nm (vermelho). (Esses comprimentos de onda correspondem, aproximadamente, aos dois extremos do espectro de luz visível.)

1. A energia está relacionada ao comprimento de onda através da Equação 34-1. $E = hf = \frac{hc}{\lambda}$

2. Para $\lambda = 400 \text{ nm}$, a energia é: $E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{400 \text{ nm}} = 3,10 \text{ eV}$

3. Para $\lambda = 700 \text{ nm}$, a energia é: $E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{700 \text{ nm}} = 1,77 \text{ eV}$

NOTAS Pode-se verificar, através desses cálculos, que a luz visível contém fótons com energias que variam de aproximadamente 1,8 eV a 3,1 eV. Os raios X, que têm comprimentos de onda muito mais curtos, contém fótons com energias da ordem do keV. Os raios gama, emitidos pelos núcleos, têm comprimentos de onda ainda mais curtos, e os fótons correspondentes têm energias da ordem de MeV.

EXERCÍCIO Calcule a energia de um fóton que corresponde à radiação eletromagnética de uma onda de rádio FM com o comprimento de onda de 3 m. (Resposta $4,13 \times 10^{-7} \text{ eV}$)

EXERCÍCIO Calcule o comprimento de onda de um fóton cuja energia é (a) 0,1 eV, (b) 1 keV e (c) 1 MeV. (Resposta (a) 12,4 μm , (b) 1,24 nm, (c) 1,24 pm)

EXEMPLO 34-2 O NÚMERO DE FÓTONS POR SEGUNDO NA LUZ SOLAR

A intensidade da luz solar na superfície da Terra é de aproximadamente 1400 W/m². Admitindo que a energia média dos fótons seja de 2 eV (correspondente ao comprimento de onda de aproximadamente 600 nm), calcule o número de fótons que atingem uma área de 1 cm² a cada segundo.

Tente resolver este exemplo sozinho

DESENVOLVIMENTO DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA A intensidade (potência por unidade de área) e a área são dadas. Dessa forma, pode-se calcular a potência, que corresponde à energia por unidade de tempo.

Cubra a coluna da direita e tente resolver o exemplo por seu próprio esforço, antes de olhar as respostas.

Etapas	Respostas
1. A energia ΔE está relacionada ao número N de fótons e à energia por fóton $hf = 2 \text{ eV}$.	$\Delta E = Nhf$
2. A intensidade I (potência por unidade de área) e a área A são dadas, assim pode-se calcular a potência.	$I = \frac{P}{A}$
3. Conhecendo a potência (energia por unidade de tempo) e o tempo, pode-se determinar a energia.	$\Delta E = P\Delta t$
4. Substitua os resultados obtidos nas etapas anteriores para calcular N . Verifique se as unidades utilizadas estão corretas.	$N = \frac{IA\Delta t}{hf} = 4,38 \times 10^{17}$

NOTAS O número de fótons calculado é muito grande. Na maioria das situações cotidianas o número de fótons é tão grande que não se pode detectar a quantização de luz.

EXERCÍCIO Calcule o número de fótons por centímetro cúbico da luz solar do Exemplo 34-2. O número que alcança uma área de 1 cm² em um segundo é o número relativo a uma coluna cuja seção transversal é 1 cm² e cuja altura é a distância que a luz percorre em um segundo. (Resposta $1,46 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$)

Espalhamento Compton

O primeiro uso do conceito de fóton ocorreu para explicar os resultados das experiências relativas ao efeito fotoelétrico. O conceito de fóton foi usado por Arthur H. Compton, em 1923, para esclarecer os resultados de suas medidas relativas ao espalhamento dos raios X por elétrons. De acordo com a teoria clássica, se uma onda eletromagnética de frequência f_i incidir sobre uma matéria contendo cargas elétricas, as cargas oscilarão com essa frequência e irradiarão ondas eletromagnéticas de mesma frequência. Compton considerou essas ondas irradiadas como fótons espalhados e mostrou que se o processo de espalhamento fosse uma colisão entre um fóton e um elétron (Figura 34-4), o elétron recuaria, absorvendo energia. O fóton espalhado teria menos energia e, então, frequência mais baixa e comprimento de onda maior do que o fóton incidente.

De acordo com teoria eletromagnética clássica (veja a Seção 30-3), a energia e o momento de uma onda eletromagnética estão relacionados por

$$E = pc \quad 34-6$$

O momento de um fóton está relacionado ao seu comprimento de onda λ por $p = E/c = hf/c = h/\lambda$.

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad 34-7$$

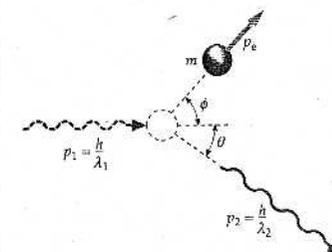


FIGURA 34-4 O espalhamento da luz por um elétron é considerado como uma colisão entre um fóton de momento h/λ_1 e um elétron estacionário. O fóton espalhado tem menos energia e, portanto, apresenta um comprimento de onda maior do que o elétron incidente.

MOMENTO DO FÓTON

Compton aplicou as leis da conservação de momento e de energia à colisão de um fóton e um elétron para calcular o momento p_2 e, assim, o comprimento de onda $\lambda_2 = h/p_2$ do fóton espalhado (veja a Figura 34-4). Aplicando a conservação de momento para a colisão, tem-se

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_2 + \vec{p}_e \quad 34-8$$

onde \vec{p}_1 é o momento do fóton incidente e \vec{p}_e é o momento do elétron após a colisão. O momento inicial do elétron é nulo. Rearrmando a Equação 34-8, obtém-se $\vec{p}_e = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$. Usando a regra da soma vetorial, obtém-se

$$p_e^2 = p_1^2 + p_2^2 - 2p_1p_2 \cos \theta \quad 34-9$$

onde θ é o ângulo que o fóton espalhado faz com a direção do fóton incidente. Como a energia cinética do elétron depois da colisão pode ser uma fração significativa da energia de repouso de um elétron, utiliza-se a expressão relativística que relaciona a energia E do elétron com seu momento. Essa expressão (Equação R-17) é dada por

$$E = \sqrt{p_e^2 c^2 + (m_e c^2)^2}$$

onde m_e é a massa do elétron em repouso. Aplicando a conservação de energia para a colisão, tem-se

$$p_1 c + m_e c^2 = p_2 c + \sqrt{p_e^2 c^2 + (m_e c^2)^2} \quad 34-10$$

onde pc (Equação 34-6) foi usado para expressar as energias dos fótons. Eliminando p_e^2 da Equação 34-9 e da Equação 34-10, tem-se

$$\frac{1}{p_2} - \frac{1}{p_1} = \frac{1}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

Substituindo p_1 e p_2 usando a Equação 34-7, tem-se

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad 34-11$$

EQUAÇÃO DE COMPTON

A variação dos comprimentos de onda é independente do comprimento de onda λ_1 do fóton incidente. A grandeza $h/m_e c$ tem a dimensão de um comprimento, chamado comprimento de onda Compton. Seu valor é

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = \frac{hc}{m_e c^2} = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{5,11 \times 10^5 \text{ eV}} = 2,43 \times 10^{-12} \text{ m} = 2,43 \text{ pm} \quad 34-12$$

Como a diferença correspondente a $\lambda_2 - \lambda_1$ é pequena, é difícil de ser observada, a menos que λ_1 seja tão pequeno que a variação relativa $(\lambda_2 - \lambda_1)/\lambda_1$ seja apreciável. Compton usou raios X de 71,1 pm de comprimento de onda ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m} = 10^{-3} \text{ nm}$). A energia de um fóton com esse comprimento de onda é $E = hc/\lambda = (1240 \text{ eV} \cdot \text{nm})/(0,0711) = 17,4 \text{ keV}$. Como esse valor é muito maior do que a energia de ligação dos elétrons de valência na maioria dos átomos, a qual é da ordem de poucos eV, esses elétrons podem, basicamente, ser considerados livres. As medidas de Compton de $\lambda_2 - \lambda_1$ em função do ângulo de espalhamento θ concordam com a Equação 34-11, confirmando a correção do conceito de fóton e da natureza corpuscular da luz.

EXEMPLO 34-3 CALCULANDO O AUMENTO DO COMPRIMENTO DE ONDA

Um fóton de raios X, com comprimento de onda de 6 pm, colide frontalmente com um elétron de forma que o fóton espalhado segue em uma direção oposta à do fóton incidente. O elétron se encontra inicialmente em repouso. (a) Qual a variação do comprimento de onda do fóton? (b) Qual a energia cinética do recuo do elétron?

DESENVOLVIMENTO DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA O cálculo do aumento do comprimento de onda e, conseqüentemente, o cálculo do novo comprimento de onda podem ser obtidos da Equação 34-11. Usando-se o novo comprimento de onda, determina-se a energia do fóton espalhado. Pela conservação de energia, então, obtém-se a energia cinética de recuo do elétron (Figura 34-5).

