

Acetatos/apanhado para as aulas de

Introdução à Física Quântica

no âmbito da disciplina de Introdução à Física Quântica e à Relatividade
dos cursos de Lic. em Física e Química e em Eng. Física
(2005-2006)

José Figueiredo
Departamento de Física
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade do Algarve

Nota Prévia

Estes acetatos destinam-se a alunos de cursos da área de Física da Universidade do Algarve da disciplina de Introdução à Física Quântica e Relatividade. Não dispensam ou substituem, aliás recomendam vivamente, a frequência das aulas e a consulta (sempre que sejam consideradas insuficientes) de outras fontes, nomeadamente as citadas na bibliografia, servindo apenas para compensar a falta de aptidão para o desenho do docente e ao mesmo tempo facilitar a vida ao aluno, orientando-o no seu estudo.

Na leccionação das matérias, no contexto dos programas, procuro apresentar os assuntos mostrando os avanços e recuos característicos do processo científico. Atalho no que respeita à “catequização” e ao “papagueio”, esforçando-me por promover atitudes conducentes à resolução de novos problemas e à aprendizagem a partir do erro. Tenho presente que “ensinar é apenas ajudar a aprender”, e que “ensinar não é função vital, porque não tem o fim em si mesma; a função vital é aprender”, e que para aprender é necessário *aprender a pensar*, e ler, ler muito, pois «quase todo o conhecimento está escrito», meditando sobre o que se lê, enquanto se lê e após se ter lido.

Dado que “saber não equivale a ser-se muito esperto”, o discernimento e a capacidade de utilizar e coordenar a informação são a chave para o êxito, sem desconsiderar que é a quantidade de informação a que vamos tendo acesso que alimenta o nosso progresso pessoal. Nesta óptica, procuro que as minhas aulas e os elementos didáticos que coloco à disposição dos alunos, não sejam apenas uma obra de copista, mas derivem de um processo de real investigação, em que, dentro do possível, sejam apresentados os temas actualizados.

Espera-se que o aluno faça um trabalho sério, empenhado e seja um leitor atento. Após assistir às aulas, deve estudar todos os assuntos por si, tentar fazer os problemas e, se necessário, voltar a ler os textos relevantes ao problema. Deve ter sempre presente que a aprendizagem ocorre pensando criticamente nos assuntos e resolvendo problemas «antigos» e novos.

Convém referir que estes acetatos podem conter (e têm com certeza) erros involuntários (de dactilografia, de “copiar e colar”, ou de outra natureza). Agradece-se a comunicação dos mesmos, bem como o envio de comentários, para jlongras@ualg.pt.

O autor agradece ao Professor Robertus Potting toda a colaboração prestada.

Bom trabalho!

Gambelas, Março de 2006

O docente, José Figueiredo,

Departamento de Física da Universidade do Algarve, Campus de Gambelas, 8000-117 FARO, Portugal.

URL: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/>; <http://w3.ualg.pt/~jlongras/fm.html>; E-mail: jlongras@ualg.pt

Bibliografia

Bibliografia recomendada

- *Introdução à Física Quântica e à Relatividade*, Sebenta de Robertus Potting, Ualg 2005.
- *Física Atômica*, Max Born, Fundação Calouste Gulbenkian.
- O *Annus Mirabilis* de Einstein - cinco artigos que revolucionaram a Física, John Stachel, Gradiva, 2005.
- *Subtil é o senhor - Vida e pensamento de Albert Einstein*, Abraham Pais, Gradiva.
- *Física*, G. Gerthsen, Kneser, H, Vogel, Fundação Calouste Gulbenkian, 1998.
- *Modern Physics*, P. A. Tipler and R. A. Llewellyn, W. H. Freeman and Company, 2002.
- *Modern Physics*, F. J. Blatt, McGrawHill, 1992.
- *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*, 2nd Edition, R. Eisberg e R. Resnick, Wiley & Sons, 1985.
- *Modern Physics*, 2nd Edition, K. Krane, John Wiley & Sons, 1996.

Bibliografia complementar

- *A Evolução da Física: de Newton à Teoria dos Quanta*, Albert Einstein e Leopold Infeld, Livros do Brasil.
- *Albert Einstein*, Leopold Infeld, Publicações Europa-América.
- *A imagem da Natureza na Física Moderna*, Werner Heisenberg, Livros do Brasil.
- *Paradoxos e Realidade: Ensaio sobre os fundamentos da microfísica*, Franco Selleri, Fragmentos, 1990.
- *Cinco equações que mudaram o mundo*, Michael Guillen, Gradiva.
- *História da Ciência de 1543 ao presente*, John Gribbin, Europa-América, 2005.
- *Tempo & Espaço*, Visual Ciências, Verbo, 1994.
- *Matéria*, Visual Ciências, Verbo, 1994.
- *Energia*, Visual Ciências, Verbo, 1994.
- *Luz*, Visual Ciências, Verbo, 1994.

Sítios da Internet

- <http://www.wikipedia.org/> (figuras e imagens)
- <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html> (figuras e imagens)

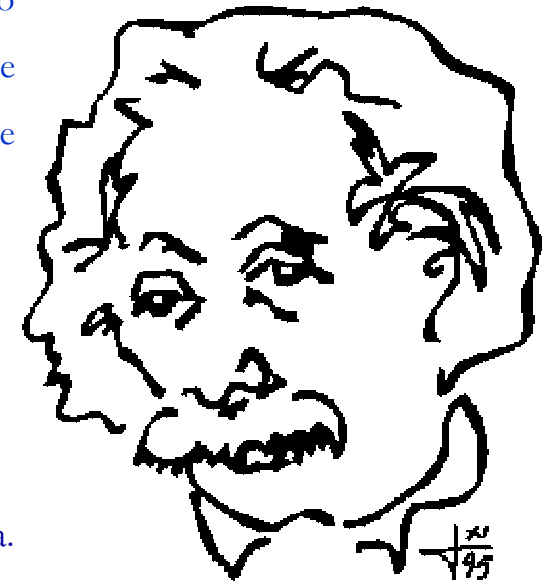
O *quantum* de luz: o fóton

“Princípio heurístico: se, com vista à dependência da entropia do volume, a radiação monocromática (de densidade suficientemente baixa) se comporta como um meio discreto constituído por *quanta* de energia de grandeza $R\beta\nu/N$, então tal facto sugere que se averigúe se as leis da produção e conversão da luz são também constituídas como se a luz fosse constituída por quanta de energia deste tipo.” Einstein, 1905.

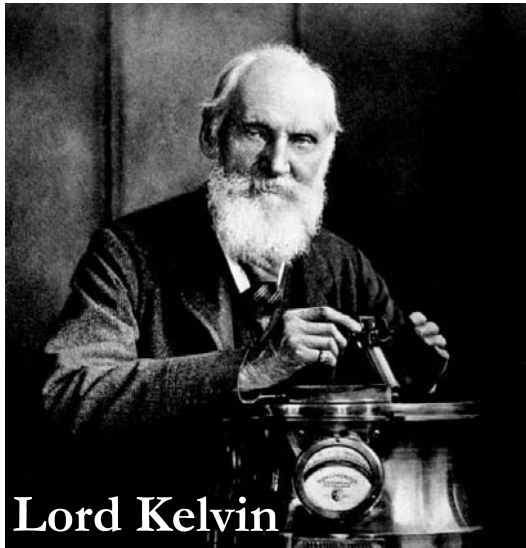
“Quanto mais êxito tem a teoria quântica, mais tonta parece.” Einstein, 1912

“Deste modo, [a existência dos] quanta de luz é praticamente certa.” Einstein, 1916

Subtil é o senhor - Vida e pensamento de Albert Einstein, Abraham Pais, Gradiva.



Final do séc. XIX: o fim da Física à vista?



Lord Kelvin



Segundo Lord Kelvin, havia “duas pequenas nuvens” no horizonte da Física:

- os resultados negativos da experiência de Michelson e Morley,

- e a dificuldade em explicar a distribuição de energia na radiação do corpo negro.

Resolvido o “problema” da Mecânica, com a Relatividade, “faltava” compreender a interacção da radiação e com a matéria.

Efeitos/formas de interacção da radiação com a matéria

■ Radiação não ionizante

- Espalhamento elástico (o fóton emitido “apenas” muda de direcção)
- Espalhamento inelástico (*excitação* do átomo, fóton emitido tem ν menor)
- Absorção ressonante (*excitação* do átomo, não há fóton emitido - o fóton incidente é absorvido)
- Fluorescência (a energia do fóton *excita* o átomo para um estado muito superior ao fundamental)
- Fosforescência [fósforos, «portadores de luz»] (o tempo de vida do estado *excitado* é da ordem de ms ou superior – estado metaestável)
- Emissão estimulada (quando um átomo se encontra no estado *excitado*, e um fóton com energia igual à diferença entre o estado *excitado* e um estado *menos excitado* ou o estado fundamental, sendo emitido um fóton sem que o fóton incidente seja absorvido – laser e maser)

■ Radiação ionizante

- Efeito fotoeléctrico (quando a energia do fóton é da ordem da energia de ionização do átomo)
- Espalhamento de Compton (quando a energia do fóton incidente é muito superior à energia de ionização do átomo)
- Produção de pares de partículas (a aniquilação de fótons dá origem a duas partículas materiais)

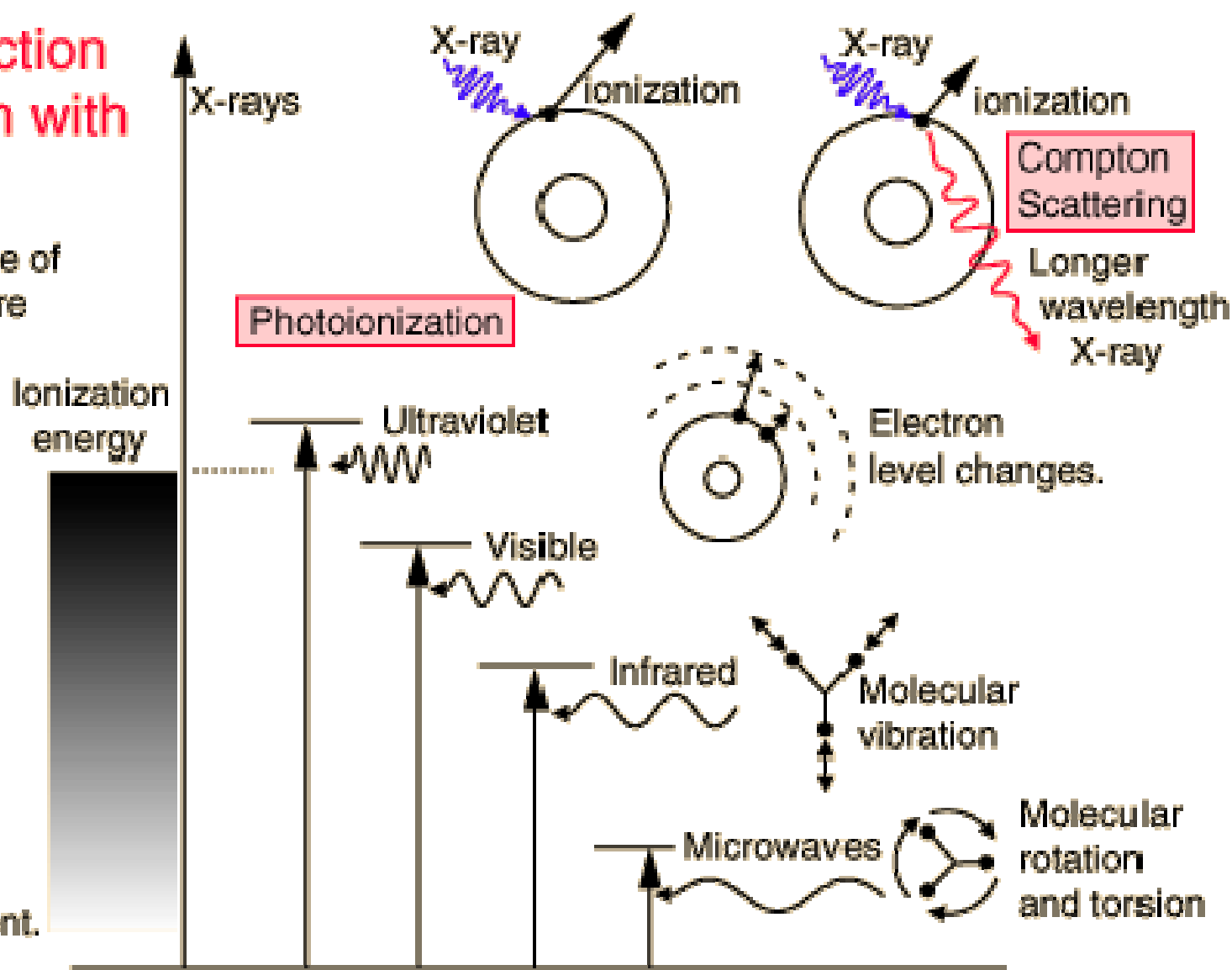
Formas de interacção entre a radiação e a matéria

The interaction of radiation with matter.

Click on any type of radiation for more information.

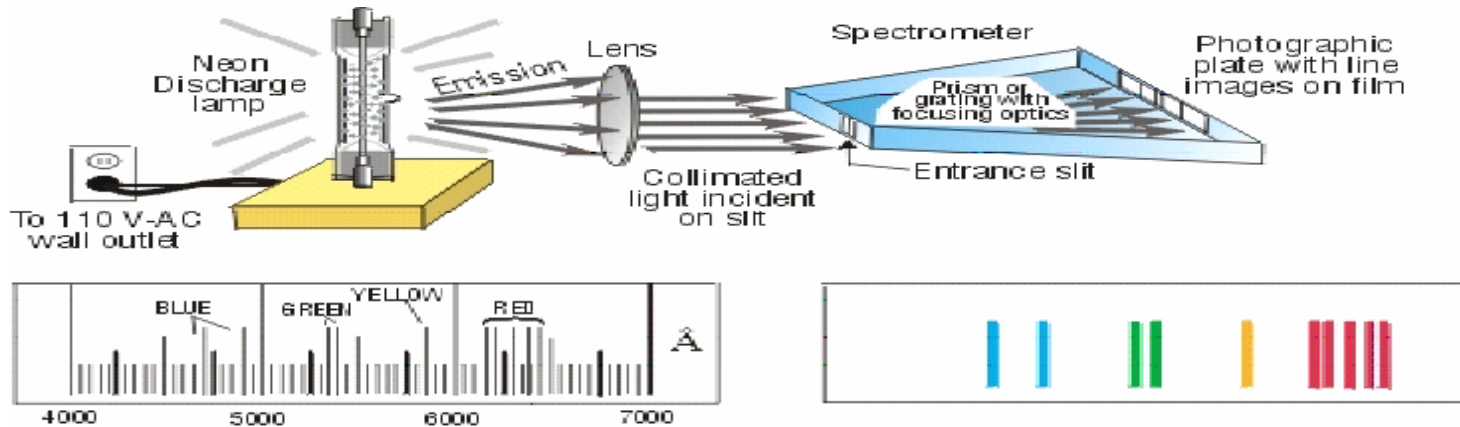
Large number of available energy states, strongly absorbed.

Small number of available states, almost transparent.