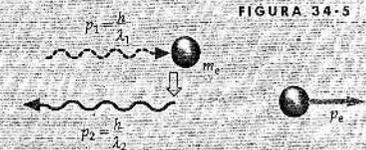


FIGURA 34-5

(a) Use a Equação 34-11 para calcular o aumento do comprimento de onda:

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \lambda_2 - \lambda_1 \\ &= \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \\ &= (2,43 \text{ pm})(1 - \cos 180^\circ) = \boxed{4,86 \text{ pm}} \end{aligned}$$

(b) 1. A energia cinética de recuo do elétron é igual à energia do fóton incidente E_1 , menos a energia do fóton espalhado E_2 :

$$K_e = E_1 - E_2 = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2}$$

2. Calcule λ_2 usando o comprimento de onda do fóton incidente dado e a variação obtida em (a):

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= \lambda_1 + \Delta\lambda = 6 \text{ pm} + 4,86 \text{ pm} \\ &= 10,86 \text{ pm} \end{aligned}$$

3. Substitua os valores de E_1 e E_2 para calcular a energia de recuo do elétron:

$$\begin{aligned} K_e &= \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2} \\ &= \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{6,0 \text{ pm}} - \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{10,86 \text{ pm}} \\ &= \frac{1,24 \text{ keV} \cdot \text{nm}}{6,0 \times 10^{-3} \text{ nm}} - \frac{1,24 \text{ keV} \cdot \text{nm}}{10,86 \times 10^{-3} \text{ nm}} \\ &= 207 \text{ keV} - 114 \text{ keV} \\ &= \boxed{93 \text{ keV}} \end{aligned}$$

NOTAS A energia cinética do elétron espalhado é de 93 keV, e a energia de repouso de um elétron é de 511 keV, assim a energia cinética é 18% da energia de repouso. Logo, a fórmula não-relativística da energia cinética ($\frac{1}{2} m_e v^2$) não é válida.

EXERCÍCIO Qual é a velocidade do elétron espalhado dada pela fórmula não-relativística da energia cinética ($\frac{1}{2} m_e v^2$)? (Resposta: 0,6c)

34-3 Quantização da Energia nos Átomos

A luz branca comum tem um espectro contínuo, ou seja, contém todos os comprimentos de onda do espectro visível. Porém, se os átomos de um gás a baixa

pressão forem excitados por uma descarga elétrica eles emitirão luz de comprimentos de onda específicos, característicos do elemento ou do composto. Como a energia de um fóton está relacionada ao seu comprimento de onda por $E = hf = hc/\lambda$, um conjunto discreto de comprimentos de onda implica um conjunto discreto de valores da energia. Assim, a conservação da energia sugere que se um átomo absorve ou emite um fóton sua energia interna varia de uma quantidade discreta, que corresponde \pm à energia do fóton. Essa idéia levou Niels Bohr, em 1913, a admitir que a energia interna de um átomo só podia ter um conjunto discreto de valores. Ou seja, a energia interna de um átomo é **quantizada**. Quando um átomo irradia luz de frequência f , faz uma transição de um nível de energia permitido a outro nível, com energia mais baixa, obedecendo à relação $\Delta E = hf$. Bohr conseguiu construir um modelo semiclássico do átomo de hidrogênio com níveis discretos de energia consistente com o espectro de luz observado.¹ Entretanto, a *razão* para a quantização dos níveis de energia dos átomos e de outros sistemas permaneceu um mistério até a descoberta da natureza ondulatória dos elétrons, uma década depois.

34-4 Elétrons e o Caráter Ondulatório da Matéria

Em 1897, J. J. Thomson mostrou que os raios de um tubo de raios catódicos (Figura 34-6) podiam ser desviados por campos elétricos e magnéticos e, portanto, deveriam consistir em partículas eletricamente carregadas. Medindo os desvios dessas partículas, Thomson demonstrou que todas as partículas possuíam a mesma razão carga-massa, dada por q/m . Além disso, também foi mostrado que partículas com a mesma razão entre a carga e a massa podiam ser obtidas usando qualquer material para o catodo. Isso significava que essas partículas, atualmente conhecidas por **elétrons**, eram componentes fundamentais de toda matéria.

A Hipótese de de Broglie

Considerando que a luz demonstrava ter propriedades ondulatórias e corpusculares, seria natural perguntar-se a matéria (p. ex., os elétrons e os prótons) também apresentava tais características. Em 1924, um estudante francês de física, Louis de Broglie, sugeriu essa idéia em sua tese de doutorado. O trabalho de de Broglie foi altamente especulativo, uma vez que naquele tempo ainda não havia evidências sobre o caráter ondulatório da matéria.

Para o comprimento de onda relativo ao elétron, de Broglie apresentou a seguinte relação

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

34-13

EQUAÇÃO DE DE BROGLIE PARA O COMPRIMENTO DE ONDA RELATIVO AO ELÉTRON

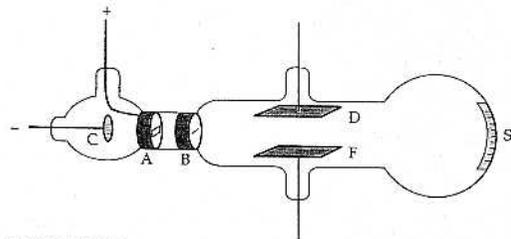


FIGURA 34-6 Diagrama esquemático do tubo de raios catódicos de Thomson usado para medir a razão q/m das partículas que englobam os raios catódicos (elétrons). Os elétrons do catodo C passam através das fendas em A e B e atingem a tela fosforescente S. O feixe pode ser desviado por um campo elétrico entre as placas D e F ou por um campo magnético (não apresentado).

onde p é o momento do elétron. Observe que essa equação é igual à Equação 34-7 para o fóton. Para a frequência das ondas do elétron, de Broglie escolheu a equação de Einstein que relaciona a frequência com a energia de um fóton.

$$f = \frac{E}{h} \quad 34-14$$

EQUAÇÃO DE DE BROGLIE PARA A FREQUÊNCIA DAS ONDAS DO ELÉTRON

Acredita-se que as equações anteriores podem ser aplicadas a toda matéria. Porém, para corpos macroscópicos os comprimentos de onda calculados através da Equação 34-13 são tão pequenos que se torna impossível observar as propriedades ondulatórias habituais de interferência ou difração. Até mesmo uma partícula de poeira, com massa de apenas $1 \mu\text{g}$, tem massa muito grande para exibir qualquer característica ondulatória, como mostra o exemplo a seguir.

EXEMPLO 34-4

O COMPRIMENTO DE ONDA DE DE BROGLIE

Tente resolver este exemplo sozinho

Calcule o comprimento de onda de de Broglie relativo a uma partícula de 10^{-6} g que se move com a velocidade de 10^{-6} m/s .

Cubra a coluna da direita e tente resolver o exemplo por seu próprio esforço, antes de olhar as respostas.

Etapas

Respostas

Escreva a definição de comprimento de onda de de Broglie e substitua os dados fornecidos.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{(10^{-6} \text{ kg})(10^{-6} \text{ m/s})} = 6,63 \times 10^{-12} \text{ m}$$

NOTAS Este comprimento de onda é várias ordens de grandeza menor do que o diâmetro de um núcleo atômico, que é de aproximadamente 10^{-15} m .

Considerando que o comprimento de onda calculado no Exemplo 34-4 é muito menor do que qualquer abertura ou obstáculo possível, não se consegue observar a difração ou a interferência de tais ondas. Na realidade, a propagação de ondas de comprimentos de onda muito pequenos é indistinguível da propagação de partículas. O momento da partícula do Exemplo 34-4 foi de apenas $10^{-12} \text{ kg}\cdot\text{m/s}$. Uma partícula macroscópica com um momento maior teria comprimento de onda de de Broglie ainda menor. Assim, não se pode observar as propriedades ondulatórias de tais corpos macroscópicos, como no caso de bolas de beisebol e de bilhar.

EXERCÍCIO Calcule o comprimento de onda de de Broglie relativo a uma bola de $0,17 \text{ kg}$ de massa que se desloca a 100 km/h . (Resposta $1,4 \times 10^{-34} \text{ m}$)

A situação é diferente para elétrons de baixa energia e outras partículas microscópicas. Considere uma partícula com a energia cinética K . O seu momento é calculado por

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

¹O modelo de Bohr será estudado no Capítulo 36.

ou

$$p = \sqrt{2mK}$$

O seu comprimento de onda é então

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}}$$

Se o numerador e o denominador forem multiplicados por c , obtém-se

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2K}} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{\sqrt{2mc^2K}} \quad 34-15$$

COMPRIMENTO DE ONDA ASSOCIADO A UMA PARTÍCULA DE MASSA M onde foi utilizado $hc = 1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}$. Para elétrons, $mc^2 = 0,511 \text{ MeV}$. Então,

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{\sqrt{2mc^2K}} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{\sqrt{2(0,511 \times 10^6 \text{ eV})K}}$$

ou

$$\lambda = \frac{1,226}{\sqrt{K}} \text{ nm}, \quad K \text{ em elétrons-volt} \quad 34-16$$

COMPRIMENTO DE ONDA DO ELÉTRON

A Equação 34-15 e a Equação 34-16 não são válidas para partículas relativísticas cujas energias cinéticas correspondam a uma fração significativa das respectivas energias de repouso mc^2 . (A energia de repouso foi discutida no Capítulo 7 e no Capítulo 9.)

EXERCÍCIO Calcule o comprimento de onda de um elétron cuja energia cinética é de 10 eV. (Resposta 0,388 nm. Desse resultado, observa-se que um elétron de 10 eV tem um comprimento de onda de de Broglie de aproximadamente 0,4 nm. Esse comprimento é da mesma ordem de grandeza que o tamanho de um átomo e que o espaçamento dos átomos de um cristal.)

Interferência e Difração de Elétrons

A observação da difração e da interferência de ondas de elétrons forneceria a prova crucial da existência das propriedades ondulatórias dos elétrons. Isso foi descoberto acidentalmente, em 1927, por C. J. Davisson e L. H. Germer, quando estudavam o espalhamento de elétrons utilizando um alvo de níquel, nos laboratórios da Bell Telephone Co. Depois de aquecerem o metal para remover a camada superficial de óxido, acumulada durante uma fratura accidental no sistema de vácuo, eles observaram que a intensidade dos elétrons espalhados, função do ângulo de espalhamento, apresentava máximos e mínimos. O alvo deles havia cristalizado e, assim, por acaso, observaram a difração de elétrons. Davisson e Germer, então, prepararam um alvo que consistia em um único cristal de níquel, e investigaram extensivamente o fenômeno. A Figura 34-7a ilustra a experiência realizada por eles. Elétrons emitidos por um canhão eletrônico eram dirigidos contra o cristal e detectados em algum ângulo ϕ que podia ser variado. A Figura 34-7b mostra uma figura típica observada. Há um nítido e forte espalhamento máximo no ângulo de 50° . Os ângulos de espalhamento máximo das ondas relativos a um cristal dependem do comprimento de onda das ondas

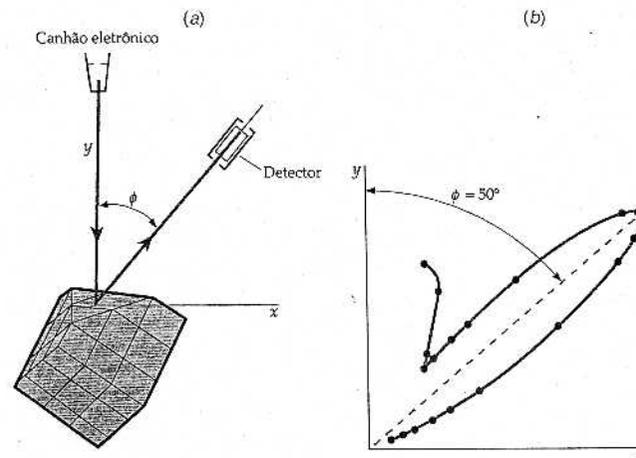


FIGURA 34-7
A experiência de Davisson-Germer. (a) Os elétrons são espalhados por um cristal de níquel e atingem um detector. (b) Gráfico da intensidade dos elétrons espalhados contra o ângulo de espalhamento. O máximo está localizado no ângulo previsto pela difração de ondas de comprimento de onda λ , determinado pela fórmula de de Broglie.

e do espaçamento entre os átomos do cristal. Usando o espaçamento conhecido entre os átomos do cristal, Davisson e Germer calcularam o comprimento de onda que poderia produzir tal máximo, e verificaram que esse resultado concordava com o da equação de de Broglie (Equação 34-16) para a energia dos elétrons utilizados. Variando a energia dos elétrons incidentes eles podiam alterar os comprimentos de onda do elétron e produzir máximos e mínimos em diferentes locais nas figuras de difração. Em todos os casos, os comprimentos de onda medidos concordavam com a hipótese de de Broglie.

Uma outra demonstração da natureza ondulatória dos elétrons foi apresentada no mesmo ano por G. P. Thomson (filho de J. J. Thomson), que observou a difração de elétrons na transmissão destes através de delgadas chapas metálicas. Uma chapa ou folha de metal consiste em minúsculos cristais, orientados aleatoriamente. A figura de difração resultante é um conjunto de círculos concêntricos. A Figura 34-8a e a Figura 34-8b mostram as figuras de difração observadas usando-se raios X e elétrons passando através de uma folha de alumínio. A Figura 34-8c mostra as figuras de difração de nêutrons passando através de uma folha de cobre. Pode-se observar a semelhança entre as figuras. A difração de átomos de hidrogênio e de hélio foi observada em 1930. Em todos os casos, os comprimentos de onda medidos concordavam com os previstos pelo modelo de

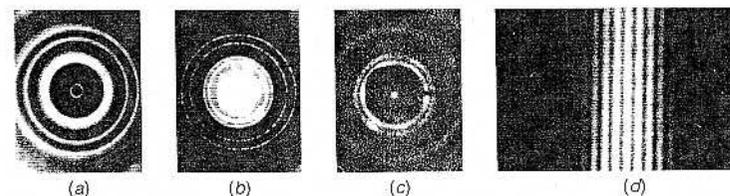


FIGURA 34-8
(a) Figura de difração produzida por raios X com comprimento de onda 0,071 nm através de uma folha de alumínio. (b) Figura de difração produzida por elétrons de 600 eV ($\lambda = 0,050 \text{ nm}$) através de uma folha de alumínio. (c) Difração de nêutrons de 0,0568 eV ($\lambda = 0,12 \text{ nm}$) que incidem sobre uma folha de cobre. (d) Figura de difração-interferência de elétrons incidindo sobre duas fendas.

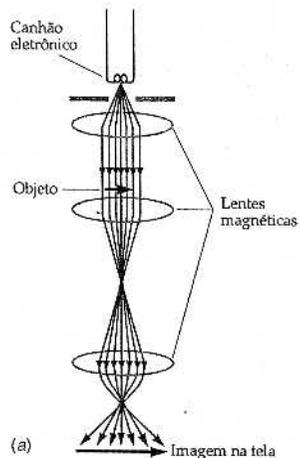
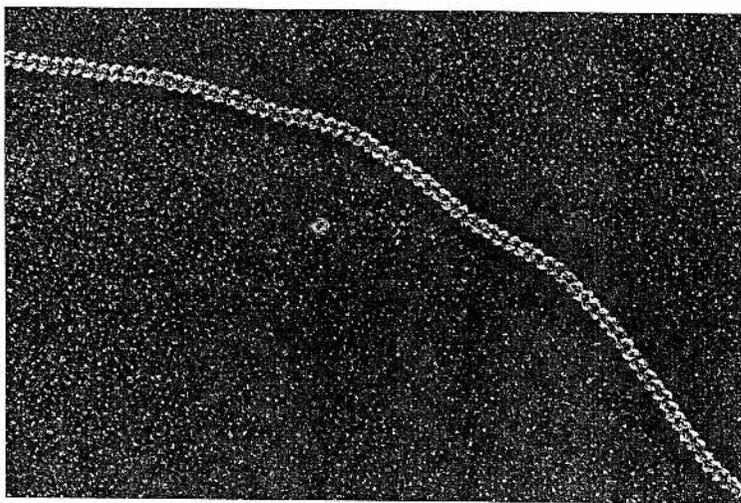


FIGURA 34-9
(a) Microscópio eletrônico. Os elétrons de um filamento aquecido (o canhão eletrônico) são acelerados por meio de uma grande diferença potencial. O feixe de elétrons é colimado por lentes magnéticas. Os elétrons incidem no alvo delgado e são, então, focalizados por um segundo conjunto de lentes magnéticas. Um terceiro conjunto de lentes magnéticas projeta o feixe de elétrons sobre uma tela fluorescente para produzir a imagem. (b) Micrografia eletrônica de uma molécula de ADN.



de Broglie. A Figura 34-8d mostra a figura de difração produzida quando elétrons incidem sobre duas fendas estreitas. Essa experiência é equivalente à famosa experiência de fenda dupla de Young. A figura é idêntica à que se observa com fótons com o mesmo comprimento de onda. (Compare com a Figura 34-1b.)

Logo após as propriedades ondulatórias do elétron serem demonstradas, sugeriu-se que os elétrons poderiam ser usados no lugar da luz para *observar* corpos pequenos. Conforme discutido no Capítulo 33, as ondas refletidas ou transmitidas só podem fornecer detalhes dos corpos se os detalhes forem maiores do que o comprimento de onda da onda refletida. Os feixes de elétrons que podem ser focalizados eletricamente podem ter comprimentos de onda muito pequenos — menores do que os da luz visível. Hoje, o microscópio eletrônico (Figura 34-9) é uma importante ferramenta de pesquisa, que permite visualizar corpos em escalas muito menores das que eram possíveis com os microscópios óticos comuns.

Ondas Estacionárias e Quantização da Energia

Uma vez que os elétrons possuem propriedades ondulatórias, deve ser possível produzir ondas estacionárias de elétrons. Se a energia estiver associada à frequência de uma onda estacionária, como em $E = hf$ (Equação 34-14), então as ondas estacionárias implicam energias quantizadas.