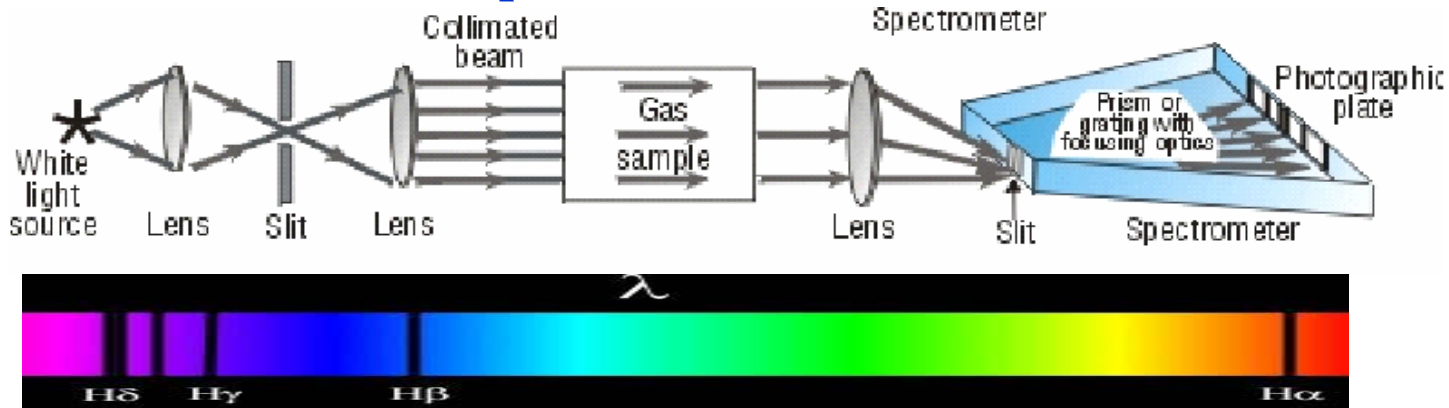


Espectroscopia: espectros de emissão e absorção de gases

Espectro de Emissão



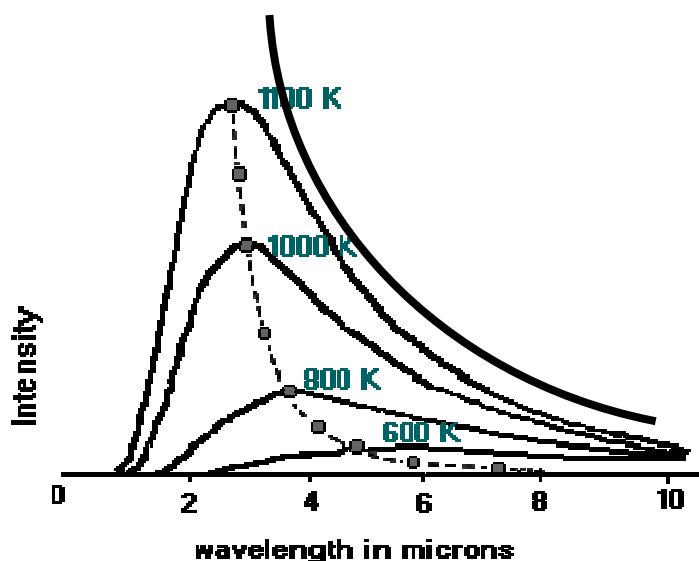
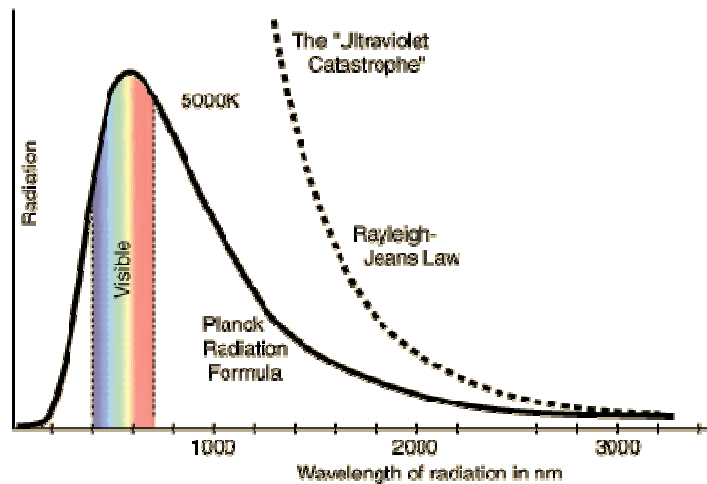
Espectro de Absorção



Cada elemento químico no estado gasoso emite (ou absorve) luz formando um espectro descontínuo de riscas. **Mas porque é que surgem estas riscas?**

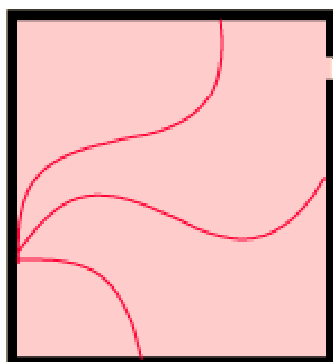
Problema “maior” da Física no início do séc. XX

Como explicar a distribuição de energia na radiação do corpo negro.



- **Corpo negro:** radiador integral, substância que absorve completamente qualquer radiação que nele incida (o negro-de-fumo aproxima-se bastante do corpo negro ideal);
- Uma cavidade fechada, a uma dada temperatura (“**corpo negro**”), com uma pequena abertura, emite um espectro de radiação contínuo.
- A Física Clássica prevê que a cavidade deve emitir mais radiação de menor comprimento de onda do que de maior comprimento de onda. **Porém, não era isso o que se observava.**

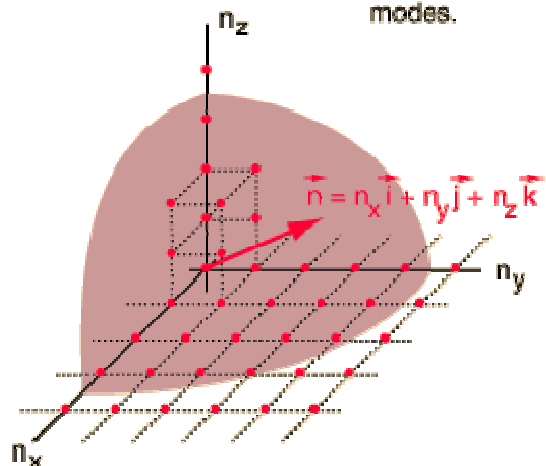
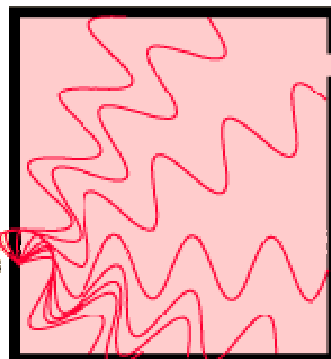
Radiação do corpo negro: modos da cavidade



Number of modes per unit frequency per unit volume

$$\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$$

For higher frequencies you can fit more modes into the cavity. For double the frequency, four times as many modes.



$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \frac{4L^2}{\lambda^2}$$

Equação de onda

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$$

Solução possível

$$E = E_0 \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \sin \frac{n_3 \pi z}{L} \sin \frac{2\pi ct}{\lambda}$$

com $\left[\frac{n_1 \pi}{L} \right]^2 + \left[\frac{n_2 \pi}{L} \right]^2 + \left[\frac{n_3 \pi}{L} \right]^2 = \left[\frac{2\pi}{\lambda} \right]^2$

"volume" of n's = $\frac{4\pi}{3} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{3/2}$

Número de modos numa cavidade de volume $V=L^3$:

$$\text{Number of modes} = N = \frac{\pi}{3} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{3/2} = \frac{8\pi L^3}{3\lambda^3}$$

Densidade espectral de modos

(número de modos por unidade de volume e de frequência de radiação electromagnética numa cavidade)

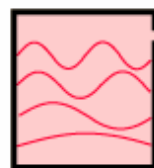
$$\rho(\nu) = \frac{dn_s}{d\nu} = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2$$

$$\rho(\lambda) = \frac{dn_s}{d\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^4}$$

onde n_s é o número de modos com frequência (comprimento de onda) entre ν e $\nu+d\nu$, (λ e $\lambda+d\lambda$), por unidade de volume

Teoria clássica vs teoria quântica

Radiation modes in a hot cavity provide a test of quantum theory



	#Modes per unit frequency per unit volume
CLASSICAL	$\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$
QUANTUM	$\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$

Atenção:

a densidade de energia espectral é $4/c \times$ a emitância espectral.

(ver, por exemplo, *Óptica*, Eugene Hetch, Fundação Calouste Gulbenkian, 1991.)

Radiação do corpo negro: hipótese de Planck

Teoria clássica: energia “contínua”

Energia média por modo é $\langle E \rangle = \frac{1}{kT} \int_0^{\infty} E e^{-E/kT} dE = \frac{1}{kT} (kT)^2 = kT$

A energia na cavidade por unidade de volume e por unidade de frequência (densidade de energia espectral) é:

Hipótese quântica (Planck, 1900, de forma *ad hoc*)

A cavidade emite/absorve energia em “pacotes”:

$$E = nh\nu$$

frequency of radiation, sometimes written as f giving expression $E = hf$.
Quantum energy of a photon.
 $h = \text{Planck's constant} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Joule}\cdot\text{sec} = 4.136 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$

$$S_{\lambda} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T$$

Energia média por modo é: $\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$; Energy per unit volume per unit wavelength

$$\left[\sum_{n=0}^{\infty} x^n = (1-x)^{-1}, (0 < x < 1) \right]$$

$$S_{\lambda} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

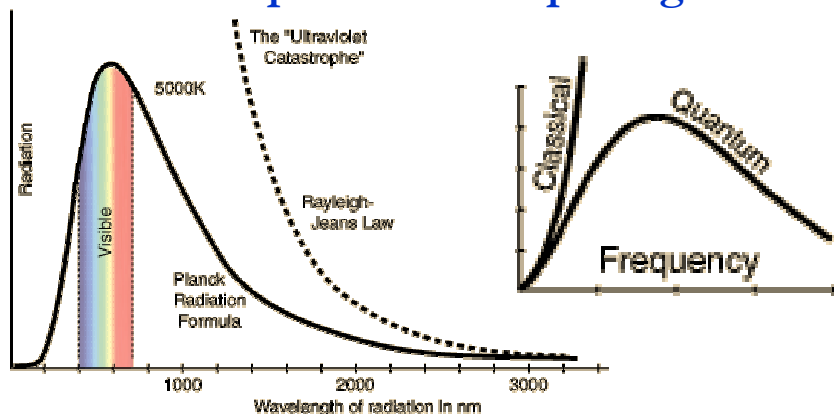
Energy per unit volume per unit frequency

$$S_{\nu} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Densidade de energia espectral

(Energia radiante por unidade de volume - densidade de energia - por unidade de comprimento de onda ou unidade de frequência)

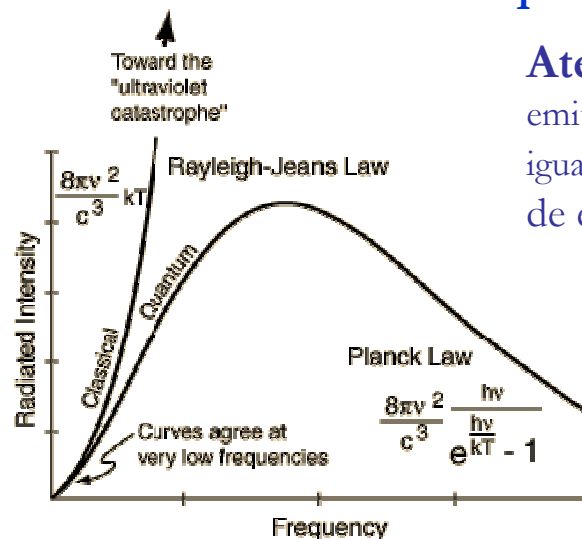
Irradiância espectral do corpo negro



Teoria clássica vs teoria quântica

Atenção:

emitância espectral $S(\lambda)$ é igual a $c/4 \times$ a densidade de energia espectral S_{λ} :

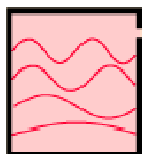


$$S(\lambda) = \frac{c}{4} S_{\lambda}$$

(«Ver» a origem do factor $c/4$).

Teoria clássica vs teoria quântica

Radiation modes in a hot cavity provide a test of quantum theory



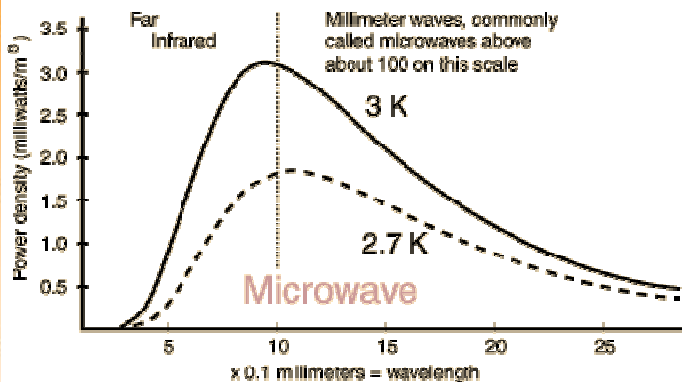
	#Modes per unit frequency per unit volume	Probability of occupying modes	Average energy per mode
CLASSICAL	$\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$	Equal for all modes	kT
QUANTUM	$\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$	Quantized modes: require $h\nu$ energy to excite upper modes, less probable	$\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$

Emitância espectral $S(\lambda)$, $S(\nu)$: potência radiada por unidade de área e por unidade de comprimento de onda/frequência.

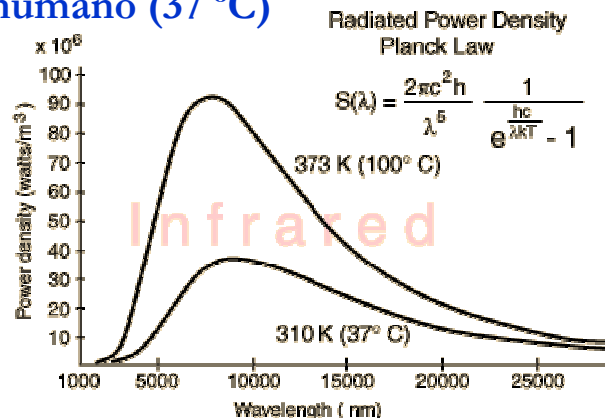


Exemplos de curvas de radiação de vários “corpos negros”

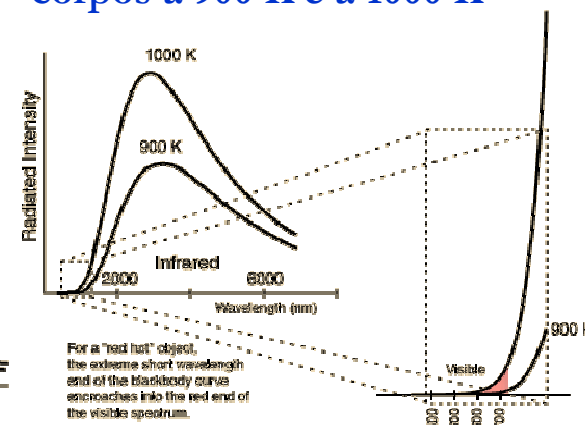
Radiação cósmica de fundo
~3 K e ~2,7 K



Emitância espectral:
corpo a 100 °C e corpo humano (37 °C)