A idéia de que os estados discretos de energia nos átomos poderiam ser explicados mediante ondas estacionárias conduziu ao desenvolvimento, por Erwin Schrödinger e outros, em 1926, de uma teoria matemática detalhada, conhecida como teoria quântica, ou mecânica quântica, ou mecânica ondulatória. Nessa teoria, o elétron é descrito por uma função de onda ψ que obedece à equação de onda chamada equação de Schrödinger. A forma da equação de Schrödinger para um determinado sistema depende das forças que agem sobre a partícula, descritas pelas funções de energia potencial associadas a essas forças. Essa equação será discutida no Capítulo 35, onde se poderá verificar sua semelhança com as equações clássicas da onda para o som ou para a luz. Schrödinger resolveu o problema das ondas estacionárias para o átomo de hidrogênio, o oscilador harmônico simples e outros sistemas de interesse. Ele mostrou que as frequências permitidas, combinadas com a equação $E = hf$, resultavam no conjunto de níveis de energia determinado experimentalmente para o átomo de hidrogênio. Logo, ficou demonstrado, assim, que a teoria quântica fornecia um método geral para a determinação dos níveis quantizados da energia para um determinado sistema. A teoria quântica é a base para a compreensão do mundo moderno, desde o entendimento do funcionamento dos núcleos atômicos até a interpretação dos espectros de radiação de galáxias distantes.

34-5 A Interpretação da Função de Onda

A função de onda relativa às ondas em uma corda é o deslocamento y dos pontos da corda. A função de onda das ondas sonoras pode fornecer o deslocamento s das moléculas de ar ou a pressão P . Do mesmo modo, a função de onda das ondas eletromagnéticas pode fornecer o campo elétrico \vec{E} e o campo magnético \vec{B} . O que pode, então, fornecer a função de onda das ondas dos elétrons? O símbolo usado para essa função é ψ (letra grega psi). Quando Schrödinger publicou sua equação da onda, nem ele nem qualquer outro sabia como interpretar a função ψ . Uma sugestão sobre o seu significado pode ser obtida a partir da quantização das ondas de luz. Para ondas clássicas, como as de som ou de luz, a energia por unidade de volume na onda é proporcional ao quadrado das respectivas funções de onda. Como a energia de uma onda de luz é quantizada, a energia por unidade de volume é proporcional ao número de fótons por unidade de volume. Pode-se, então, esperar que o quadrado da função de onda dos fótons seja proporcional ao número de fótons por unidade de volume em uma onda de luz. Suponha, porém, que se tenha uma fonte de luz de energia muito baixa, que emita apenas um fóton de cada vez. Em qualquer unidade de volume ou se encontra um fóton ou nenhum. O quadrado da função de onda deve crescer, então, a *probabilidade* de se encontrar um fóton num certo volume unitário.

A equação de Schrödinger descreve uma única partícula. O quadrado da função de onda da partícula deve então descrever a *densidade de probabilidade*, que é a probabilidade de se encontrar a partícula numa certa unidade de volume. A probabilidade de se encontrar a partícula num elemento de volume também deve ser proporcional ao tamanho do elemento de volume dV . Assim, em uma dimensão a probabilidade de se encontrar uma partícula em uma região dx no

entorno do ponto x é $\psi^2(x)dx$. Se essa probabilidade for igual a $P(x) dx$, onde $P(x)$ é a densidade de probabilidade, pode-se escrever

$$P(x) = \psi^2(x) \quad 34-17$$

DENSIDADE DE PROBABILIDADE

Geralmente a função de onda depende do tempo e também da posição, e é escrita $\psi(x,t)$. Porém, para ondas estacionárias a densidade de probabilidade é independente do tempo. Considerando que este capítulo aborda principalmente as ondas estacionárias, será omitida a dependência entre a função de onda e o tempo. Dessa forma, será adotado $\psi(x)$ ou apenas ψ para descrever a função de onda.

A probabilidade de se encontrar a partícula no intervalo dx em x_1 ou em x_2 é a soma das probabilidades separadas $P(x_1)dx + P(x_2) dx$. Se a partícula está num ponto qualquer, a probabilidade de se encontrar a partícula em qualquer ponto é 1. Então, a soma das probabilidades sobre todos os valores possíveis de x tem que ser igual a 1. Ou seja,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 dx = 1 \quad 34-18$$

CONDIÇÃO DE NORMALIZAÇÃO

A Equação 34-18 é chamada de condição de normalização. Se ψ satisfaz a condição de normalização, deve tender a zero quando x tende a infinito. Essa condição restringe as possíveis soluções da equação de Schrödinger. Há soluções da equação de Schrödinger que não tendem a zero quando x tende a infinito. Porém, essas soluções não são aceitáveis como funções de onda.

EXEMPLO 34-5

CÁLCULO DA PROBABILIDADE RELATIVO A UMA PARTICULA CLÁSSICA

Uma partícula puntiforme clássica move-se de um para outro lado, com velocidade constante, entre duas paredes em $x = 0$ e $x = 8$ cm (Figura 34-10). Nenhuma informação adicional sobre o local da partícula é conhecida. (a) Qual a densidade de probabilidade $P(x)$? (b) Qual a probabilidade de se encontrar a partícula em $x = 2$ cm? (c) Qual a probabilidade de se encontrar a partícula entre $x = 3,00$ cm e $x = 3,4$ cm?

DESENVOLVIMENTO DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA A posição inicial da partícula não é conhecida. Como a partícula se desloca com velocidade constante, é igualmente provável estar em qualquer lugar na região $0 < x < 8$ cm. A densidade de probabilidade $P(x)$ é, então, independente de x para $0 < x < 8$ cm e nula fora desse intervalo. Pode-se determinar $P(x)$ para $0 < x < 8$ cm através de normalização, ou seja, fazendo com que a probabilidade de que a partícula esteja num ponto qualquer entre $x = 0$ e $x = 8$ cm seja 1:

(a) 1. A densidade de probabilidade $P(x)$ é constante entre as paredes e nula fora desse intervalo:

$$P(x) = P_0, \quad 0 < x < 8 \text{ cm}$$

$$P(x) = 0, \quad x < 0 \text{ ou } x > 8 \text{ cm}$$

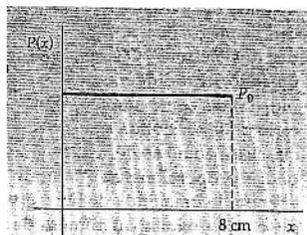


FIGURA 34-10 Função de probabilidade $P(x)$.

2. Aplique a condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x) dx = \int_0^{8 \text{ cm}} P_0 dx = P_0 (8 \text{ cm}) = 1$$

3. Determine P_0 :

$$P_0 = \frac{1}{8 \text{ cm}}$$

(b) A probabilidade de se encontrar a partícula num intervalo dx é proporcional a $P_0 dx = dx / (8 \text{ cm})$. Como $\Delta x = 0$, a probabilidade de se encontrar a partícula no ponto $x = 2$ cm é zero. De forma alternativa, como há um número infinito de pontos entre $x = 0$ e $x = 8$ cm e é igualmente provável que a partícula esteja em qualquer ponto, a chance de a partícula estar em um ponto particular deve ser zero.

A probabilidade de se encontrar a partícula no ponto $x = 2$ cm é zero.

(c) Como a densidade de probabilidade é constante, a probabilidade de a partícula estar num intervalo Δx na região $0 < x < 8$ cm é $P_0 \Delta x$. A probabilidade de a partícula estar na região $3,0 \text{ cm} < x < 3,4 \text{ cm}$ é, então:

$$P_0 \Delta x = \left(\frac{1}{8 \text{ cm}} \right) 0,4 \text{ cm} = 0,05$$

NOTAS Na segunda etapa do item (a) basta integrar de 0 a 8 cm, pois $P(x)$ é nula fora desse intervalo.

34-6 Dualidade Onda-Partícula

Foi visto que a luz, inicialmente considerada como uma onda, possui propriedades corpusculares quando interage com a matéria, como no caso do efeito fotoelétrico ou do espalhamento Compton. Os elétrons, normalmente considerados como partículas, exibem propriedades ondulatórias, como a interferência e a difração, quando passam próximo às extremidades de obstáculos. Todos os portadores de momento e de energia (como, p. ex., elétrons, átomos, luz ou som) exibem características de onda e de partícula. Poder-se-ia pensar em dizer que um elétron, por exemplo, é uma onda e também uma partícula, mas qual o significado dessa afirmação? Na física clássica, os conceitos de onda e de partícula são mutuamente exclusivos. Uma partícula clássica se comporta como um pequeno projétil. Pode ser localizada, troca energia num instante de tempo em um ponto no espaço e obedece às leis da conservação da energia e do momento nas colisões. Não exibe interferência nem difração. Por outro lado, uma onda clássica se comporta como uma onda na água. Exibe difração e interferência, e sua energia é distribuída continuamente no espaço e no tempo. Nada pode ser ao mesmo tempo uma partícula clássica e uma onda clássica.

Depois que Thomas Young observou a figura de interferência na experiência da fenda dupla com luz, em 1801, pensou-se que a luz podia ser imaginada como uma onda clássica. Por outro lado, os elétrons, descobertos por J. J. Thomson, foram imaginados como partículas clássicas. Sabe-se, agora, que os conceitos clássicos de ondas e partículas não descrevem adequadamente o comportamento completo de qualquer fenômeno.