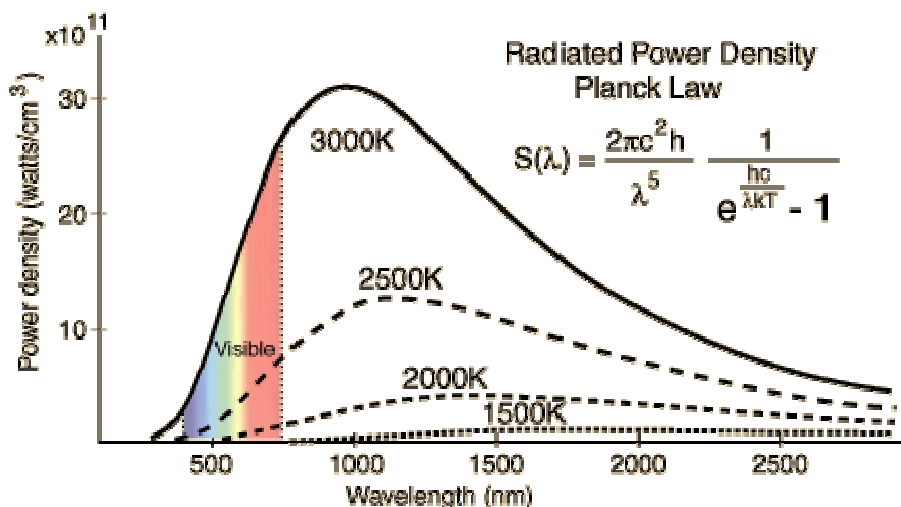


Emitância espectral
corpos a 900 K e a 1000 K

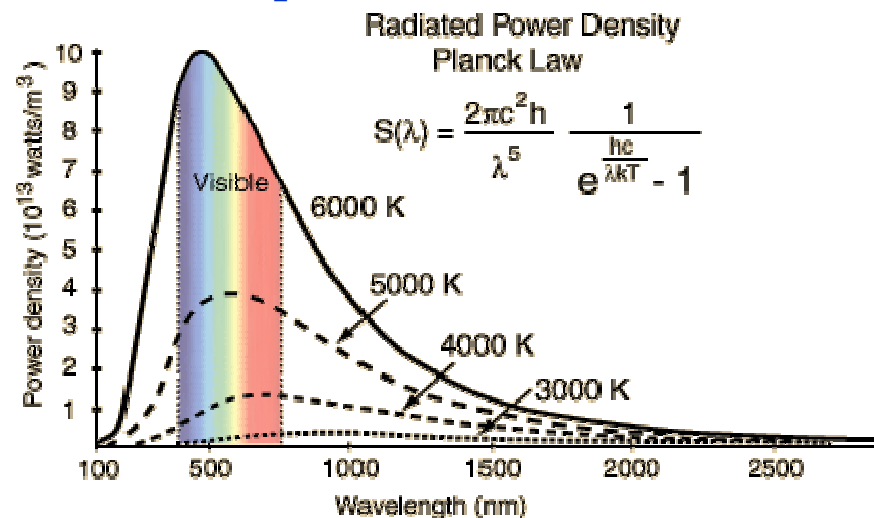


Atenção: emitância espectral é igual a c/4 × a densidade de energia espectral

Emitância espectral de um corpo a ~3000 K



Emitância espectral do Sol

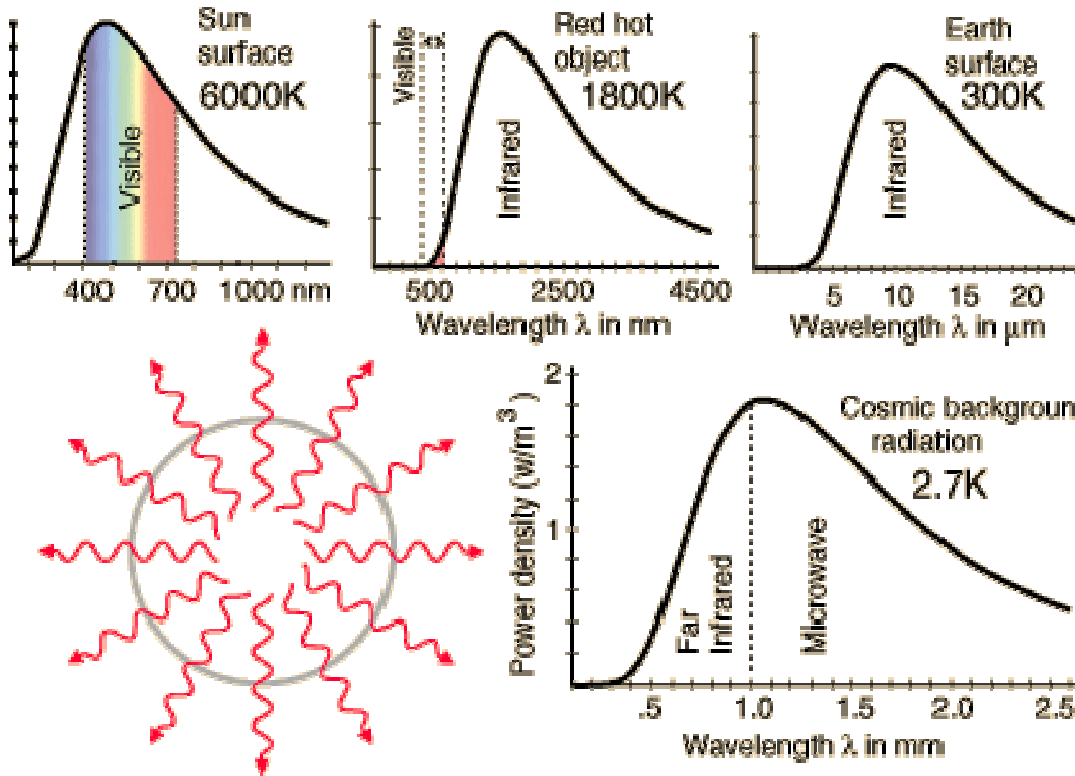


1000K
2000K
3000K
4000K
5000K
6000K
7000K
8000K
9000K
10000K

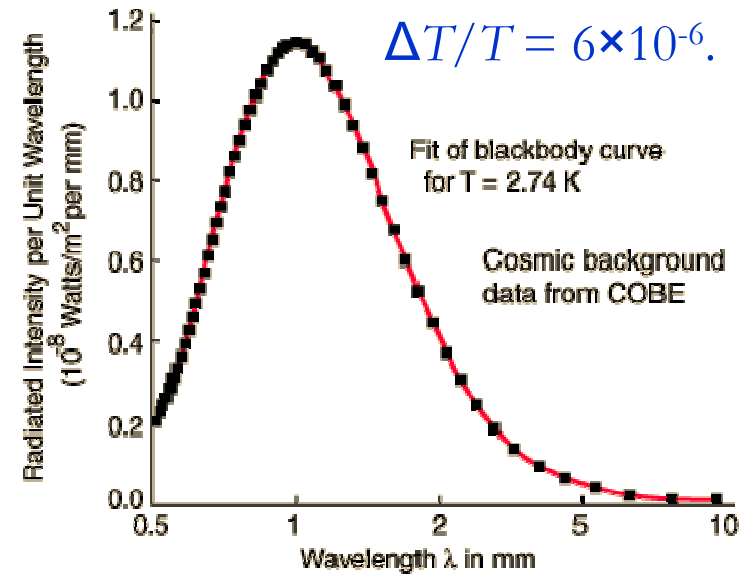
IFQR 2005-2006 DF-FCT-ULAG

José Figueiredo

Radiação cósmica de fundo, ~2,725 K



Cosmic Background Explorer satellite (COBE), 1992



J. C., et al., Astro. Jour. 354, L37 (1990).

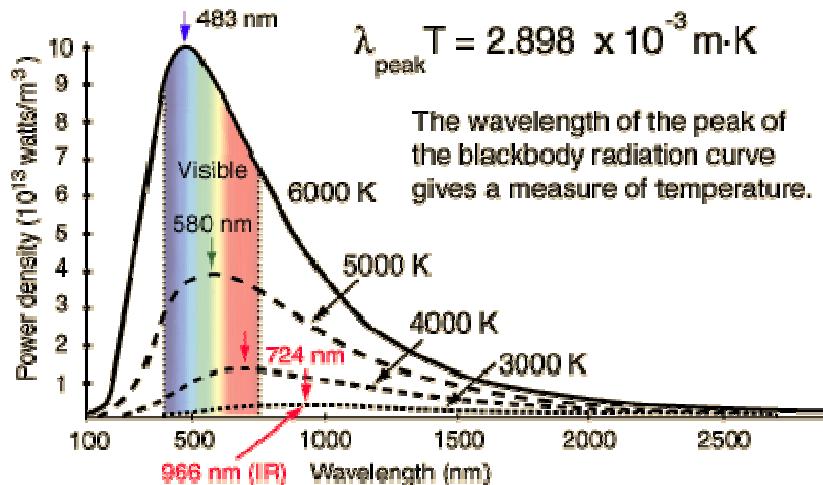
Reference:	Wavelength	Energy
RF	>1 m	$<10^{-5}$ eV
microwave, mm	1 - .0003 m	$10^{-5} - 10^{-2}$ eV
IR	.0003 - 700 nm	$10^{-2} - 1.7$ eV
visible	700 - 400 nm	1.77 - 3.1 eV
UY	400 - 10 nm	3.1 - 120 eV
X-ray	<10 nm	>120 eV

Ponto de transparência: altura em que a matéria se separou da radiação.

As flutuações na temperatura da radiação cósmica de fundo, $\Delta T/T \approx 6 \times 10^{-6}$, são anteriores ao ponto de transparência.

Corpo negro: leis de Wien e de Stefan-Boltzmann. Estrelas

Lei do deslocamento de Wien



Lei de Stefan-Boltzmann (emitância, W/m^2)

A emitância radiante (potência por unidade de área, $E(T)=P/A$) das paredes de uma cavidade, em cujo interior a radiação de corpo negro está em equilíbrio, obtém-se a partir de $S(\lambda)$:

$$\frac{dP}{d\lambda} \frac{1}{A} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)} \rightarrow \frac{P}{A} = 2\pi hc^2 \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)}$$

$$x = \frac{hc}{\lambda kT} \quad dx = \frac{-hc}{\lambda^2 kT} d\lambda \rightarrow \frac{P}{A} = \frac{2\pi (kT)^4}{h^3 c^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{(e^x - 1)} dx$$

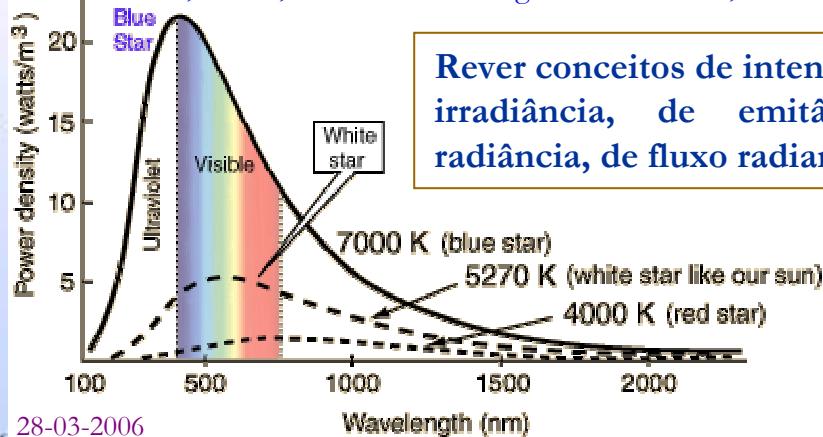
$$\frac{P}{A} = \frac{2\pi^5 k^4}{15 h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4 \quad \int_0^\infty \frac{x^3}{(e^x - 1)} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

$\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W}/\text{m}^2\text{K}^4$ é a constante de Stefan-Boltzmann.

Estrelas azuis, brancas e vermelhas

Classificação das estrelas em função da temperatura da sua superfície:

- O - 30,000 - 60,000 K [Blue stars](#) B - 10,000 - 30,000 K [Blue-white stars](#)
- A - 7,500 - 10,000 K [White stars](#) F - 6,000 - 7,500 K [Yellow-white stars](#)
- G - 5,000 - 6,000 K [Yellow stars \(like the Sun\)](#)
- K - 3,500 - 5,000K [Yellow-orange stars](#) M - < 3,500 K [Red stars](#)

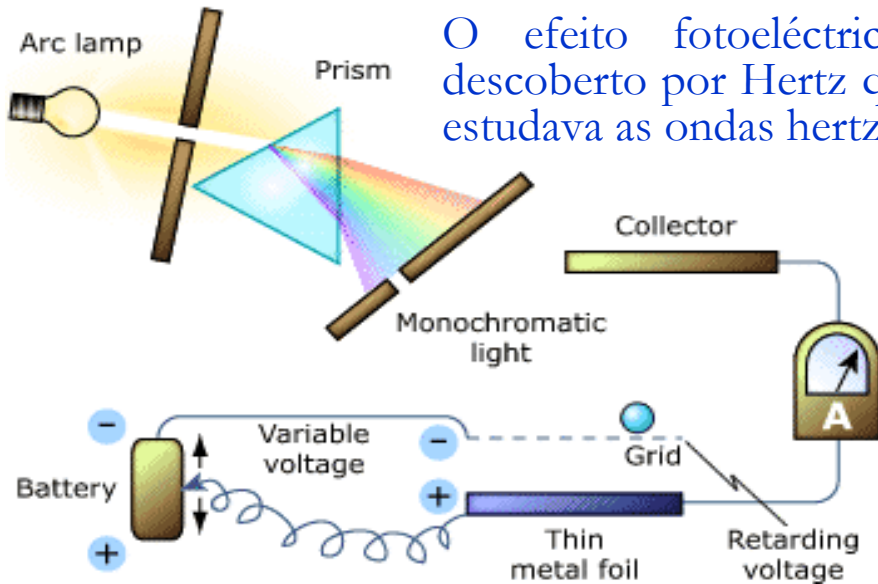


Exercícios de aplicação da lei de Stefan-Boltzmann:

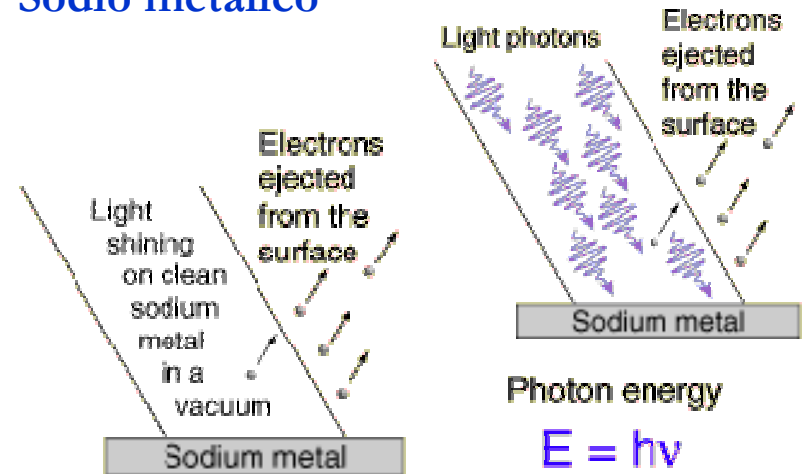
1. Durante a noite, a superfície da Terra perde energia por radiação. Assuma que a temperatura do solo é 10°C , e que este se comporta como um corpo negro. Qual é a taxa de perda de energia por metro quadrado? Se a noite estiver clara, o solo arrefece mais fortemente, podendo formar-se geada, do que no caso de uma noite com elevada nebulosidade, formando-se «apenas» orvalho. Porquê?
2. Os astrónomos às vezes determinam o tamanho de uma estrela pela lei de Stefan-Boltzmann. Determine o raio da estrela Capela a partir dos seguintes dados: fluxo da luz da estrela que chega à Terra $1,2 \times 10^{-8} \text{ W}/\text{m}^2$; distância à estrela $4,3 \times 10^{17} \text{ m}$; temperatura na «superfície» da estrela 5200 K . Assuma que a estrela se comporta como um corpo negro.

Efeito fotoelétrico (Hertz e Einstein)

O efeito fotoelétrico foi descoberto por Hertz quando estudava as ondas hertzianas.



Sódio metálico



explains the experiment and shows that light behaves like particles.

Einstein, 1905

“A energia da luz é descontinuamente distribuída no espaço. ... sendo composta por um número finito de *quanta* de energia, localizados em pontos do espaço, que se movem sem se dividirem e podem ser absorvidos ou gerados apenas como unidades completas.” Estas unidades completas foram mais tarde designadas **fotoões** [fotão, «quantum» de radiação cuja energia é igual ao produto da frequência da radiação pela constante de Planck (Do gr. phōs, photós, «luz» + -ão)].

$$E = h\nu$$

frequency of radiation, sometimes written as f giving expression $E = hf$.
 Quantum energy of a photon.
 $h = \text{Planck's constant} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ joule}\cdot\text{sec} = 4.136 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$

onde $E \equiv$ energia do quanta, $h \equiv$ constante de Planck, $\nu \equiv$ frequência da radiação incidente.

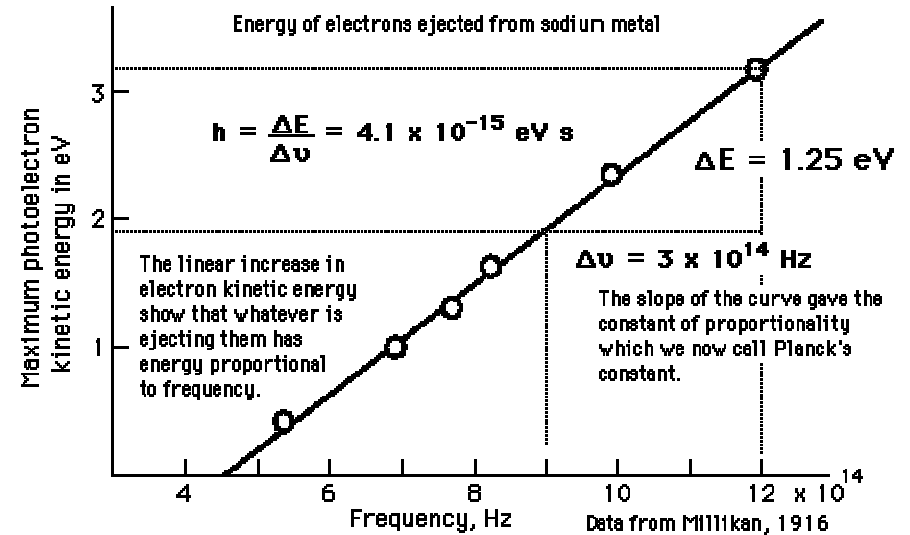
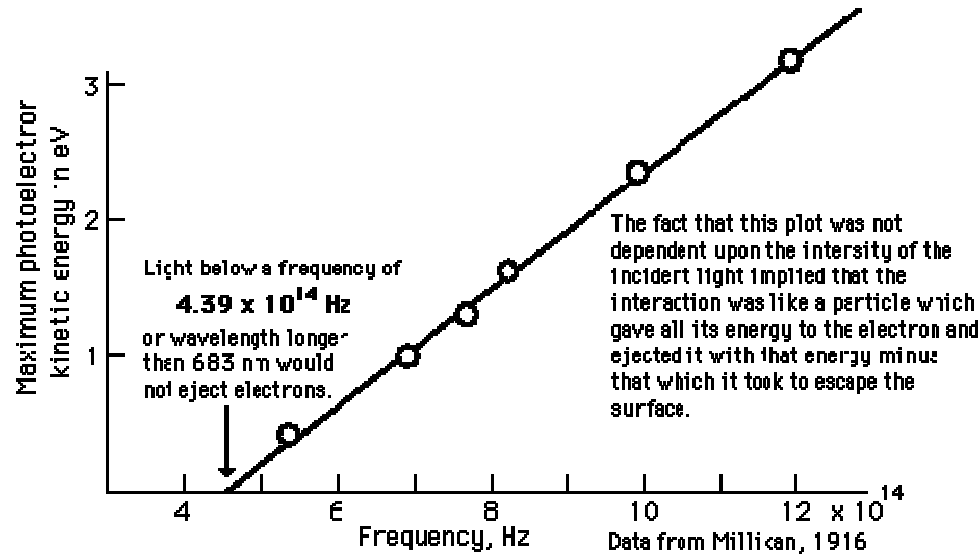
Relação de Einstein, 1905*: $E = h\nu - P$,
 onde E representa a energia do foto-electrão, h a constante de Planck, ν a frequência do quanta de radiação incidente e P a função de trabalho do material (energia necessária para «arrancar» o electrão do material), adiante representada por W .

*Ver artigo “Sobre um ponto de vista heurístico relativo à produção e transformação da luz”, A. Einstein, *Annalen der Physik*, 17, 132-148 (1905).
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/Einstein-5°Artigo.pdf>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

Efeito fotoelétrico (Einstein e Millikan)

Para o sódio metálico



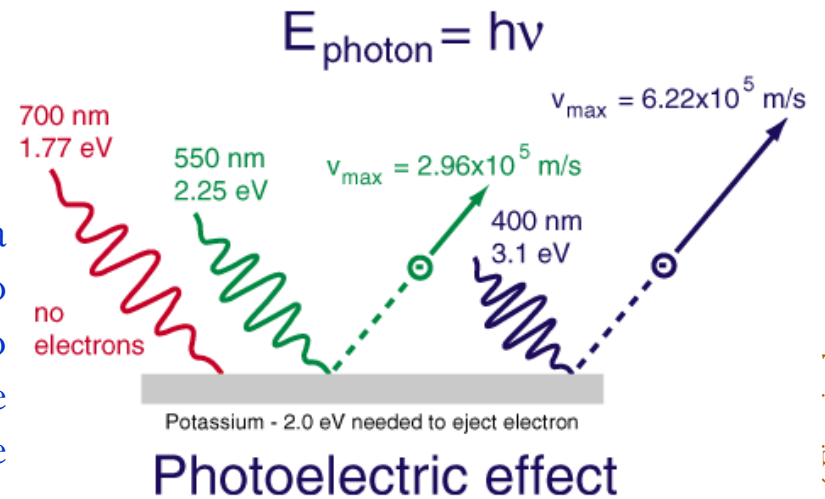
Equações de Einstein para o efeito fotoelétrico

$$E_{c,\text{máx}} = h\nu - W, \quad E_{c,\text{máx}} = \frac{1}{2} m_e v_{e,\text{máx}}^2$$

$$eV_{0,p} = E_{c,\text{máx}} = h\nu - W \quad (W : \text{função de trabalho})$$

O mínimo de energia requerida para ejetar um electrão de uma superfície designa-se **função de trabalho** de extracção do material, W . O limiar de energia para o sódio metálico corresponde ao comprimento de onda 683 nm. Usando este valor de comprimento de onda, obtém-se através da relação de Planck, para a função de trabalho do sódio 1,82 eV.

Caso do potássio metálico



Capacidade calorífica específica dos sólidos

Física Clássica

Admitindo que num sólido elementar os átomos executam oscilações em torno das suas posições médias na rede cristalina, cada um destes osciladores deve energias cinética e potencial, iguais a $3 \times k_B T/2$, de acordo com o **teorema da equipartição de energia**. Neste caso, a capacidade calorífica específica, $C_V = (\partial E / \partial T)_V$, de uma mole de átomos é **independentemente da temperatura** e igual a

$$C_V = 3N_A k_B = 3R = 24,94 \text{ J/Kmol:}$$

lei de Dulong-Petit. Tendo em conta a regra de Neumann-Kopp (“o «calor» molar é a soma dos «calores» atômicos”), verifica-se que, em geral, a capacidade calorífica dos sólidos depende da temperatura. De facto a C_V da maioria dos sólidos tende para 0 quando T pende para 0 K.

“Todo o grau adicional de complexidade que atribuímos à molécula somente pode aumentar a dificuldade de reconciliar os valores observados do calor específico com os calculados. Acabei de colocar perante vós o que considero a maior dificuldade jamais sentida pela teoria molecular.” J. C. Maxwell [A. Pais]

Modelo de Debye: Para resolver o problema, Debye considerou que a rede pode oscilar em muitas frequências. As oscilações nos sólidos não são mais que ondas sonoras. O **fonão** é o *quantum* de vibração elástica de uma rede cristalina (Do gr. phoné, «voz; som», pelo fr. phonon, «fonão»). Debye assumiu que o conteúdo energético de um sólido está *preponderantemente* contido nas ondas sonoras estacionárias «admitidas» no cristal, o que define os comprimentos de onda e, portanto, as frequências permitidas. Assim, obtém-se:

$$U = \langle E \rangle = 3N \int_0^{E_{\max}} \frac{E}{e^{E/k_B T} - 1} dE = \frac{9Nk_B T^4}{T_D^3} \int_0^{T_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{9Nk_B T^4}{T_D^3} \frac{\pi^4}{15}$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{4\pi^4}{5} 3R \frac{T^3}{T_D^3} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \text{ com } T_D = \frac{h\nu_{\max}}{k_B} \text{ (temperatura de Debye)}$$

Modelo de Einstein

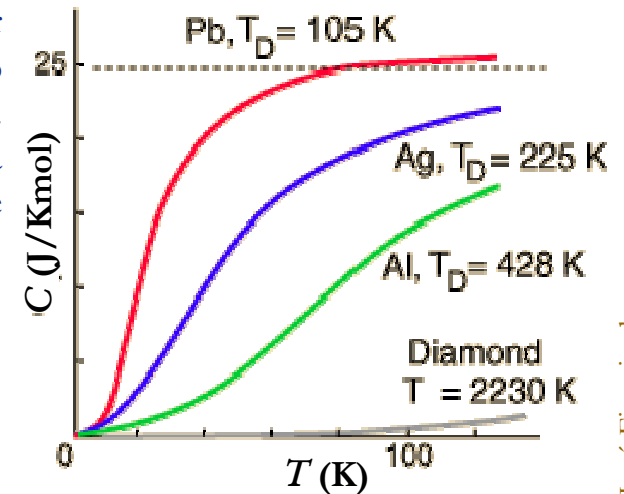
Einstein sugeriu que a energia dos osciladores está **quantizada**, i.e., a energia de cada oscilador só pode ser um múltiplo inteiro de $h\nu$, e todos os pontos da rede vibram harmonicamente com uma frequência única, ν , em torno das posições de equilíbrio. Assim, a energia média de uma mole de osciladores é dada por:

$$U = \langle E \rangle = 3N_A \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \rightarrow C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 3N_A k_B \left(\frac{h\nu}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{h\nu/k_B T}}{(e^{h\nu/k_B T} - 1)^2}$$

$$C_V \xrightarrow{T \gg T_E} 3N_A k_B \left(1 + \frac{T_E}{T} \right) \approx 3R, \quad T_E \equiv \frac{h\nu}{k_B} \text{ (temperatura de Einstein)}$$

$$C_V \xrightarrow{T \ll T_E} 3R \left(\frac{T_E}{T} \right)^2 e^{-T_E/T} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0 \quad \text{(Ver, por exemplo, apontamentos de FES)}$$

Há uma razoável concordância entre o modelo e o comportamento de vários sólidos com a temperatura. Contudo, verificou-se que C tende mais rapidamente para zero que o observado experimentalmente.



Efeito de Compton

A dispersão de fótons de alta energia, raios x, pela matéria em que os fótons dispersos têm menor energia que os fótons incidentes designa-se dispersão de Compton. Este efeito foi observado pela primeira vez por Arthur Compton em 1922. Compton verificou que o comprimento de onda dos fótons dispersos depende apenas do ângulo de dispersão.

Compton explicou o efeito como uma colisão entre o fóton de radiação x incidente e um electrão da matéria dispersante. Um acontecimento desta natureza é completamente caracterizado pela conservação da energia e de momento, se for conhecido o ângulo de dispersão. O electrão pode estar em repouso antes do “choque”. A energia cinética e o momento do electrão são “retirados” do fóton:

$$h \frac{c}{\lambda_i} + E_i^{\text{el}} = h \frac{c}{\lambda_f} + E_f^{\text{el}}$$

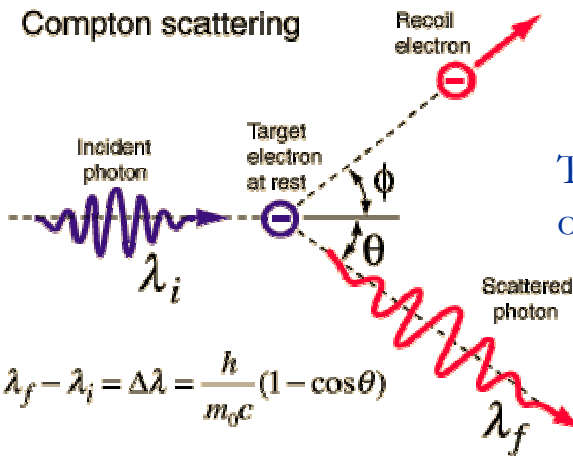
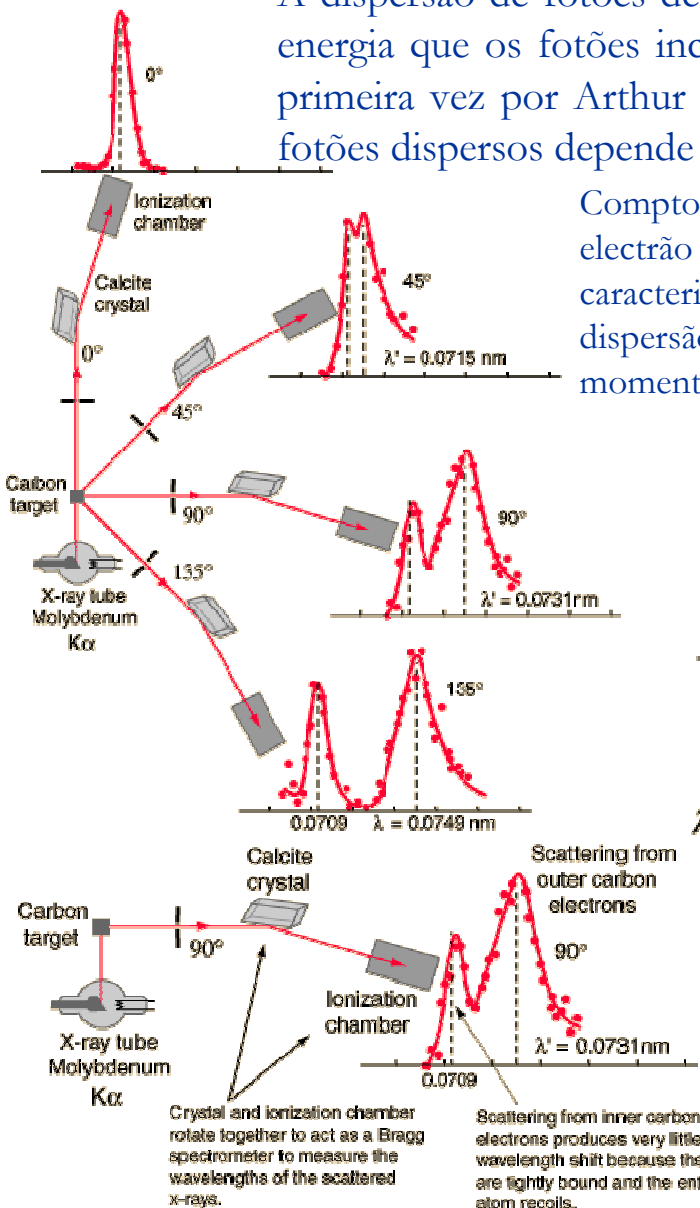
$$\vec{p}_i^{\text{fo}} + \vec{p}_i^{\text{el}} = \vec{p}_f^{\text{fo}} + \vec{p}_f^{\text{el}}$$

Tratando o *choque* «relativisticamente», obtém-se, após um cálculo moroso,

$$\lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta)$$

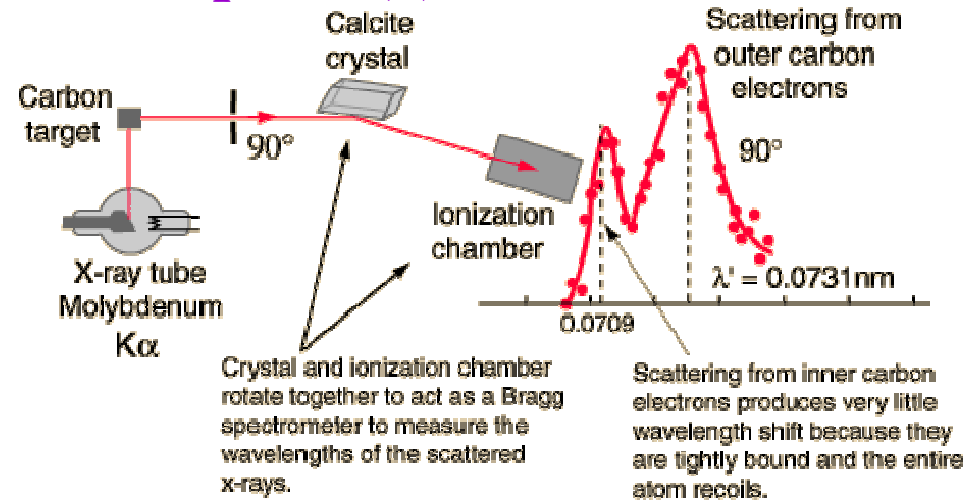
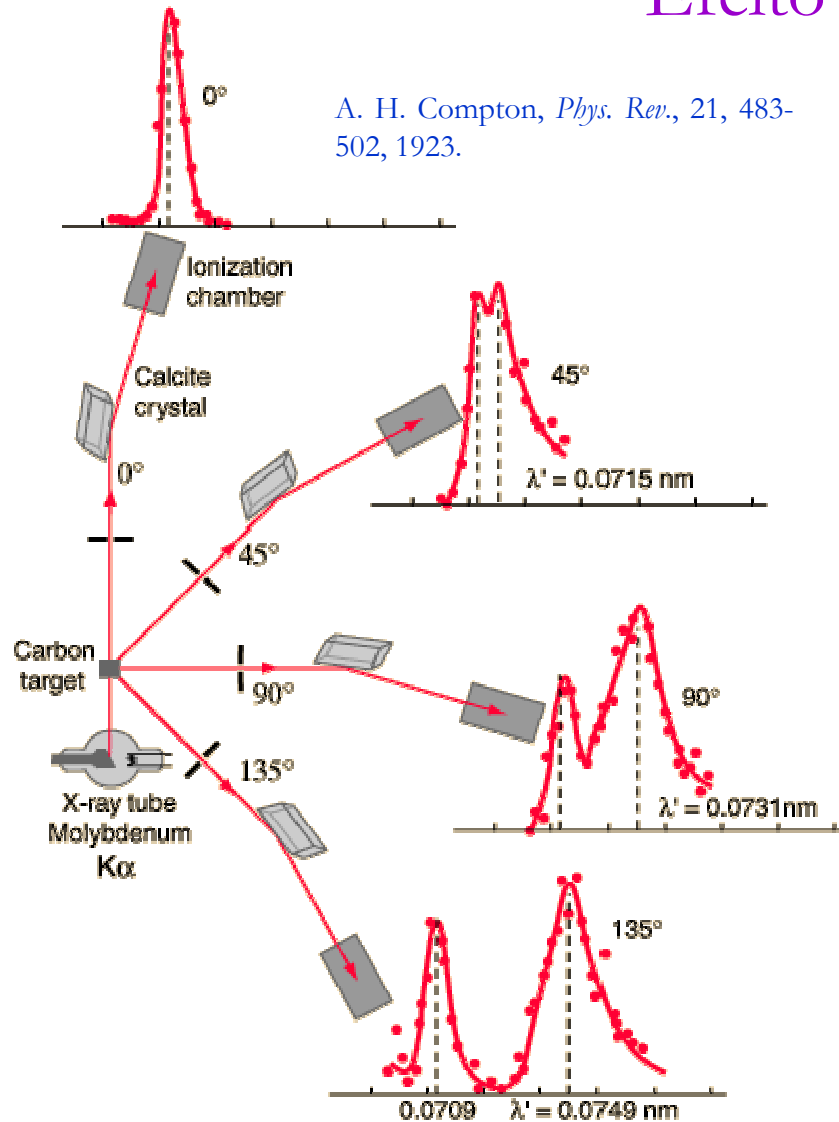
$$\lambda_C = \frac{h}{m_0 c} \quad (\text{comprimento de onda de Compton})$$

O efeito de Compton mostra a validade do conceito de fóton e a validade dos princípios da conservação da energia e de momento na interacção entre o *quantum* da radiação e uma partícula elementar, «exigindo» um tratamento relativista. Para “ficar convencido”, trate a colisão como sendo um caso clássico, e considere que o fóton incidente tem comprimento de onda h/mc . Justifique a necessidade do tratamento relativista.

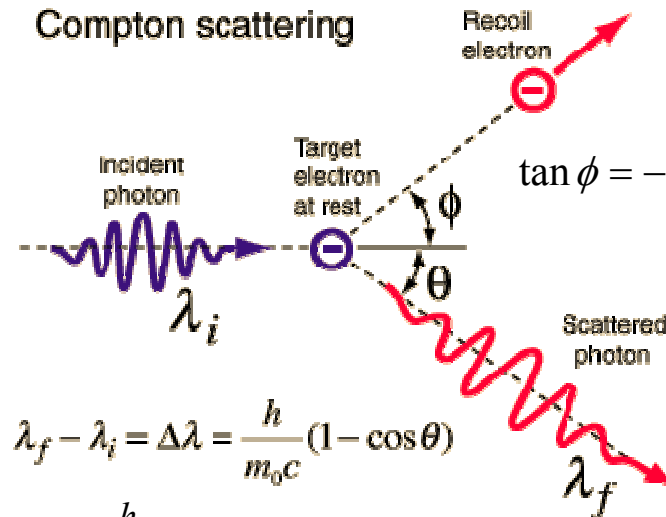


Efeito de Compton (2)

A. H. Compton, *Phys. Rev.*, 21, 483-502, 1923.



Compton scattering



$$\tan \phi = - \left[\left(1 + \frac{h\nu_i}{m_0c^2} \right) \tan\left(\frac{1}{2} \theta\right) \right]^{-1}$$

A. H. Compton e A. W. Simon, *Phys. Rev.*, 97, 1710, 1925.

$$\lambda_f - \lambda_i = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda_C = \frac{h}{m_0c} \text{ (comprimento de onda de Compton)}$$

Ter presente que o fóton espalhado não é o mesmo que o fóton incidente: o fóton incidente é absorvido pelo átomo, sendo emitido um novo fóton com energia menor que o fóton incidente. Tanto quanto se sabe um fóton não pode «perder» parte da sua energia.

Nota: tem havido especulações ocasionais de que o fóton poderá ter massa não nula. O limite superior para a massa do fóton é 8×10^{-52} kg (L. Davis, A. S. Goldhaber e M. Nieto, *Phys. Rev. Lett.*, 35, 1402, 1975). Ao longo deste texto a massa do fóton é tomada como exactamente nula. A. Pais.