Todos os portadores de energia e de momento se propagam como ondas e trocam energia como partículas.

Freqüentemente os conceitos de partícula clássica e de onda clássica levam aos mesmos resultados. Se o comprimento de onda for muito pequeno, os efeitos de difração são desprezíveis, assim as ondas se propagam em linhas retas, como as partículas clássicas. Também não se percebem os efeitos da interferência de ondas com comprimento de onda muito pequeno, pois como os máximos e mínimos estão muito próximos uns dos outros não são perceptíveis. Dessa forma, não faz diferença o tipo de conceito utilizado. Se a difração for desprezível, pode-se imaginar a luz como uma onda que se propaga ao longo dos respectivos raios ou como um feixe de partículas, de fótons. Analogamente, pode-se pensar em um elétron como uma onda que se propaga em linhas retas, ao longo de raios, ou, como é mais comum, como uma partícula.

O conceito de onda ou o de partícula também pode ser usado para descrever trocas de energia quando o número de partículas for muito grande e o interesse estiver voltado exclusivamente para os valores médios das trocas de energia e de momento.

De Volta à Experiência das Duas Fendas

A dualidade onda-partícula da natureza fica bem ilustrada na análise da experiência na qual um único elétron incide sobre uma barreira com duas fendas. A análise é a mesma, quer sejam usados elétrons ou fótons (luz). Para descrever a propagação do elétron, deve-se adotar a teoria ondulatória. Suponhamos que a fonte seja puntiforme, como a ponta de uma agulha, de modo que se tenham ondas esféricas emitidas pela fonte. Depois de passar pelas duas fendas, as ondas se propagam — como se cada fenda fosse uma fonte de ondas esféricas. A função de onda ψ em um ponto sobre o anteparo ou película longe das fendas depende da diferença do comprimento de percurso da fonte ao ponto considerado. Um percurso passa por uma das fendas e o outro percurso passa pela outra. Nos pontos em que a diferença de percurso for zero ou um múltiplo inteiro do comprimento de onda, a função de onda ψ corresponde a um máximo. Como a probabilidade de detectar o elétron é proporcional a ψ^2 , é muito provável que o elétron atinja os pontos de máximo. Nos pontos em que a diferença de percurso é de meio comprimento de onda ou é de um múltiplo ímpar de meio comprimento de onda, a função de onda ψ é nula. Assim, a probabilidade de o elétron atingir os pontos correspondentes também é nula. As fotografias do início do capítulo mostram as figuras de interferência produzidas por 10, 100, 3000 e 70.000 elétrons. Note que embora o elétron se propague através das fendas como uma onda, o elétron interage com a tela em um único ponto, como se fosse uma partícula.

O Princípio da Incerteza

Um princípio importante, consistente com a dualidade onda-partícula da natureza, é o princípio da incerteza. Esse princípio afirma que é impossível medir simultaneamente a posição e o momento de uma partícula de forma extremamente precisa. Uma maneira comum de medir a posição de um corpo é iluminar o corpo com luz. A luz espalhada pelo corpo serve para localizá-lo. Se o comprimento de onda da luz for λ , pode-se medir a posição x com uma incerteza Δx da ordem de λ por causa dos efeitos da difração.

$$\Delta x \sim \lambda$$

Para reduzir a incerteza na posição, utiliza-se luz de comprimento de onda muito curto. Podem ser utilizados até mesmo raios X. Em princípio, não há nenhum limite com relação à precisão de tal medida de posição, pois não há limite para o comprimento de onda λ empregado.

Pode-se determinar o momento p_x do corpo se a massa for conhecida e a velocidade puder ser determinada. O momento do corpo pode ser calculado me-

dindo a posição do corpo em dois instantes de tempo vizinhos e pelo cálculo da velocidade. Se a luz usada tiver comprimento de onda λ , os fótons apresentam o momento h/p_x . Quando os fótons forem espalhados pelo corpo, o momento deste se altera, de um modo incontrolável, pelo espalhamento do fóton. Cada fóton apresenta momento h/λ , assim a incerteza do momento Δp_x do corpo, introduzida pela observação com os fótons, é da ordem de grandeza de h/λ :

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{\lambda}$$

Se o comprimento de onda da radiação for pequeno, o momento de cada fóton será grande e a medida do momento terá grande incerteza. A redução da intensidade de luz não pode eliminar essa incerteza. Tal redução contribui apenas para diminuir o número de fótons no feixe. Para ver o corpo deve-se espalhar pelo menos um fóton. Assim, a incerteza na medida do momento do corpo será grande se λ for pequeno, e a incerteza na medida da posição do corpo será grande se λ for grande.

Claro que seria possível *olhar* para os corpos espalhando elétrons e não fótons, mas a mesma dificuldade continua a existir. Se forem usados elétrons de pequeno momento para reduzir a incerteza na medida do momento, haverá uma grande incerteza na medida da posição devido à difração dos elétrons. A relação entre o comprimento de onda e o momento $\lambda = h/p_x$ é válida para elétrons e fótons.

O produto das incertezas na posição e no momento é, então,

$$\Delta x \Delta p_x \sim \lambda \times \frac{h}{\lambda} = h$$

Quando fica definido de forma precisa o que se deseja dizer por incertezas nas medidas, pode-se fornecer uma informação mais exata do princípio da incerteza. Se Δx e Δp forem definidos como os desvios-padrões das medidas de posição e de momento, pode ser mostrado que o respectivo produto deve ser maior ou igual a $h/2$.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}h \quad 34-19$$

onde $h = h/2\pi$.¹

A Equação 34-19 é a formulação matemática do princípio da incerteza, enunciado pela primeira vez por Werner Heisenberg, em 1927. Na prática, as incertezas das medidas experimentais normalmente são muito maiores do que os limites inferiores determinados pela dualidade onda-partícula.

34-7 Partícula em uma Caixa

Muitas características importantes da física quântica podem ser ilustradas sem se resolver a equação de Schrödinger. Isso pode ser feito considerando o problema simples de uma partícula de massa m confinada numa caixa unidimensional de comprimento L , como a partícula do Exemplo 34-5. Esta situação é semelhante à de um elétron confinado num átomo ou a de um próton confinado em um núcleo. Quando uma partícula clássica oscila de um lado para o outro entre as paredes da caixa, a energia e o momento da partícula podem assumir quaisquer valores. Porém, de acordo com a teoria quântica a partícula é descrita por uma função de onda ψ , cujo quadrado descreve a probabilidade de

¹A combinação $h/2\pi$ aparece tão freqüentemente que recebe um símbolo especial, ω , análogo ao que foi feito para o produto $2\pi f$, muito comum no estudo das oscilações.

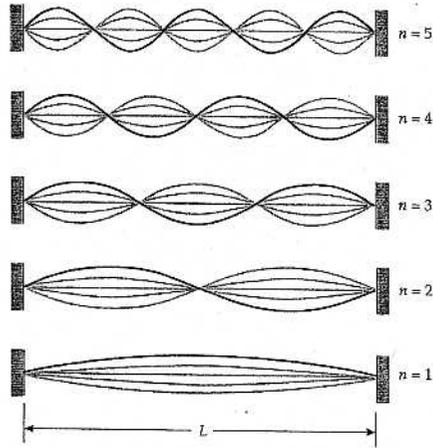


FIGURA 34-11 Ondas estacionárias em uma corda fixa nas duas extremidades. A condição de onda estacionária é igual à das ondas estacionárias dos elétrons em uma caixa.

se encontrar a partícula nas vizinhanças de um ponto. Admitindo que a partícula realmente está na caixa, a função de onda deve ser nula em qualquer ponto fora da caixa. Se a caixa for limitada por $x = 0$ e $x = L$, tem-se

$$\psi = 0, \text{ para } x \leq 0 \text{ e para } x \geq L$$

Em particular, se a função de onda for considerada contínua deve ser nula nos extremos, ou seja, em $x = 0$ e $x = L$. Esta é a mesma condição das ondas estacionárias numa corda fixa em $x = 0$ e $x = L$, e os resultados são os mesmos. Os comprimentos de onda permitidos para a partícula na caixa são aqueles em que o comprimento L é igual a um número inteiro de meios comprimentos de onda (Figura 34-11).

$$L = n \frac{\lambda_n}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 34-20$$

CONDIÇÃO DE ONDA ESTACIONÁRIA PARA A PARTÍCULA EM UMA CAIXA DE COMPRIMENTO L

A energia total da partícula é a sua energia cinética

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Substituindo a relação de de Broglie $p_n = h/\lambda_n$, tem-se

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{(h/\lambda_n)^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2}$$

Então, a condição de onda estacionária $\lambda_n = 2L/n$ fornece as energias permitidas.

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2} = n^2 E_1 \quad 34-21$$

ENERGIAS PERMITIDAS PARA A PARTÍCULA EM UMA CAIXA

onde

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \quad 34-22$$

ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DA PARTÍCULA EM UMA CAIXA

é a energia do estado mais baixo, o estado fundamental.