Lei de Planck e a cosmologia

Porções da energia do Universo devidas à matéria e à radiação

- Até recentemente, pensava-se que o universo era basicamente constituído por matéria. Porém, uma das ideias associada com o modelo do Big Bang é que quanto mais recuamos no tempo, mais o universo era *dominado* por fótons: nos princípios do Universo, a energia devida às partículas com *massa de repouso* desempenhava um papel bem menor na evolução do Universo. A quantidade de energia na forma de radiação no Universo actual pode ser estimada usando a lei de Stefan-Boltzmann, se considerarmos o universo preenchido pela radiação cósmica de fundo à temperatura 2,7 K. Assim, a densidade de energia em equilíbrio é dada por $u=(4/\delta)\sigma T^4 \sim 0,25 \text{ MeV/m}^3$.
- Parece também existir uma energia de fundo associada aos neutrinos que parece ter uma temperatura perto de 1,9 K, estimando-se que existem cerca de 7/4 mais neutrinos que fótons, de acordo com o modelo “standard” do Universo. Tratando os neutrinos como partículas com «massa de repouso» igual a zero, obtém-se uma densidade de energia $\sim 0,11 \text{ MeV/m}^3$. A densidade de energia total devida aos neutrinos e aos fótons é cerca de $u \sim 0,4 \text{ MeV/m}^3$.
- As estimativas correntes da quantidade de massa no Universo é $\rho_{\text{massa}}/c^2 \sim 10^{11} \text{ massas solares/Mpc}^3 \sim 0,5 \text{ GeV/m}^3$, de forma que as correntes estimativas da quantidade de energia associada à matéria é cerca de mil vezes superior à energia da radiação.

Temperatura, tempo de expansão e densidade de energia do Universo no modelo “standard” do Big Bang

- No modelo do Big Bang da expansão do Universo, o tempo de expansão pode ser obtido a partir do parâmetro de Hubble: $t_{\text{exp}}=1/H(t)$. O parâmetro de Hubble pode ser relacionado com o modelo de expansão usando a equação de Friedmann $t_{\text{exp}}=1/H(t)=\sqrt{(3c^2/8\pi G u)}$. No estágio inicial de expansão do universo, a densidade de energia era dominada pela radiação, sendo a contribuição da matéria desprezável. Nestas condições, a densidade de energia na equação de Friedmann pode ser associada ao campo de radiação e relacionada com a razão entre as temperaturas num dado instante de tempo e a temperatura da radiação cósmica de fundo actual, obtendo-se $u(T) \sim 0,4 \text{ MeV/m}^3 [T/2,7 \text{ K}]^4$ (recordar lei de Stefan-Boltzmann). Substituindo na equação de Friedmann obtém a expressão para o tempo de expansão do Universo em função da temperatura no fase inicial em que o Universo era dominado pela radiação: $t_{\text{exp}}=[2,7 \text{ K}/T]^2 \sqrt{(3c^2/8\pi G \times 0,4 \text{ MeV/m}^3)}$.
- A igualdade das densidades de energia devida à matéria e devida à radiação ocorre à temperatura do ponto de transparência, cerca de 3000 K. A temperatura inferiores a este valor a densidade de energia é dominada pela matéria. A densidade de energia devida à matéria em função da temperatura é dada por $\rho_{\text{massa}}(T) \sim 0,5 \text{ GeV/m}^3 [T/2,7 \text{ K}]^3$. A expressão resultante para o tempo de expansão obtido a partir da equação de Friedmann é $t_{\text{exp}}=[2,7 \text{ K}/T]^{3/2} \sqrt{(3c^2/8\pi G \rho_{\text{massa}})}$.
- No Universo dominado pela radiação onde $T \gg 3000 \text{ K}$, a relação entre o tempo de expansão e a temperatura é $t_{\text{exp}} \sim 4 \times 10^{20} \text{ sK}^2/T^2$.
- Para temperaturas $T \ll 3000 \text{ K}$, a matéria domina em energia. Na era de domínio da matéria, o tempo de expansão e a temperatura estão relacionados por $t_{\text{exp}}=[2,7 \text{ K}/T]^{3/2} \sqrt{(3c^2/8\pi G \rho_{\text{massa}})}$. Usando os valores da densidade de energia, $0,5 \text{ GeV/m}^3$, então obtém-se para o tempo de expansão $4,5 \times 10^9$ anos.
- Se se usar o valor crítico da densidade de energia associada à matéria, $\sim 5,5 \text{ GeV/m}^3$, associada ao valor do parâmetro de Hubble de $72 \text{ km}/(\text{s Mpc})$, o tempo de expansão correspondente à temperatura actual de $2,7 \text{ K}$ é $13,6 \times 10^9$ anos. O cálculo da densidade crítica obtém-se a partir da expressão de Weinburg ou $\rho_{\text{massa}}=M/[4\pi R^3/3]=3H^2/[8\pi G]$, onde M e R representam, respectivamente a *massa* e o *raio* do Universo.

Problemas (7)

1. Na explosão de uma bomba de hidrogénio atinge-se uma temperatura de 100 MK. Se durante um curto intervalo de tempo se puder admitir que a “bola de fogo” emite segundo a lei do corpo negro, qual o valor do comprimento de onda dominante? Qual a energia dos fotões correspondentes?
2. Admitindo que uma pessoa consegue detectar a olho nu um cigarro aceso, de noite, a uma distância de 500 m, faça uma estimativa do número de fotões que atingem a retina por segundo. Suponha que a ponta do cigarro é hemisférica com raio 0,5 cm, que a pupila tem 0,3 cm de raio, e que a temperatura da chama do cigarro é ~ 800 °C.
3. A radiação emitida pelo Sol incide sobre a superfície de Marte à taxa de $0,62 \text{ kJm}^{-2}\text{s}^{-1}$. a) qual a densidade de energia electromagnética devida à radiação solar à superfície de Marte. b) Sabendo que a distância média Marte-Sol é 1,5 vezes a distância Terra-Sol, qual a densidade de energia electromagnética de origem solar na superfície da Terra?
4. A frequência limiar para o efeito fotoeléctrico no volfrâmio é 1300 THz. Se este metal é iluminado com luz ultravioleta de frequência 1600 THz determine a) o potencial de paragem dos electrões; b) a velocidade que adquire um electrão interno do volfrâmio com uma energia de ligação de 6 eV.
5. Um eléctrodo recoberto de céσιο é iluminado com luz monocromática com 589 nm, estando o segundo eléctrodo da célula ao potencial de $-V$. Regista-se corrente para $V < 0,2$ V. Para radiação de 253,6 nm, o valor de V que anula a corrente é 3 V. a) calcular o valor do comprimento de onda limiar para o Cs e o valor de h ; b) Suponha agora que o eléctrodo de Cs recebe radiação de 0,5 W de potência e comprimento de onda ajustável. O 2º eléctrodo é colocado a um potencial muito superior ao do Cs. Para que valor de comprimento de onda seria máxima a intensidade de corrente fotoeléctrica e qual o seu valor?
6. A superfície do Na emite $6,25 \times 10^7 \text{ e/cm}^2\text{s}$. Admitindo que os átomos de Na estão regularmente espaçados e que os foto-electrões são fornecidos pelas 10 camadas atómicas mais superficiais, calcular em média o nº de foto electrões emitidos por átomo por segundo. A densidade e a massa molar do sódio são $0,97 \text{ g/cm}^3$ e 23 g, respectivamente.
7. a) Mostre que no efeito de Compton o ângulo de espalhamento do electrão e o ângulo de espalhamento do fotão verificam a relação $\cot\phi = -(1+\alpha)\tan(\theta/2)$, $\alpha = h\nu/m_0c^2$. b) Considere um fotão com $\alpha=2$: relacione o seu comprimento de onda com λ_C . c) Numa situação em que $\phi + \theta = \pi/2$, calcular θ e $\alpha' = h\nu'/m_0c^2$.
8. Um fotão de 200 MeV colide com um próton livre em repouso. Qual a menor energia do fotão emitido.
9. Um electrão com energia 1 GeV colide com um fotão de comprimento de onda 1 cm. Qual a perda máxima de energia do electrão? Qual o comprimento de onda do fotão resultante nesse caso.
10. Mostre que não é possível a aniquilação de um par electrão – positrão livres, supostas inicialmente em repouso com produção de um fotão. Verifique que se se produzirem 2 fotões, o processo já é possível. (Nota: a produção de 1 só fotão torna-se possível se houver outras partículas na vizinhança, por exemplo, núcleos, que absorvam o excedente de energia e o movimento linear).

Modelos atómicos (*de Thomson a Sommerfeld*)

«Aplicação»: o laser

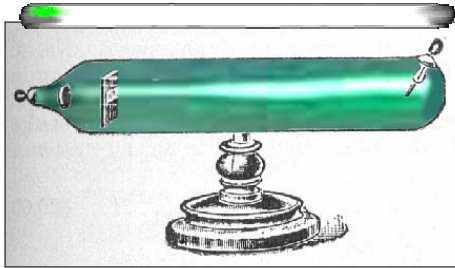
“Niels Bohr deve ser um cérebro de primeira linha, extremamente crítico e visionário, que nunca perde o rasto do objectivo essencial.” Einstein, 1919 (bilhete-postal a Planck)

“É verdadeiramente um homem de génio. ... Tenho uma confiança total na sua maneira de pensar.” Einstein, 1922

Que esta insegura e contraditória fundamentação [a da Física entre os anos de 1910 e 1920] tivesse sido suficiente para permitir que um homem como Bohr, de instinto e tacto únicos, descobrisse as leis supremas das riscas espectrais e das camadas electrónicas dos átomos conjuntamente com os seus significados para a química, pareceu-me um milagre; e ainda hoje me parece um milagre. É a forma mais elevada de musicalidade na esfera do pensamento.” Einstein (P. A. Schilpp), 1949

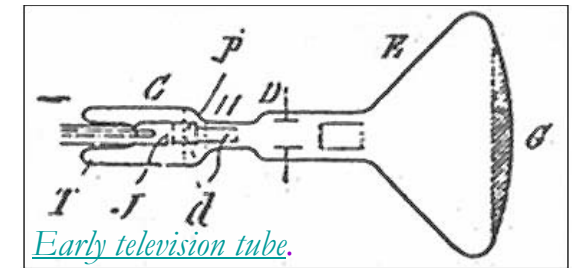
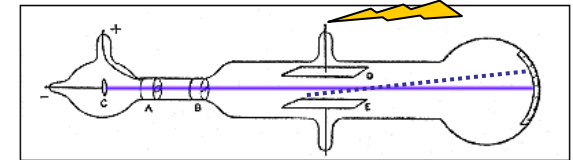
[A. Pais]

Descoberta do electrão e determinação da carga do electrão



Em geral, um gás a baixa pressão é mau condutor de electricidade. Porém, encerrando o gás num vaso com dois eléctrodos nas extremidades, precursor do tubo de Geisser, e aplicando uma tensão suficientemente elevada entre os eléctrodos, ocorre transporte de electricidade e ao mesmo tempo o gás torna-se luminoso. Se a pressão for inferior a 10^{-3} mmHg, a luminescência desaparece mas observa-se a presença de raios procedentes do cátodo que provocam o aparecimento de uma fluorescência no vidro da parede oposta do tubo. Em certas circunstâncias estes raios são visíveis directamente sob a forma de um traço azulado que atravessa o tudo a partir do cátodo. Estes raios chamam-se raios catódicos.

Estes raios podem ser deflectidos da sua trajectória rectilínea por campos externos, eléctricos ou magnéticos, de tal modo que permitem deduzir que os raios são formados por partículas carregadas negativamente que se movem rapidamente (Jean Perrin, 1895): estas partículas foram designadas **electrões**. A velocidade e a carga específica (a razão entre a carga e a massa, e/m) destas partículas podem ser determinadas. Verifica-se experimentalmente que $e/m_0 \approx 1,76 \times 10^{11}$ C/kg (J. J. Thomson, 1897).

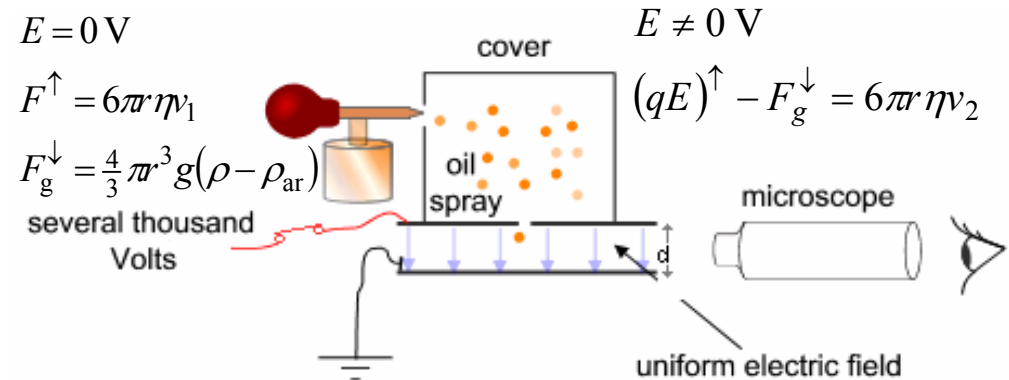


Experiência da gota de óleo de Millikan (quantização da carga eléctrica), 1909

Esta experiência permite determinar o valor da carga eléctrica elementar e . Se conhecermos e , podemos determinar o número de Avogadro N_A . Já se sabia, desde a descoberta de Faraday da unidade electrolítica – o faraday – que $eN_A = F = 96520$ C. Millikan considerou que se a electricidade for realmente constituída por quanta elementares, a carga total de um corpo deve ser um múltiplo inteiro da carga e . Para se poder verificar facilmente isto é necessário usar corpos com carga total correspondente a poucos quanta.

A experiência idealizada por Millikan permite esta determinação: a carga de uma gotícula de óleo pode ser determinada com suficiente precisão se se fizer actuar sobre ela o campo criado entre os eléctrodos de um condensador, cujas linhas de força têm o mesmo sentido da aceleração devida à gravidade. Escolhendo devidamente o valor deste campo, pode-se balancear as forças eléctrica e gravítica que actuam nas gotículas, permitindo determinar a carga do electrão uma vez que a razão e/m já havia sido determinada.

Millikan verificou que a carga eléctrica das gotas era sempre um múltiplo inteiro de uma unidade fundamental $e = 1,601 \times 10^{-19}$ C.

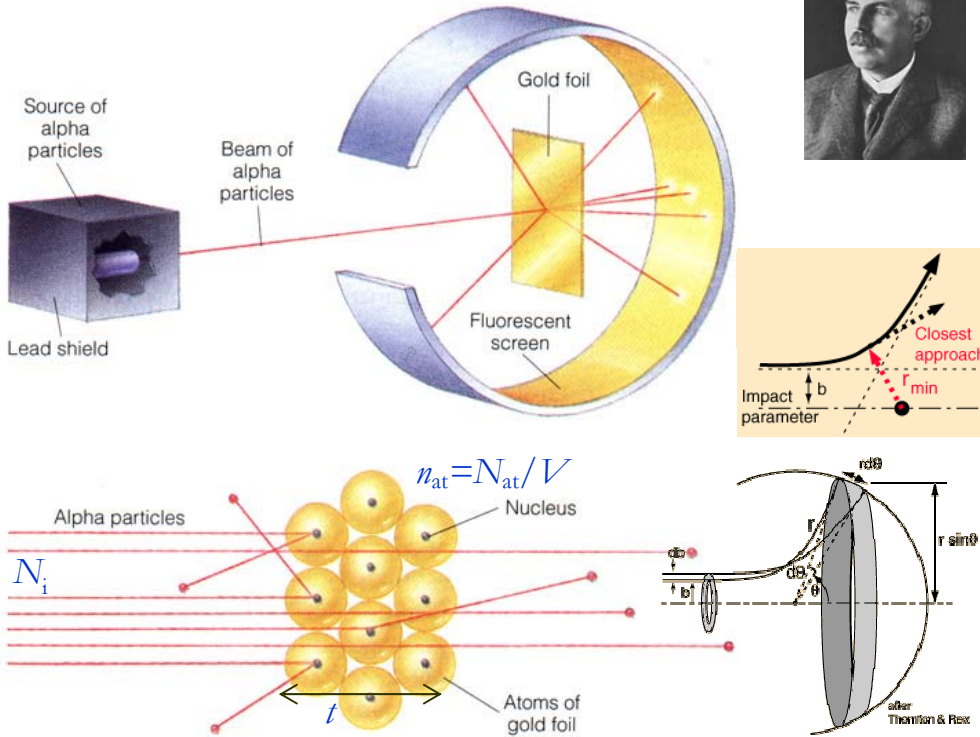


Ver *On the elementary electrical charge and the Avogadro constant*, R. A. Millikan, *The Physical Review*, Vol. II (2), pp. 109-143.

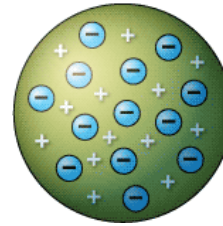
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

Modelos do átomo e experiência de Rutherford

Experiência de Rutherford, 1909, 1911-1913



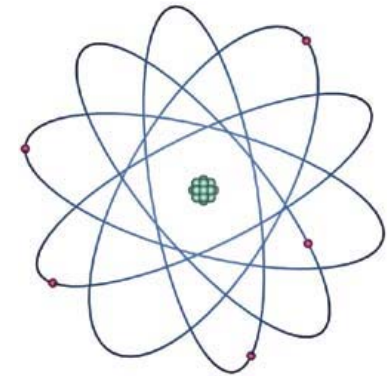
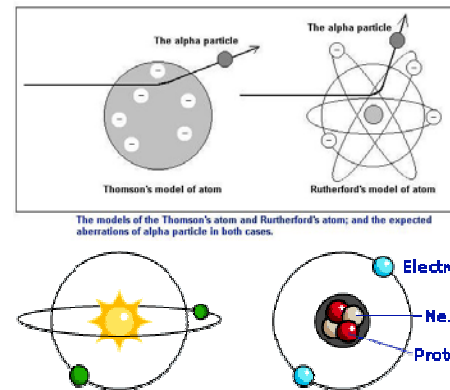
Modelo de Thomson



Hipóteses de Thomson (1897):

- Os raios catódicos são partículas com carga negativa
- Estas partículas são constituintes dos átomos
- Estes corpúsculos são os únicos constituintes dos átomos. (Para Thomson a carga positiva do átomo não “tinha massa”.)

Modelo de Rutherford do átomo



Geiger e Marsden mostraram que o número de partículas espalhadas em função do ângulo de espalhamento era consistente com um pequeno núcleo denso de carga positiva. Para ângulos acima de 140° o núcleo comportava-se como um partícula pontual, não sendo possível determinar a sua dimensão. Nas situações em que o espalhamento não era do tipo coulomb, podia-se inferir a existência de outra força, sendo razoável afirmar que se tinha “atingido” o núcleo. O espalhamento de electrões pelo núcleo permite obter informação sobre a sua dimensão e distribuição de carga (o electrão é uma partícula pontual, podendo penetrar no núcleo) - Hofstadter, R., et al., Phys. Rev. 92, 978 (1953).

$$r_{\text{nucl}} = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m}, \quad A \equiv \text{número de massa}$$

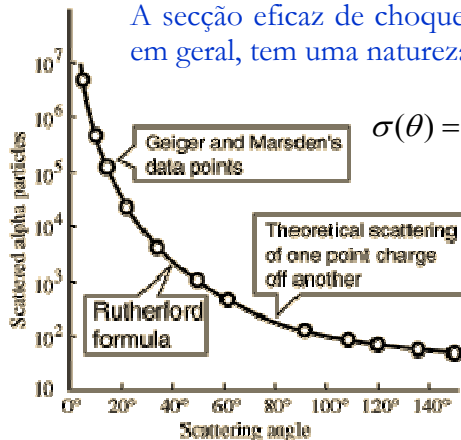
$$\rho_{\text{nucl}} \approx 2,3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$$

A secção eficaz de choque σ é a área efectiva para uma colisão, e, em geral, tem uma natureza estatística.

$$\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{q_1 q_2}{2mv_0^2} \right)^2 \left(\sin^4 \frac{\theta}{2} \right)^{-1}$$

Número de partículas por unidade de área que atingem o detector posicionado segundo o ângulo em relação ao feixe incidente :

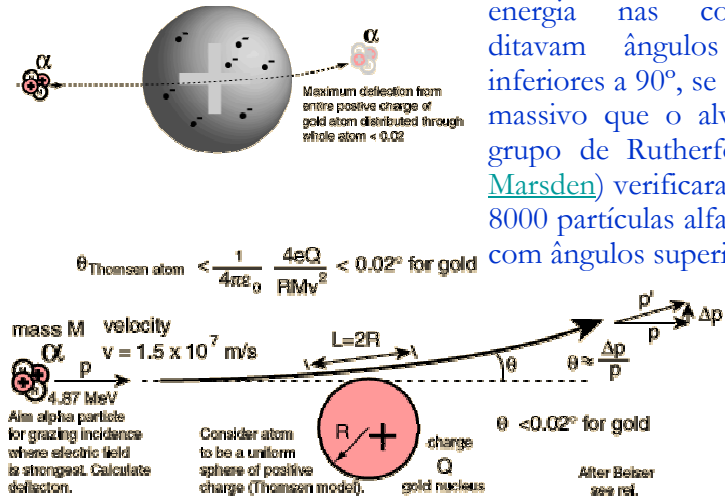
$$N(\theta) = N_i \frac{n_{\text{at}} Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2mv_0^2 r^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} t \left(\sin^4 \frac{\theta}{2} \right)^{-1}$$



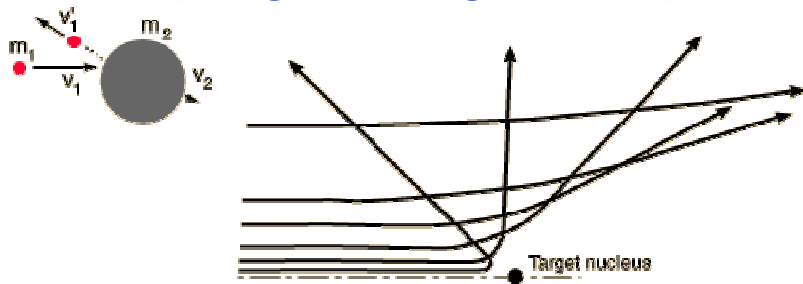
Experiência de Rutherford, Geiger e Marsden

Porque é os resultados da experiência foram surpreendentes?

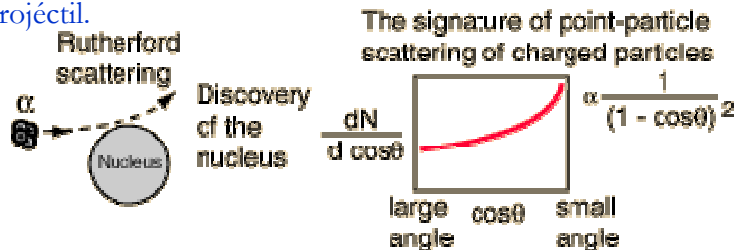
A conservação de momento e energia nas colisões elásticas ditavam ângulos de dispersão inferiores a 90°, se o projectil é mais massivo que o alvo. Contudo, o grupo de Rutherford (Geiger and Marsden) verificaram que 1 em cada 8000 partículas alfa eram espalhadas com ângulos superiores a 90°.



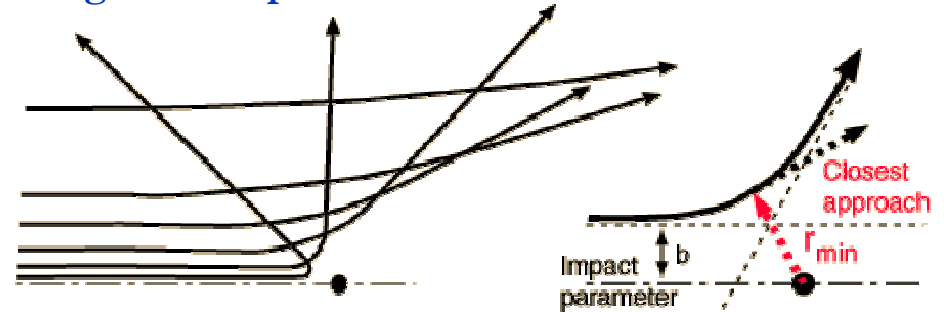
Condição para grandes ângulos de espalhamento



Independentemente da natureza da força na colisão elástica, a obtenção de ângulos de espalhamento superiores a 90° requer que o alvo seja mais **maciço** que o projectil.

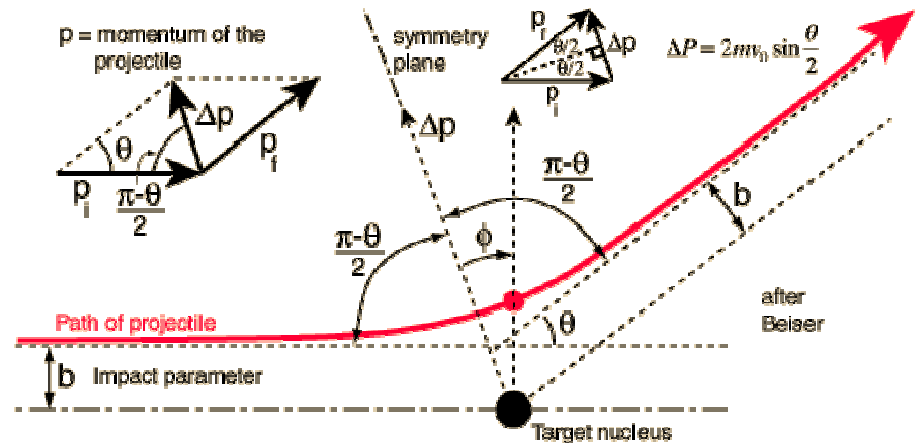


Para além da massa do alvo, o que é que determina a ângulo de espalhamento?



O ângulo de espalhamento depende da força e do parâmetro de impacto (distância na perpendicular, de maior aproximação se o projectil não fosse deflectido).

Parâmetro de impacto para espalhamento nuclear

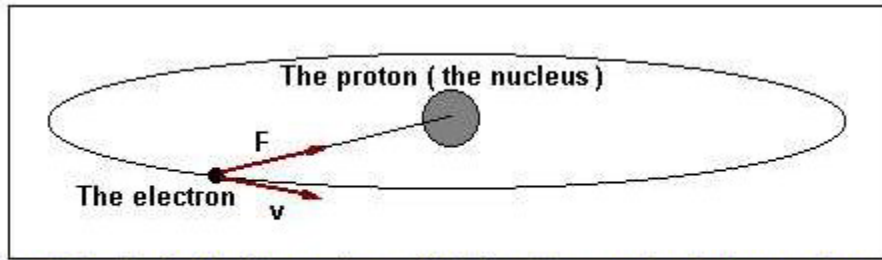


$$b = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2} \cot \frac{\theta}{2} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2} \sqrt{\frac{1 + \cos \theta}{1 - \cos \theta}}$$

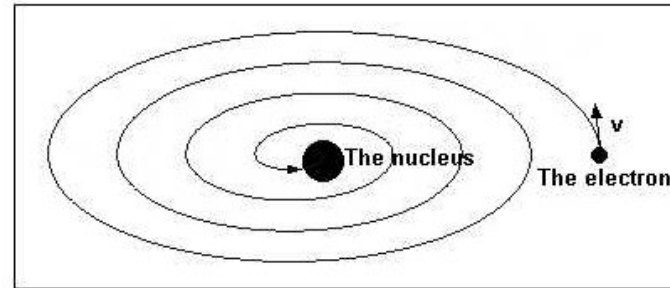
$$\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{q_1 q_2}{2m v_0^2} \right)^2 \left(\sin^4 \frac{\theta}{2} \right)^{-1}$$

«Falhanço» do modelo de Rutherford e proposta de Bohr

Falhanço do modelo de Rutherford: o electrão acabaria por «cair» no núcleo



The Rutherford's atomic model. The electron circulating on the orbit around the nucleus with the velocity v is attracted by it with the force F

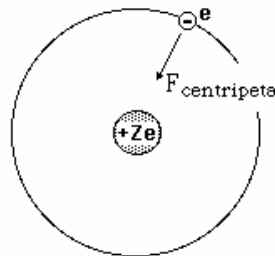
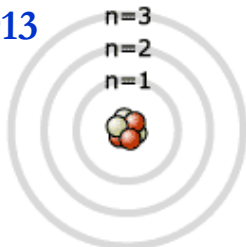


In the planetary model of atom, the electron should emit energy and spirally fall on the nucleus.



Modelo de Bohr, 1913

Órbita «clássica» do electrão e a quantização do momento angular



1º postulado de Bohr: a órbita do electrão obedece às leis de Newton

$$m_e a \equiv \frac{m_e v_e^2}{R} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{eZe}{4\pi\epsilon_0 R^2} \equiv E_C = \frac{m_e v_e^2}{2} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

$$U = E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R} \therefore E_T = E_C + U = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

A energia orbital do sistema electrão (-e) – núcleo (+Ze) é negativa porque se trata de um estado ligado – para separar os componentes do sistema é necessário fornecer energia aos sistema.

2º postulado de Bohr : $L \equiv Rm_e v_e = n\hbar$; obtém -se $R_n = \frac{1}{m_e v_e} n\hbar = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Zm_e e^2} n^2 = a_0 \frac{n^2}{Z}$

Pode escrever a energia da órbita com número quântico principal n , como:

$$E_n = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R_n} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

O parâmetro n designa-se número quântico principal. Para o caso do átomo de hidrogénio $a_0=52,9$ pm. Este valor corresponde ao raio de Bohr para o átomo de hidrogénio.

3º postulado: nas órbitas estacionárias o sistema não perde energia (não emite radiação)

4º postulado: o sistema pode alterar a sua energia emitindo ou absorvendo um *quantum* de energia:

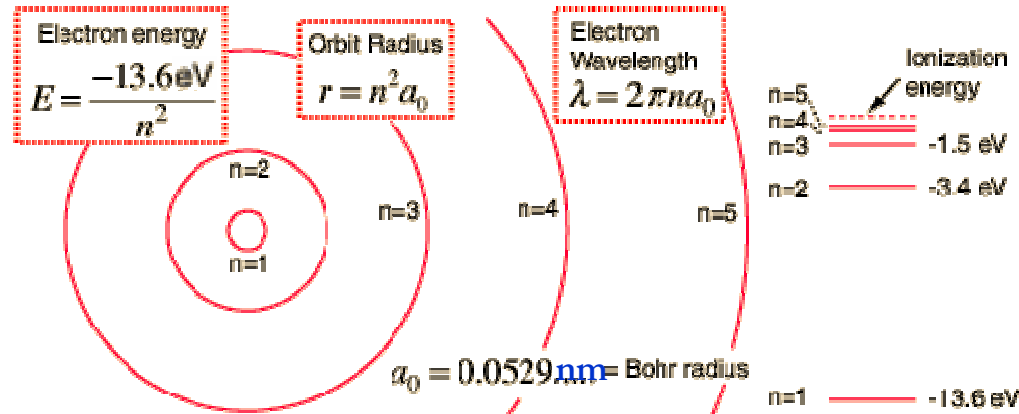
$$\Delta E_{fi} = E_{n_f} - E_{n_i} = -E_0 \frac{Z^2}{n_f^2} + E_0 \frac{Z^2}{n_i^2} = Z^2 E_0 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu \rightarrow \nu_{fi} = \frac{Z^2 E_0}{h} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \text{ ou } \frac{1}{\lambda_{fi}} = \frac{Z^2 E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Convenção: a emissão de energia pelo sistema quando altera a sua configuração corresponde a valores positivos de ΔE , de ν e de λ ; a absorção a valores negativos.

Estes postulados são apresentados de forma *ad hoc*, isto é, adrede – “calham bem” – para a explicação dos fenómenos; não resultam dos princípios de uma teoria.

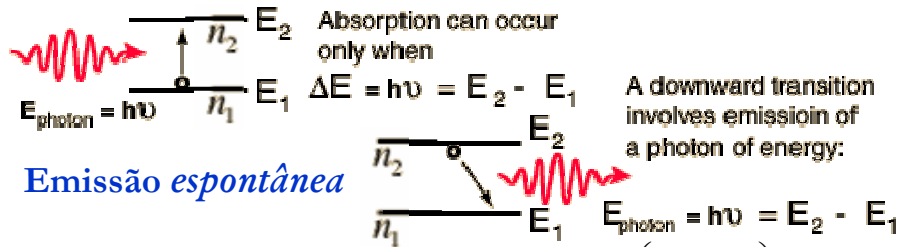
Átomo de hidrogénio *segundo* Bohr

Níveis de energia do átomo de hidrogénio (Z=1)



$a_0 = 52,9 \text{ pm}$ (raio de Bohr para o átomo de hidrogénio).

Transições atómicas (absorção ou emissão)



Absorção (" $n_2 > n_1$ ") : $\Delta E_{21} = E_2 - E_1 = -E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = -h\nu$

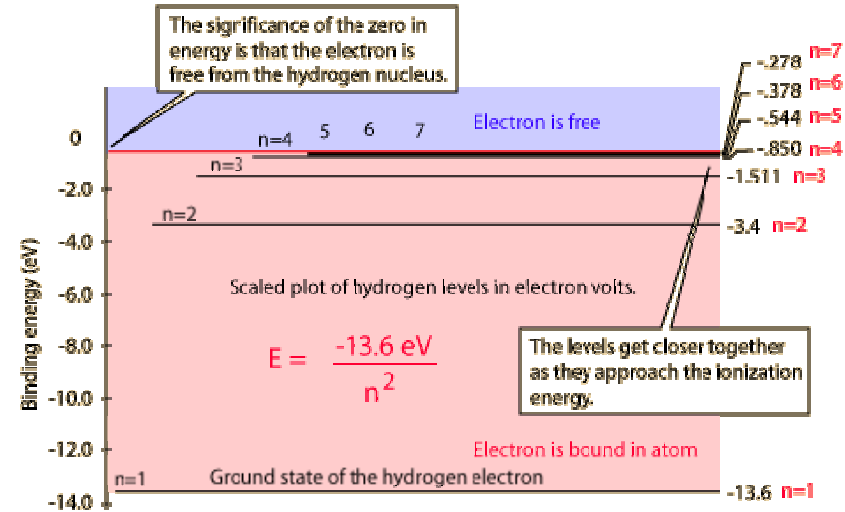
$$\nu = \frac{E_0}{h} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Emissão (" $n_2 > n_1$ ") : $\Delta E_{12} = E_1 - E_2 = -E_0 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) = h\nu$

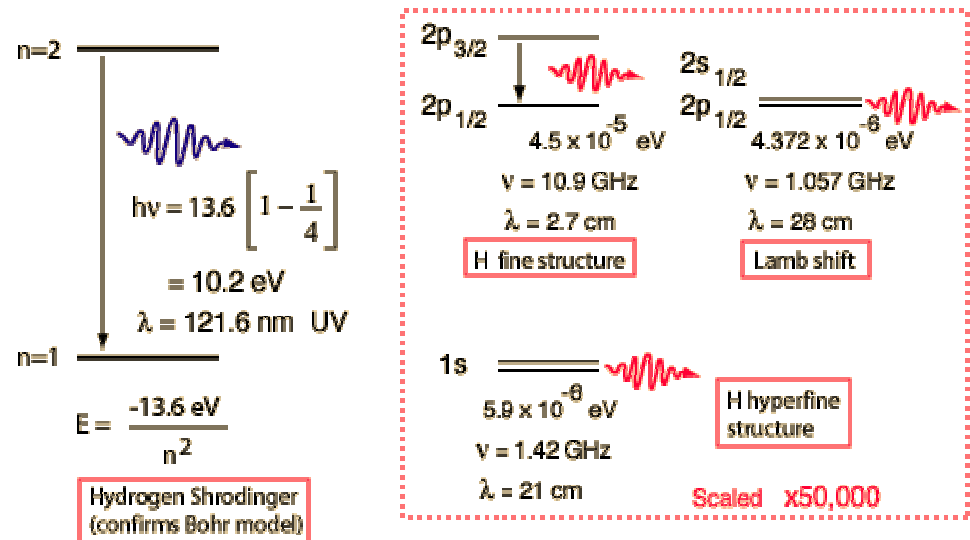
$$\nu = \frac{E_0}{h} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad \text{onde } R_H = \frac{E_0}{hc} \text{ é a constante}$$

de Rydberg para o átomo de hidrogénio.