A condição $\psi = 0$ em $x = 0$ e $x = L$ é chamada de condição de contorno. As condições de contorno na teoria quântica provocam a quantização da energia. A Figura 34-12 mostra o diagrama de níveis de energia da partícula em uma caixa. Pode-se observar que a energia mais baixa não é a nula. Esse resultado é uma característica geral da teoria quântica. Se uma partícula está confinada em alguma região do espaço, possui um mínimo de energia cinética, correspondente à energia do ponto zero. Isso é indicado na Equação 34-22, pelo fato de que E_1 varia com $1/L^2$.

Se um elétron confinado (p. ex., em um átomo) estiver num certo estado de energia E_i , pode fazer uma transição para outro estado de energia E_f com a emissão de um fóton (se $E_i < E_f$) ou com a absorção de um fóton (se $E_i > E_f$). A transição do estado 3 para o estado fundamental está indicada na Figura 34-12 por uma seta vertical. A frequência do fóton emitido é determinada pela conservação da energia¹

$$hf = E_i - E_f \quad 34-23$$

O comprimento de onda do fóton é, então,

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{E_i - E_f} \quad 34-24$$

Funções de Onda Relativas às Ondas Estacionárias

A forma instantânea de uma corda vibrante fixa em $x = 0$ e $x = L$ é determinada através da Equação 16-15:

$$y_n = A_n \text{sen } k_n x$$

onde A_n é uma constante e $k_n = 2\pi/\lambda_n$ é o número de onda. As funções de onda da partícula em uma caixa (que podem ser obtidas com a solução da equação de Schrödinger, como será visto no Capítulo 35) têm a mesma forma:

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen } k_n x$$

onde $k_n = 2\pi/\lambda_n$. Usando $\lambda_n = 2L/n$, chega-se a

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{2\pi}{2L/n} = \frac{n\pi}{L}$$

As funções de onda podem, assim, ser escritas como

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen} \left(n\pi \frac{x}{L} \right)$$

¹Esta equação foi proposta primeiro por Niels Bohr, em 1913, utilizando o modelo do átomo de hidrogênio, cerca de 10 anos antes da sugestão de de Broglie com relação aos elétrons possuírem propriedades ondulatórias. O modelo de Bohr será estudado no Capítulo 36.

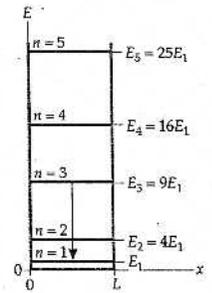


FIGURA 34-12 Diagrama de níveis de energia de uma partícula em uma caixa. Na física clássica, a partícula pode ter qualquer valor de energia. Na mecânica quântica, somente são permitidos os valores da energia dados pela Equação 34-22. A transição entre o estado $n = 3$ e o estado fundamental $n = 1$ está indicada pela seta vertical.

A constante A_n é determinada pela normalização (Equação 34-18):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 dx = \int_0^L A_n^2 \sin^2\left(n\pi \frac{x}{L}\right) dx = 1$$

Observe que é necessário integrar de $x = 0$ até $x = L$, porque $\psi(x)$ é nula fora desse intervalo. Pode-se determinar, assim, A_n ,

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

independente de n . As funções de onda normalizadas da partícula na caixa são, assim,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right)$$

34-25

FUNÇÕES DE ONDA PARA UMA PARTÍCULA EM UMA CAIXA

Essas funções de ondas estacionárias para $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$ estão ilustradas na Figura 34-13.

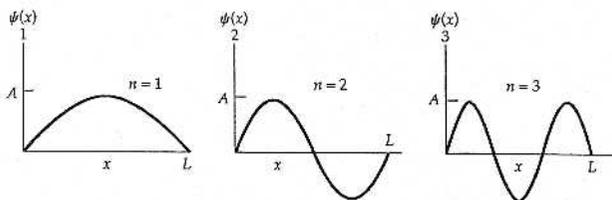


FIGURA 34-13 Funções de onda estacionária para $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$.

O número n é chamado de **número quântico**, e caracteriza a função de onda para um determinado estado e sua respectiva energia. No problema unidimensional em análise, o número quântico surge em virtude da condição de contorno, que estabelece que a função de onda é nula em $x = 0$ e $x = L$. Nos problemas tridimensionais surgem três números quânticos, cada qual associado a uma condição de contorno em uma dimensão.

A Figura 34-14 mostra os gráficos de ψ^2 no estado fundamental, onde $n = 1$, no primeiro estado excitado, onde $n = 2$, no segundo estado excitado, onde $n = 3$, e no estado com $n = 10$. No estado fundamental é mais provável encontrar a partícula na região central da caixa, como indicado pelo valor máximo de ψ^2 em $x = L/2$. No primeiro estado excitado é menos provável encontrar a partícula na região central da caixa, porque ψ^2 é pequena, próximo a $x = L/2$. Para valores muito grandes de n , os máximos e mínimos de ψ^2 são muito próximos, como ilustrado para $n = 10$. O valor médio de ψ^2 está indicado nessa mesma figura pela linha tracejada. Para valores muito grandes de n , o espaçamento entre os máximos é muito pequeno, de forma que ψ^2 não pode ser distinguido do seu valor médio. O fato de $(\psi^2)_{\text{med}}$ ser constante sobre todo o espaço da caixa significa que é igualmente provável encontrar a partícula em qualquer lugar da caixa — como no resultado clássico. Este é um exemplo do princípio da correspondência de Bohr:

No limite de números quânticos muito grandes, o cálculo clássico e o cálculo quântico levam aos mesmos resultados.

PRINCÍPIO DA CORRESPONDÊNCIA DE BOHR

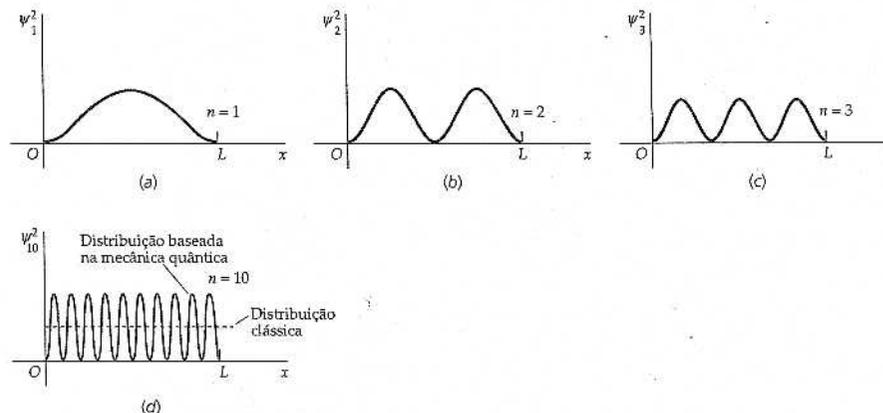


FIGURA 34-14

A função ψ^2 contra x para uma partícula em uma caixa de comprimento L . (a) No estado fundamental, $n = 1$; (b) no primeiro estado excitado, $n = 2$; (c) no segundo estado excitado, $n = 3$; e (d) no estado $n = 10$. Para $n = 10$, os máximos e mínimos de ψ^2 estão tão próximos uns dos outros que é difícil distingui-los. O valor médio de ψ^2 está indicado pela linha tracejada e corresponde à previsão clássica de a partícula ter probabilidade igual de ser encontrada em qualquer ponto da caixa.

Números quânticos muito grandes implicam energias muito grandes. Para grandes energias, a variação relativa de energia entre estados quânticos adjacentes é muito pequena, assim a quantização da energia não é importante (ver o Problema 83).

É comum pensar no elétron como uma partícula clássica e imaginá-lo em uma caixa, oscilando de um lado para outro entre as paredes desta. Porém, as distribuições de probabilidade mostradas na Figura 34-14 são estacionárias, ou seja, não dependem do tempo. Uma imagem melhor para um elétron em um determinado estado é uma nuvem de carga elétrica com a densidade da carga proporcional a ψ^2 . Os gráficos da Figura 34-14 podem ser imaginados, então, como gráficos da densidade de carga contra x para os vários estados. No estado fundamental, $n = 1$, a nuvem de elétrons está centrada no meio da caixa e se espalha pela maioria da caixa, como indica a Figura 34-14a. No primeiro estado excitado, $n = 2$, a densidade de carga da nuvem do elétron tem dois máximos, como mostra a Figura 34-14b. Para valores muito grandes de n , o espaçamento entre os máximos e os mínimos da densidade de carga é tão pequeno que resulta em uma densidade de carga média aproximadamente uniforme ao longo da caixa. Essa imagem do elétron como uma nuvem é muito útil para o entendimento da estrutura de átomos e moléculas. Entretanto, deve-se observar que sempre que um elétron interage com a matéria ou com a radiação ele se comporta como uma unidade de carga íntegra.

EXEMPLO 34-6 EMISSÃO DE FÓTON POR UMA PARTÍCULA EM UMA CAIXA

Um elétron está em uma caixa unidimensional de 0,1 nm de comprimento. (a) Calcule a energia no estado fundamental. (b) Calcule a energia em elétron-volt nos cinco estados mais baixos, e, então, trace o diagrama de níveis de energia. (c) Calcule o comprimento de onda do fóton emitido para cada transição do estado $n = 3$ para um estado mais baixo de energia.