Níveis de energia do átomo de hidrogénio



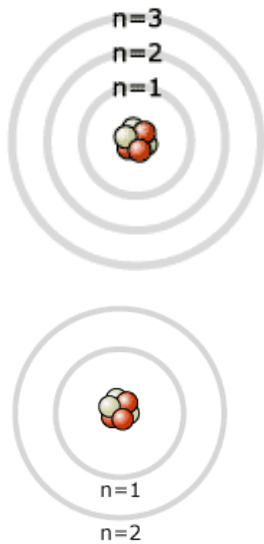
Pequenos «detalhes» nos níveis de energia do átomo de hidrogénio não explicados pelo modelo de Bohr (*necessidade de mais número quânticos*)



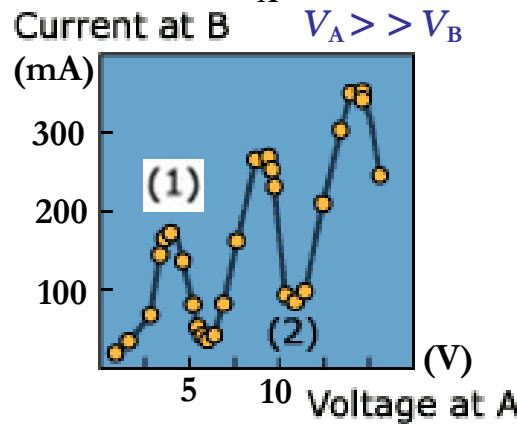
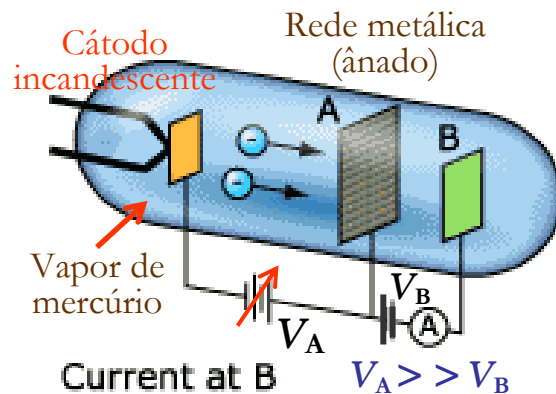
Experiência de Franck-Hertz. Modelo de Sommerfeld

- O modelo de Bohr para átomos «hidrogenoides» foi *apoiado* por várias observações experimentais: a experiência de Franck-Hertz e o espectro de emissão do átomo de hidrogénio e do ião He^+ . Contudo, o modelo apresentava pequenas discrepância com alguns dos resultados experimentais (ver páginas anterior e seguinte).
- Sommerfeld «refinou» o modelo de Bohr propondo que o electrão descreve uma órbita elíptica (leis de Kepler) em precessão (roseta) em torno do núcleo, obtendo-se uma «órbita» duplamente periódica (para *saber mais* ver, por exemplo, *Física Atómica*, Max Born, pp. 115, 132 e 430): a análise tem em conta a massa finita do núcleo, a dependência da massa do electrão com a velocidade (correção relativista) e o movimento do próprio núcleo em torno do centro de massa do sistema. Este modelo permite obter os termos correctos para a série de Balmer. Sommerfeld *efectuou* a quantização *completa* do átomo de hidrogénio: «surgiram» mais números quânticos (números quânticos: l, m e s , para além do n).
- Considerar a massa do núcleo finita não altera a forma das expressões obtidas, devendo a massa do electrão ser substituída pela massa reduzida do sistema electrão – núcleo $\mu = m_e M_n / (m_e + M_n)$; para o caso do átomo de hidrogénio, cujo núcleo tem apenas um protão, tem-se $M_n \approx 1836 m_e$.

Modelo de Bohr, 1913



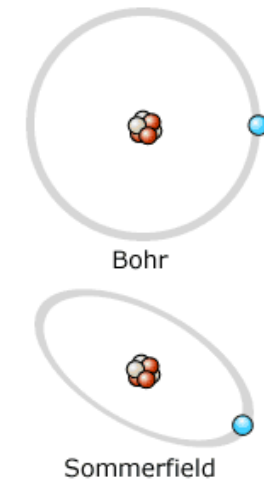
Experiência de Franck-Hertz, 1914 (absorção ressonante)



Esta experiência *confirma* a existência de estados discretos de energia nos átomos (ex. vapor de mercúrio), o que corroborava a teoria de Bohr que propunha que o átomo só podia assumir determinados estados de energia – a **quantização** da energia do átomo.

Nesta experiência, os electrões são acelerados pela tensão V_A : à medida que a tensão entre o cátodo e o ânodo sobe, a corrente de A para B aumenta marcadamente até se atingir a tensão 4,9 V, diminuindo acentuadamente logo que a tensão ultrapassa este valor; o mesmo acontece quando $V_A \approx 9,8$ V, 14,7 V, etc.: 4,9 eV corresponde à energia da linha 253,7 nm ($E_2 - E_1 = hc/\lambda = 4,9$ eV). Para vapor de sódio, observa-se a linha amarela 589 nm, quando $V_A \approx 2,1$ V. Observa-se emissão de radiação quando a energia cinética dos electrões é superior às energias de excitação ΔE_{exc} dos átomos do gás (valores de eV_A a partir dos quais há diminuição de corrente.

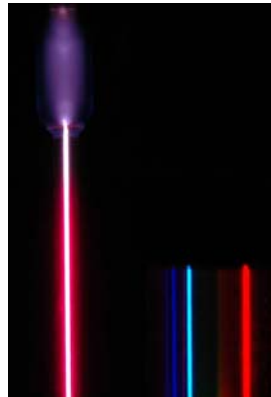
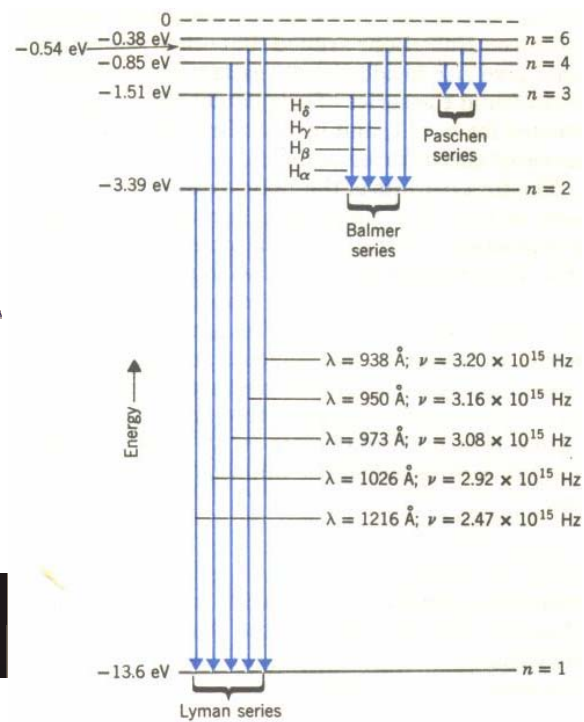
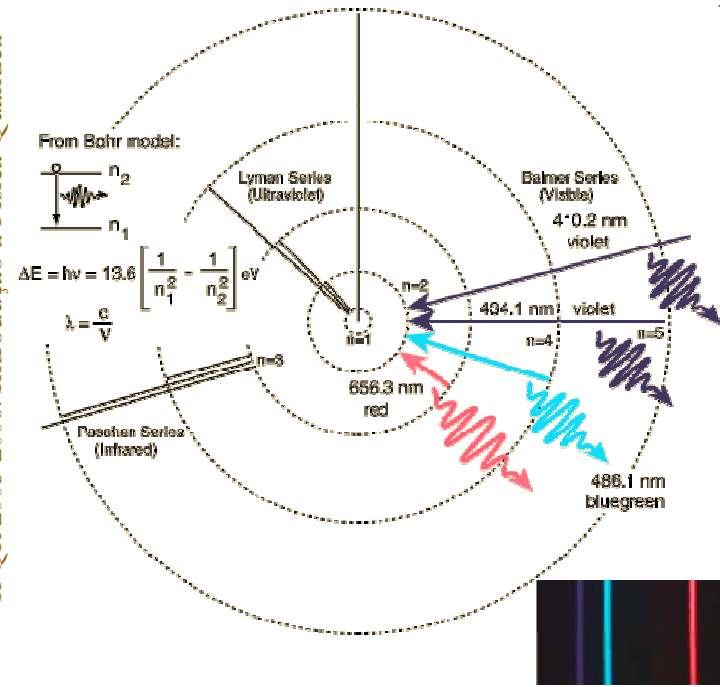
Bohr vs Sommerfeld



- Na ausência de um campo externo o plano da «órbita» do electrão é *fixo* no espaço, mas a sua orientação é arbitrária.
- Os estados atômicos ficam *completamente* caracterizados usando 4 números quânticos: n, l, m e s .

Explique a emissão de radiação na experiência de Franck-Hertz, quando a tensão “está” nas “zonas” de condutância diferencial negativa.

Espectro do hidrogénio



As riscas ao lado correspondem ao espectro emitido por um tubo contendo hidrogénio excitado com uma descarga de 5000 V. A imagem das riscas predominantes foi formada com uma rede de difracção com 600 linhas/mm.

Série de Balmer no visível

Comprimento de onda - intensidade relativa - transição - cor

383,5384 nm	5	9-2	violeta
388,9049 nm	6	8-2	violeta
397,0072 nm	8	7-2	violeta
410,174 nm	15	6-2	violeta
434,047 nm	30	5-2	violeta
486,133 nm	80	4-2	ciânico
656,272 nm	120	3-2	vermelho
656,2852 nm	180	3-2	vermelho

A riscas vermelha do deutério é medida a 656,1065 nm (diferença de 0,1787 nm)

«Classificação» das cores espectrais:

- Violeta (380 nm – 435 nm);
- Azul (435 nm – 500 nm),
- Ciânico (500 nm – 520 nm);
- Verde (520 nm – 565 nm);
- Amarelo (565 nm – 590 nm);
- Laranja (590 nm – 625 nm);
- Vermelho (625 nm – 740 nm);
- Raios x (<10 nm);
- Ultravioleta (10 nm – 400 nm);
- Visível (400 nm – 750 nm);
- Infravermelho (>750 nm)

Pesquisar sobre:

- Efeito de Zeeman corresponde à decomposição das riscas espectrais por aplicação de uma campo magnético (em geral, é simétrica).
- Efeito de Stark corresponde à decomposição das riscas espectrais por aplicação de uma campo eléctrico (em geral, não é simétrica).

Pares electrão-positrão e reacções nucleares

▪ Da mesma forma que redefinimos os conceitos mecânicos de energia e momento, tornando-os invariantes sob a TL, podem-se redefinir todos os outros conceitos de mecânica, tornando-os invariantes sob a TL, e tendem para os conceitos clássicos para velocidades muito inferiores à da luz no vazio. A nova formulação da mecânica relativista, as equações de Maxwell, a TL e o princípio da relatividade de Einstein são consistentes.

Produção e aniquilação de pares electrão-positrão

▪ A existência do positrão, anti-partícula do electrão (mesma massa m_e em repouso e carga simétrica), foi previsto por Paul Dirac em 1930, sendo descoberto por Carl Anderson em 1932 em raios cósmicos em resultando de um processo em que era produzido um par electrão-positrão. Desde então, este processo tem sido observado em resultado da interacção de fotões de alta energia, raios gama, com a matéria. Na formação do par electrão-positrão é necessário que haja conservação de energia-massa e de momento. É necessário ainda que a energia do raio gama seja superior a $2m_e c^2$. A condição de conservação de momento exige a intervenção de outra partícula para além do fotão gama, em geral, um núcleo atómico que recuará com o momento necessário para compensar o momento do fotão $p=E/c$, assegurando a conservação de momento. Ter em atenção que o recuo do núcleo atómica exige que a energia do fotão gama seja superior a $2m_e c^2$. Pode-se mostrar que o limiar de energia do fotão para que o processo de criação do par electrão-positrão ocorra na vizinhança de um núcleo atómico de massa M é $E_L=2m_e c^2(1+m_e/M)$.

▪ Na aniquilação do par electrão-positrão, um electrão e um positrão vão perdendo energia por interacções várias, e quando próximos um do outro, começam a orbitar em torno do centro de massa dos sistema por eles formado, formando um «átomo hidrogenóide» designado positrónio, cujo tempo de vida é da ordem de 100 ps. Ao fim deste tempo, o electrão e o positrão recombina-se sendo emitidos dois fotões em sentidos opostos, assegurando a conservação de momento. Embora a emissão de um único fotão não seja possível, por vezes corre a emissão de três fotões. No caso da emissão de dois fotões, a energia de cada um deles deve ser 0,511 MeV (o equivalente energético da massa do electrão). Assim, o comprimento de onda máximo do fotão é 2,4 pm (banda dos raios gama). Esta emissão de dois fotões pode ser detectada (como ocorre em medicina, no exame imagiológico Tomografia de Emissão de Positrões ou PET – ver página seguinte).

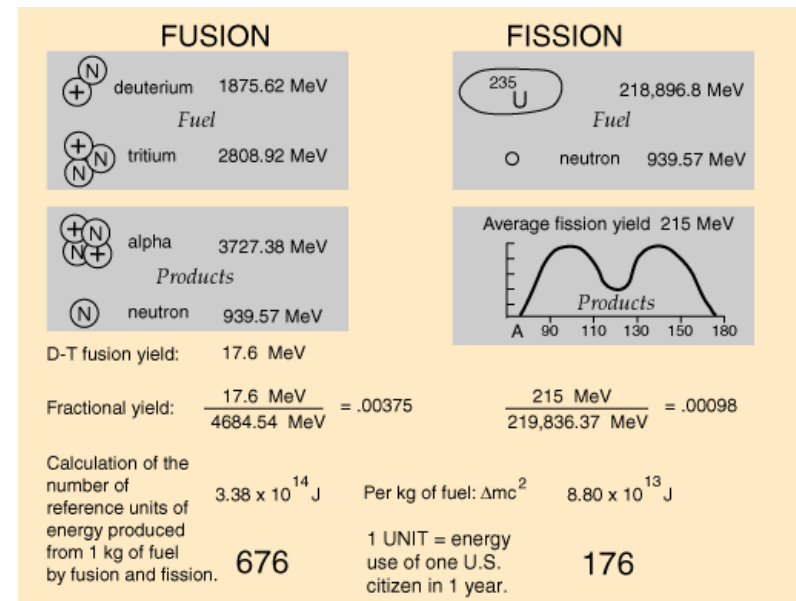
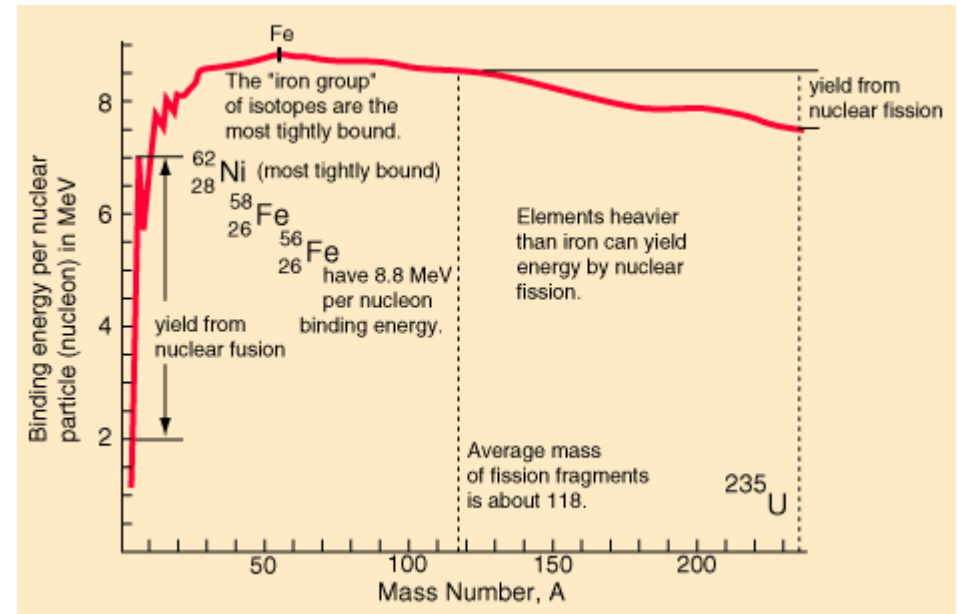
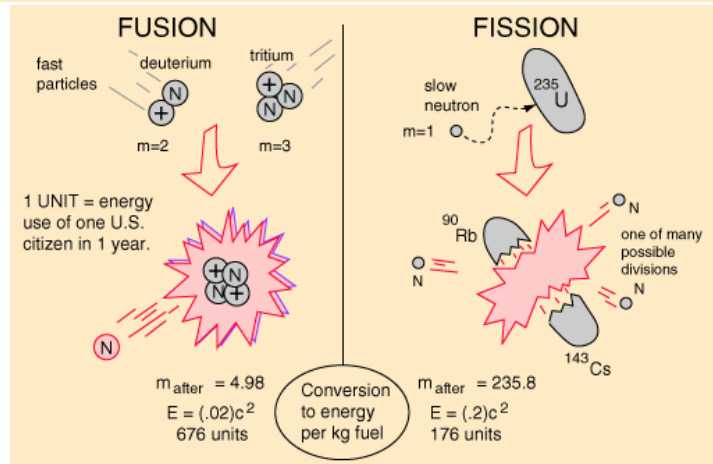
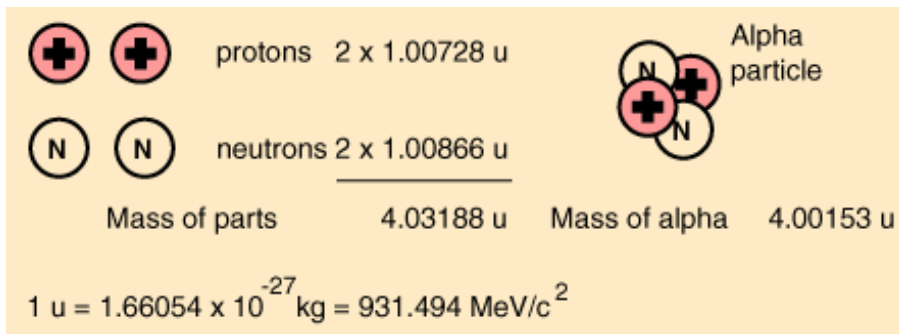
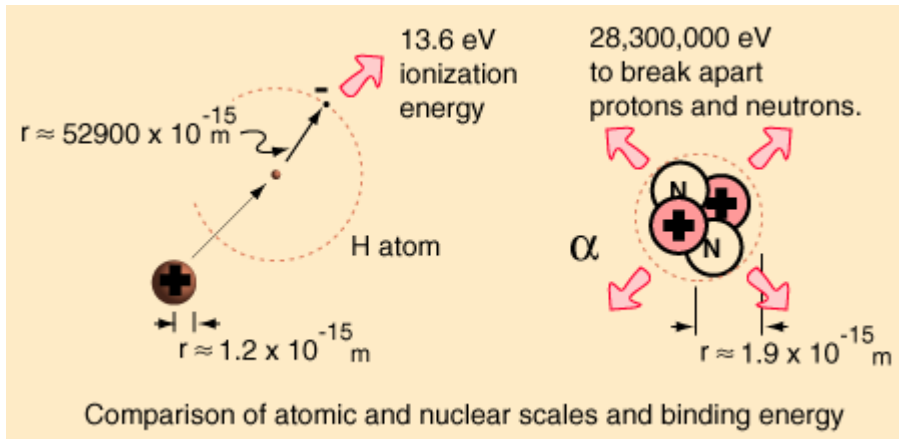
Reacções nucleares e estabilidade nuclear