DESENVOLVIMENTO DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA As energias relativas aos itens (a) e (b) são determinadas por $E_n = n^2 E_1$ (Equação 34-21), onde a energia do estado fundamental é dada por $E_1 = h^2/8mL^2$ (Equação 34-22). Os comprimentos de onda dos fótons relativos ao item (c) são determinados por $\lambda = hc/(E_i - E_f)$ (Equação 34-24).

(a) Para calcular E_1 , use $hc = 1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}$ e $mc^2 = 5,11 \times 10^5 \text{ eV}$: $E_1 = \frac{(hc)^2}{8(mc^2)L^2}$

$$= \frac{(1240 \text{ eV}\cdot\text{nm})^2}{8(5,11 \times 10^5 \text{ eV})(0,1 \text{ nm})^2} = \boxed{37,6 \text{ eV}}$$

(b) Calcule $E_n = n^2 E_1$ para $n = 2, 3, 4$ e 5 :

$$E_2 = (2)^2(37,6 \text{ eV}) = \boxed{150 \text{ eV}}$$

$$E_3 = (3)^2(37,6 \text{ eV}) = \boxed{338 \text{ eV}}$$

$$E_4 = (4)^2(37,6 \text{ eV}) = \boxed{602 \text{ eV}}$$

$$E_5 = (5)^2(37,6 \text{ eV}) = \boxed{940 \text{ eV}}$$

(c) 1. Use as energias calculadas em (b) para determinar o comprimento de onda na transição do estado 3 para o estado 2:

$$\lambda = \frac{hc}{E_3 - E_2} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{338 \text{ eV} - 150 \text{ eV}} = \boxed{6,60 \text{ nm}}$$

2. Com as energias calculadas em (a) e (b), determine o comprimento de onda na transição do estado 3 para o estado 1:

$$\lambda = \frac{hc}{E_3 - E_1} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{338 \text{ eV} - 37,6 \text{ eV}} = \boxed{4,13 \text{ nm}}$$

NOTAS O diagrama de níveis de energia está ilustrado na Figura 34-15. As transições de $n = 3$ para $n = 2$ e de $n = 3$ para $n = 1$ estão indicadas pelas setas verticais. A energia do estado fundamental, 37,6 eV, é da mesma ordem de grandeza que a energia cinética do elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio, que é 13,6 eV. Neste átomo, o elétron também tem a energia potencial de -27,2 eV no estado fundamental, sendo a energia total de -13,6 eV.

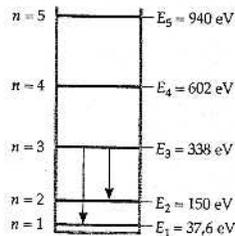


FIGURA 34-15

EXERCÍCIO Calcule o comprimento de onda do fóton emitido na transição do elétron de $n = 4$ para $n = 3$. (Resposta 4,69 nm)

34-8 Valores Esperados

A solução de um problema clássico de mecânica, nos casos típicos, é determinada a partir da variação da posição de uma partícula em função do tempo. Porém, a natureza ondulatória da matéria nos impede de proceder dessa forma para sistemas microscópicos. O máximo que se pode saber é a probabilidade de medir um certo valor da posição x . Se for medida a posição de um grande número de sistemas idênticos, obtém-se uma gama de valores que correspondem à distribuição de probabilidade. O valor médio de x obtido a partir de tais medidas é chamado de valor esperado (esperança matemática) e é escrito $\langle x \rangle$. O valor esperado de x é igual ao valor médio de x que se calcula a partir da medida das posições de um grande número de partículas com a mesma função de onda $\psi(x)$.

Como $\psi^2(x)dx$ é a probabilidade de se encontrar uma partícula na região dx , o valor esperado de x é

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\psi^2(x) dx \quad 34-26$$

DEFINIÇÃO DO VALOR ESPERADO DE x

O valor esperado de qualquer função $f(x)$ é determinado por

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\psi^2(x) dx \quad 34-27$$

DEFINIÇÃO DO VALOR ESPERADO DE $f(x)$

• Cálculo das Probabilidades e dos Valores Esperados

O problema da partícula em uma caixa ilustra o cálculo da probabilidade de se encontrar a partícula em várias regiões da caixa e dos valores esperados para vários estados de energia. A seguir são dados dois exemplos usando as funções de onda obtidas através da Equação 34-25.

EXEMPLO 34-7 A PROBABILIDADE DE A PARTÍCULA SER ENCONTRADA EM UMA REGIÃO ESPECÍFICA DA CAIXA

Uma partícula em uma caixa unidimensional de comprimento L está no estado fundamental. Calcule a probabilidade de se encontrar a partícula (a) no intervalo $\Delta x = 0,01L$, em $x = \frac{1}{2}L$ e (b) na região $0 < x < \frac{1}{4}L$.

DESENVOLVIMENTO DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA A probabilidade P de se encontrar a partícula em um intervalo infinitesimal dx é $\psi^2 dx$. Para uma partícula no estado fundamental, ψ é dado pela Equação 34-25, com $n = 1$; ψ^2 está ilustrado na Figura 34-14. A probabilidade de se encontrar x em certa região corresponde à área sob a curva relativa à região. Para o item (a), essa região é $\Delta x = 0,01L$, centrado em $x = L/2$, e a área sob a curva ψ^2 contra x está mostrada na Figura 34-16a. Essa área é $\approx \psi^2 \Delta x$. Para o item (b), a região é $0 < x < L/4$, e a área sob a curva está mostrada na Figura 34-16b. Para calcular essa área, deve-se integrar ψ^2 de $x = 0$ a $x = L/4$.

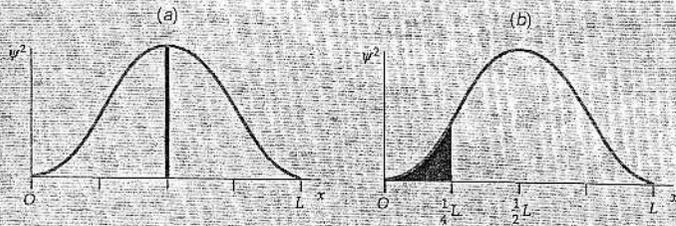


FIGURA 34-16

(a) 1. A probabilidade de se encontrar a partícula corresponde à área sob a curva mostrada na Figura 34-16a. Para calcular essa área deve-se calcular a altura da curva em $x = L/2$.

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

assim

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

2. A área é a altura vezes a largura, e a largura é $\Delta x = 0,01L$;

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

(b) 1. A probabilidade de se encontrar a partícula corresponde à área sob a curva mostrada na Figura 34-16b. Para calcular essa área, deve-se integrar de $x = 0$ a $x = L/4$.

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

2. Há vários modos de se avaliar a integral. Se uma tabela de integrais for usada, deve-se mudar a variável de integração. Assim, mudando a variável de integração para $\theta = \pi x/L$, pode-se escrever

$$P = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/4} \sin^2 \theta d\theta$$

3. A integral pode ser obtida das tabelas convencionais:

$$\int_0^{\pi/4} \sin^2 \theta d\theta = \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\sin 2\theta}{4} \right) \Big|_0^{\pi/4} = \left(\frac{\pi}{8} - \frac{1}{4} \right)$$

4. Use o resultado da terceira etapa do item (b) para calcular a probabilidade:

$$P = \frac{2}{\pi} \left(\frac{\pi}{8} - \frac{1}{4} \right) = \boxed{0,091}$$

NOTAS Não há necessidade de integração no item (a). A área de interesse pode ser aproximada por um retângulo de altura ψ^2 e largura x . A probabilidade de se encontrar a partícula no intervalo $\Delta x = 0,01L$ em $x = L/2$ é de cerca de 2%. A probabilidade de se encontrar a partícula no intervalo $0 < x < L/4$ é de cerca de 9,1%.

EXEMPLO 34-8

CALCULANDO VALORES ESPERADOS

Calcule (a) $\langle x \rangle$ e (b) $\langle x^2 \rangle$ para uma partícula no estado fundamental em uma caixa de comprimento L .

DESENVOLVIMENTO DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA Utiliza-se $\langle f \rangle = \int f(x) \psi^2(x) dx$, com

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

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

(a) 1. Escreva $\langle x \rangle$ usando a função de onda do estado fundamental dada pela Equação 34-25, com $n = 1$:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^2(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) dx$$

2. Antes de avaliar essa integral usando uma tabela convencional de integrais, mude a variável de integração para $\theta = \pi x/L$:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{2}{L} \left(\frac{L}{\pi} \right) \int_0^\pi \theta \sin^2 \theta d\theta \\ &= \frac{2L}{\pi^2} \int_0^\pi \theta \sin^2 \theta d\theta \end{aligned}$$

3. A tabela de integrais fornece:

$$\int_0^\pi \theta \sin^2 \theta d\theta = \left[\frac{\theta^2}{4} - \frac{\theta \sin 2\theta}{4} - \frac{\cos 2\theta}{8} \right]_0^\pi = \frac{\pi^2}{4}$$

4. Substitua esse valor na expressão da segunda etapa:

$$\langle x \rangle = \frac{2L}{\pi^2} \int_0^\pi \theta \sin^2 \theta d\theta = \frac{2L}{\pi^2} \frac{\pi^2}{4} = \boxed{\frac{L}{2}}$$

(b) 1. Repita as etapas 1 e 2 do item (a) para $\langle x^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \psi^2(x) dx = \int_0^L x^2 \frac{2}{L} \sin^2(\pi x/L) dx \\ &= \frac{2}{L} \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 \int_0^\pi \theta^2 \sin^2 \theta d\theta = \frac{2L^2}{\pi^3} \int_0^\pi \theta^2 \sin^2 \theta d\theta \end{aligned}$$

2. Consultando uma tabela de integrais, pode-se escrever:

$$\int_0^\pi \theta^2 \sin^2 \theta d\theta = \left[\frac{\theta^3}{6} - \left(\frac{\theta^2}{4} - \frac{1}{8} \right) \sin 2\theta - \frac{\theta \cos 2\theta}{4} \right]_0^\pi = \frac{\pi^3}{6} - \frac{\pi}{4}$$

3. Substitua esse valor na expressão da primeira etapa do item (b):

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2L^2}{\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{6} - \frac{\pi}{4} \right) = \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right) L^2 = \boxed{0,283L^2}$$

NOTAS O valor esperado de x é $L/2$, como se poderia prever, uma vez que a distribuição de probabilidades é simétrica em torno do ponto central da caixa. Note que $\langle x^2 \rangle$ é diferente de $\langle x \rangle^2$.

34-9 Quantização da Energia em Outros Sistemas

As energias quantizadas de um sistema são geralmente determinadas a partir da resolução da equação de Schrödinger do sistema. A forma da equação de Schrödinger depende da energia potencial da partícula. A energia potencial de uma caixa unidimensional de $x = 0$ a $x = L$ está ilustrada na Figura 34-17. Essa função energia potencial é conhecida como poço de potencial quadrado infinito, e é descrita matematicamente por

$$\begin{aligned} U(x) &= 0, & 0 < x < L \\ U(x) &= \infty, & x < 0 \text{ ou } x > L \end{aligned} \tag{34-28}$$

No interior da caixa a partícula se desloca livremente, assim a energia potencial é uniforme. Por conveniência, escolheu-se que o valor da energia potencial é zero. Fora da caixa, a energia potencial é infinita, assim a partícula não pode estar do lado de fora da caixa, não importa a sua energia. Não é necessário resolver a equação de Schrödinger para esse potencial, porque as funções de onda e as frequências quantizadas são iguais às da corda com ambas as extremidades fixas estudadas no Capítulo 16. Embora esse problema pareça artificial, é útil para algumas situações físicas, como a de um nêutron no interior de um núcleo, por exemplo.

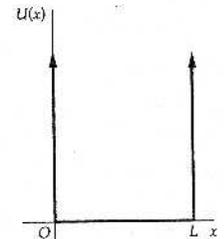


FIGURA 34-17 Energia potencial associada a um poço quadrado infinito. Para $x < 0$ e $x > L$, a energia potencial $U(x)$ é infinita. A partícula está confinada na região do interior do poço, dada por $0 < x < L$.

O Oscilador Harmônico

O modelo do oscilador harmônico é mais próximo da realidade do que o da partícula em uma caixa. Esse modelo se aplica a um corpo de massa m preso a uma mola de constante de força k ou a qualquer sistema que efetue pequenas oscilações em torno de uma posição de equilíbrio estável. A Figura 34-18 mostra a função energia potencial

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$$

onde $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ é a frequência natural do oscilador. De forma clássica, pode-se dizer que o corpo oscila entre $x = +A$ e $x = -A$. Sua energia total é dada por $E = \frac{1}{2}m\omega_0^2A^2$, que pode assumir qualquer valor não-negativo, inclusive o zero.

Na teoria quântica, a partícula é representada pela função de onda $\psi(x)$, determinada a partir da resolução da equação de Schrödinger para esse potencial. Funções de onda normalizáveis $\psi_n(x)$ ocorrem apenas para valores discretos da energia E_n dados por

$$E_n = (n + \frac{1}{2})hf_0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad 34-29$$

onde $f_0 = \omega_0/2\pi$ é a frequência clássica do oscilador. Observe, através da Figura 34-18, que os níveis de energia do oscilador harmônico são uniformemente espaçados, com a separação hf . Esse espaçamento difere bastante do espaçamento desigual dos níveis de energia da partícula em uma caixa mostrada na Figura 34-12. Quando um oscilador harmônico faz uma transição de um nível de energia n para o nível de energia imediatamente inferior $n - 1$, a frequência f do fóton emitido é determinada através da equação $hf = E_n - E_{n-1}$ (Equação 34-23). Aplicando essa equação, tem-se

$$hf = E_n - E_{n-1} = (n + \frac{1}{2})hf_0 - (n - 1 + \frac{1}{2})hf_0 = hf_0$$

A frequência f do fóton emitido coincide com a frequência clássica do oscilador.

O Átomo de Hidrogênio

No átomo de hidrogênio, um elétron está ligado a um próton pela força eletrostática de atração (discutida no Capítulo 21). Essa força varia com o inverso do quadrado da distância de separação (exatamente como a atração gravitacional entre a Terra e o Sol). A energia potencial do sistema elétron-próton varia então inversamente com a distância de separação (Equação 23-9). Como no caso da

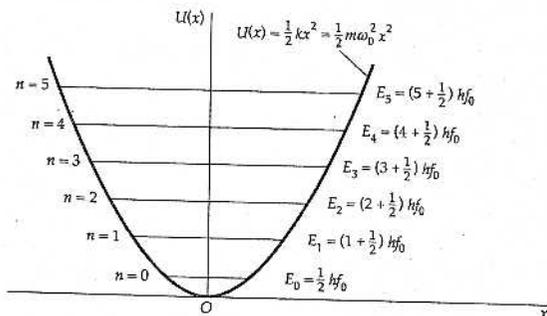


FIGURA 34-18 Função energia potencial de um oscilador harmônico. Os níveis de energia permitidos estão indicados pelos segmentos de reta horizontais, igualmente espaçados. Além disso, $\omega_0 = 2\pi f_0$.

energia potencial gravitacional, a energia potencial do sistema elétron-próton é igualada a zero se o elétron estiver a uma distância infinita do próton. Assim, para distâncias finitas a energia potencial é negativa. Como no caso de um corpo em órbita terrestre, o sistema elétron-próton é um sistema ligado se sua energia total for negativa. Da mesma forma que as energias de uma partícula em uma caixa e as de um oscilador harmônico, as energias nesse caso também são descritas por um número quântico n . Será visto no Capítulo 36 que as energias permitidas no átomo de hidrogênio são determinadas por

$$E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 34-30$$

A energia mais baixa corresponde a $n = 1$. A energia do estado fundamental é, então, $-13,6 \text{ eV}$. A energia do primeiro estado excitado é $-(13,6 \text{ eV})/2^2 = -3,40 \text{ eV}$. A Figura 34-19 mostra o diagrama de níveis de energia do átomo de hidrogênio. As setas verticais indicam as transições de um estado mais alto de energia para um estado mais baixo, com a emissão de radiação eletromagnética. Somente as transições que terminam no primeiro estado excitado ($n = 2$) envolvem diferenças de energia no intervalo da luz visível, de $1,77 \text{ eV}$ até $3,10 \text{ eV}$, conforme calculado no Exemplo 34-1.

Outros átomos são mais complicados do que o átomo de hidrogênio, porém seus níveis de energia são similares, de muitas formas, aos do hidrogênio. As energias do estado fundamental são da ordem de -1 eV a -10 eV , e muitas transições envolvem energias que correspondem a fótons no intervalo da luz visível.

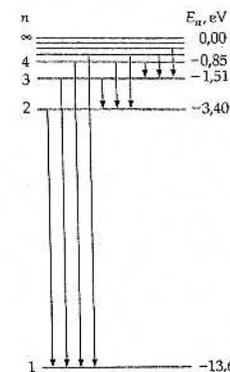


FIGURA 34-19 Diagrama de níveis de energia do átomo de hidrogênio. A energia do estado fundamental é $-13,6 \text{ eV}$. Conforme n tende a infinito, a energia tende a zero, que corresponde ao estado de maior energia possível.

RESUMO

1. Todos os fenômenos portadores de energia e de momento propagam-se como ondas e trocam energia como partículas.
2. O quantum de luz é chamado de fóton. A sua energia é $E = hf$, onde h é a constante de Planck.
3. A relação entre o comprimento de onda e o momento dos elétrons, fótons e outras partículas é dada pela relação de de Broglie, $\lambda = h/p$.
4. A quantização de energia nos sistemas ligados surge a partir das condições de onda estacionária que são equivalentes às condições de contorno da função de onda.
5. O princípio da incerteza é uma lei fundamental da natureza que impõe restrições teóricas sobre a precisão de medidas simultâneas da posição e do momento de uma partícula. Esse princípio é consequência das propriedades gerais das ondas.

Tópicos

Equações e Observações Importantes

Tópicos	Equações e Observações Importantes	
1. Constantes e Valores		
Constante de Planck	$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,136 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$	34-2
hc	$hc = 1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}$	34-5
Comprimento de onda Compton	$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2,43 \text{ pm}$	34-12