▪ Se as partículas de um sistema estão ligadas por forças atractivas, será necessário fornecer um dada energia para as separar. Considere-se por exemplo, a energia de ligação de um núcleo de massa M , formado por Z prótons e N neutrões. Pelo princípio da conservação da energia-massa, a energia de ligação é a diferença entre a soma das massas das partículas separada a uma distância infinita e a massa do sistema ligado, multiplicada por c^2 :

▪ $E_L = \Delta m c^2 = (Zm_p + Nm_n - M)c^2$, onde m_p e m_n são as massas em repouso do próton e do neutrão, respectivamente. O termo $\Delta m = \sum m_i - M$ designa-se **defeito de massa**. Em geral, pode dizer-se que um núcleo é *absolutamente* estável se o defeito de massa é positivo com respeito às partículas constituintes ou em relação à soma dos defeitos de massa dos núcleos produtos possíveis da sua desintegração. Neste caso, a massa do núcleo não é suficiente para «formatar» as massas das partículas constituintes ou dos núcleos da desintegração, e o núcleo não pode desintegrar-se nelas.

▪ A energia Q_L libertada numa reacção nuclear do tipo $A+B \rightarrow C+D+ Q_L$ é dada por $Q_L = [(M_A + M_B) - (M_C + M_D)]c^2$.

Reacções nucleares e estabilidade nuclear



Efeito (radiação) de Cherenkov

- Quando uma partícula, com carga eléctrica, atravessa um meio transparente com velocidade maior do que a velocidade da luz nesse meio, $v > c/n$, emite um cone de luz, ver figuras, de forma semelhante ao cone de som («onda de choque») de um avião supersónico ao «quebrar a barreira do som». Um tratamento adequado usando a teoria electromagnética mostra que o comprimento de onda dessa radiação está na região do azul, sendo vista como um brilho azulado quando há um feixe intenso de partículas como, por exemplo, em volta do caroço de um reactor nuclear tipo piscina. A radiação de Cherenkov foi observada por Pavel A. Cherenkov em 1934, quando investigava o que acontecia quando um material radioactivo era colocado num fluido (por ex. água).
- A radiação de Cherenkov é uma das técnicas mais usadas na identificação de partículas subatómicas (ex. neutrinos): as suas propriedades permitem que seja utilizada para medir a velocidade de partículas relativistas. Medindo o ângulo ϕ entre feixe de partículas e a radiação emitida obtém-se a velocidade da partícula no meio, uma vez que:

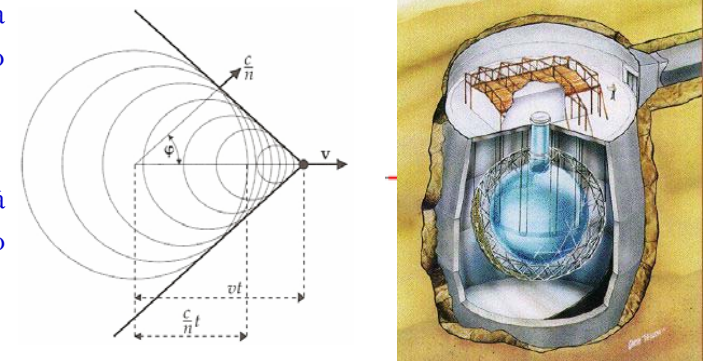
$$\cos\phi = (ct/n) / (vt) = c/nv \text{ e } v = c/n\cos\phi.$$

- Tenha em atenção, que embora uma partícula se possa deslocar com velocidade superior à velocidade da luz num meio material, a velocidade de uma partícula com massa em repouso não nula não pode ser igual ao maior que velocidade da luz no vácuo ($\sim 3,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$).
- O efeito de Cherenkov no vácuo é investigado no DF da Ualg pelo Professor Robertus Potting.



Brilho no núcleo do reactor 'TRIGA'

(<http://triga.ga.com/45years.html>)



Deteção de neutrinos

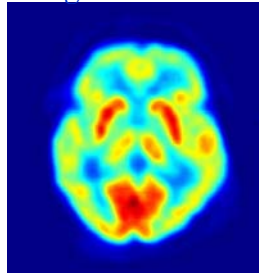
Tomografia de emissão de positrões

- A **Tomografia de Emissão de Positrões (PET)** é um exame imagiológico da medicina nuclear que utiliza radionuclídeo que emitem um positrão aquando da sua desintegração, o qual se aniquila com um electrão dos tecidos através da emissão de dois fótons gama que se propagam em direcções opostas, sendo detectados e usados para formar imagens 3D da região em análise.

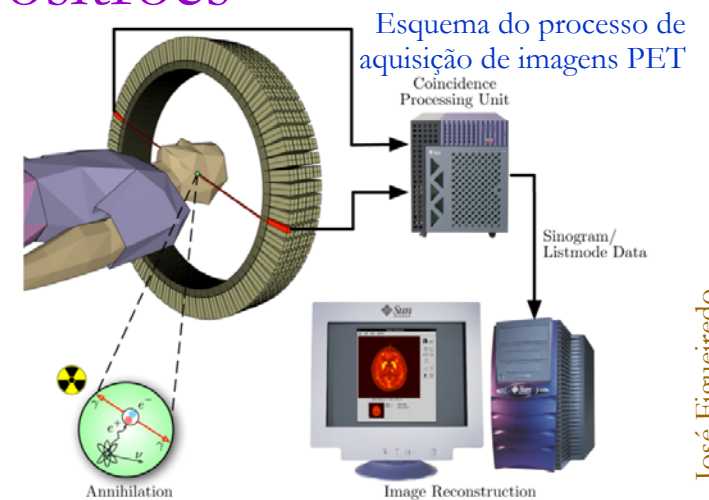
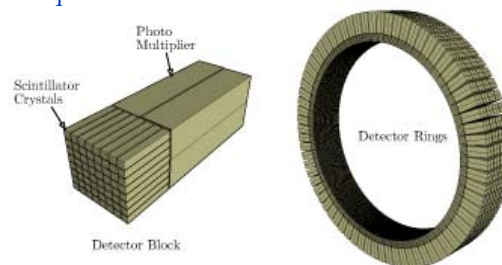
Equipamento PET



Imagem PET



Esquema do detector PET

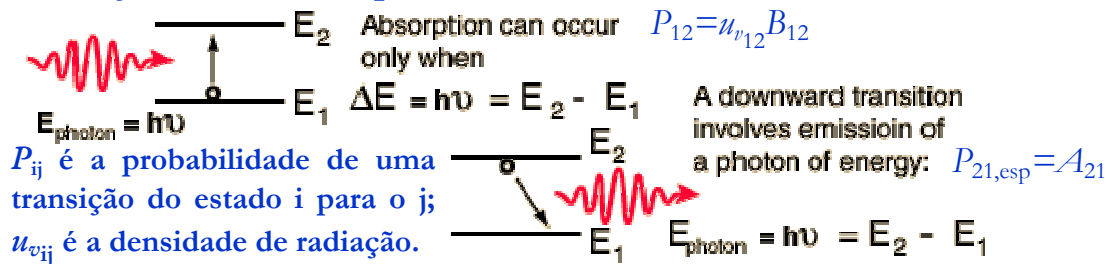


<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

Processos de absorção, emissão espontânea e emissão estimulada

- As transições atômicas em que há emissão e absorção de luz visível são transições que podem ser interpretadas ou *retratadas* como «saltos» dos electrões entre nível atômicos de energia quantizados. Estes processos quânticos são estudados pela Física Atômica e Molecular. Em seguida faz-se um tratamento limitado das características dos processos emissão, absorção e emissão estimulada, essenciais para perceber o funcionamento dos lasers e as suas aplicações. O processo de emissão estimulada da luz é fundamental no funcionamento de um laser.
- Como vimos, a energia electromagnética está quantizada de forma que para uma dada frequência da radiação apenas há um quantum de energia (fotão) e a energia correspondente aos diferentes estados (configurações) dos átomos e moléculas apenas pode tomar certos valores – os níveis de energia estão quantizados. A transição entre estes níveis quantizados de energia ocorre por emissão, absorção ou emissão estimulada de fotões. Em todos estes processos a energia do fotão envolvido, dada pela relação de Planck, é igual à diferença de energia entre o par de estados quânticos envolvidos. No caso da absorção, por exemplo, se a energia do fotão incidente não corresponder à diferença de energia entre dois quaisquer estados, a radiação não será absorvida e o material diz-se transparente a essa radiação.
- Se o átomo já estiver num estado excitado (num estado de energia superior, em contraste com o estado de menor energia possível ou estado fundamental), então um fotão incidente, cuja energia corresponde à diferença entre as energias deste estado excitado e de qualquer outro estado de menor energia, “estimula” a transição do átomo para o estado de menor energia correspondente – emissão estimulada –, produzindo um fotão com as mesmas características que o fotão incidente.

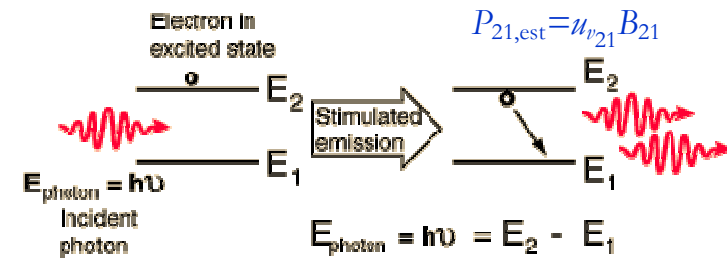
Absorção e emissão espontânea



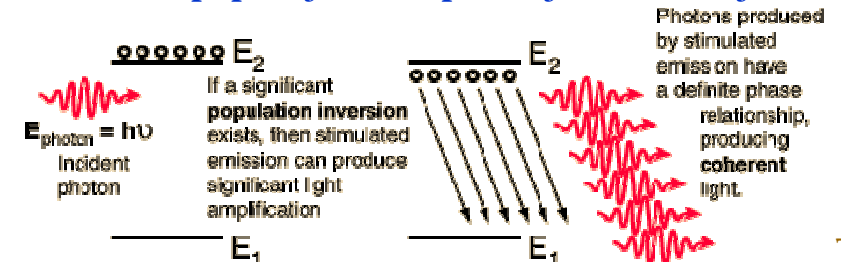
Einstein mostrou, em 1917, usando argumentos termodinâmicos, que, numa situação de equilíbrio, os coeficientes associados às probabilidades de emissão espontânea e de emissão estimulada/absorção, estão relacionadas pela expressão: $A/B = 8\pi h\nu^3/c^3$; A e B são os coeficientes de Einstein para as transições em causa. Mostra-se ainda que os coeficientes para a absorção B_{12} e emissão estimulada B_{21} são iguais para o mesmo par de níveis, $B_{12} = B_{21}$, e que $A/[u(\nu)B] = \exp(h\nu/k_B T) - 1$, i.e., em equilíbrio a emissão espontânea é muito mais provável que a emissão estimulada para $h\nu \gg k_B T$.

Quando a maioria de uma população de átomos ou moléculas de um dado meio «reside» num mesmo estado excitado diz-se que ocorre uma **inversão de população** no meio, o que, em geral, requer que o estado excitado seja um estado meta-estável. Este «estado» colectivo cria as condições para a emissão estimulada de muitos fotões. Esta configuração é uma *pé-condição* para que ocorra a amplificação de radiação, como num *laser* ou num *maser*: os fotões assim criados têm uma **relação de fase definida** uns com os outros, sendo que a radiação assim gerada apresenta um elevado grau de **coerência**.

Emissão estimulada



Inversão de população e amplificação de radiação

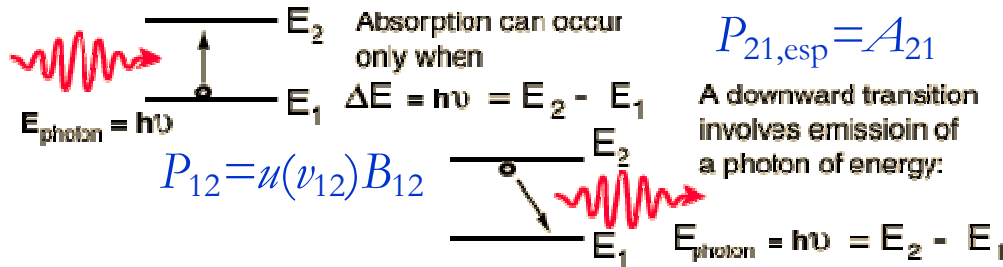


Processos quânticos *essenciais* à acção laser

Laser: acrónimo de L[ight] A[mplification] (by) S[timulated] E[mission] (of) R[adiation], amplificação de luz por meio de emissão estimulada de radiação; dispositivo gerador de um feixe de radiação electromagnética intensa, quase monocromática.

Maser: amplificador de micro-ondas, baseado na emissão estimulada de radiação por um sólido (das iniciais da expressão inglesa *microwave amplification by stimulated emission of radiation*).

Absorção e emissão espontânea



P_{ij} é a probabilidade de uma transição do estado i para o estado j

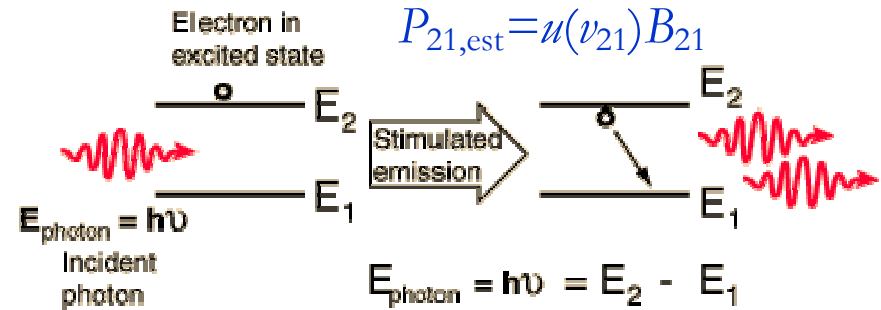
$u(\nu)$ é a densidade de energia da radiação.

Mostra-se que:

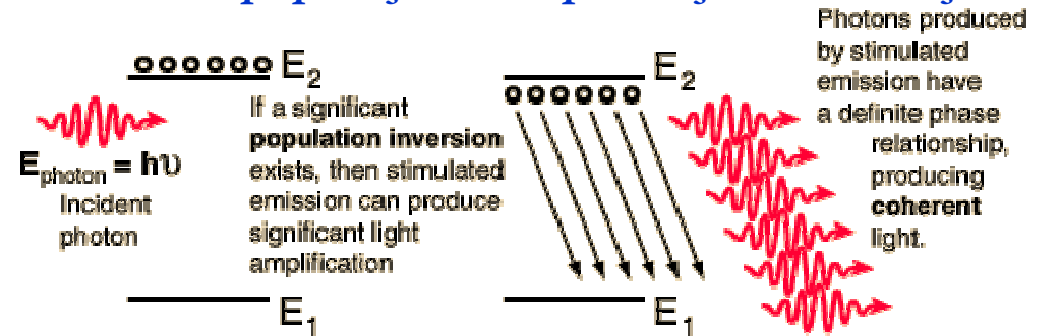
- $A_{21}/B_{21} = 8\pi h\nu^3/c^3$;
- os coeficientes $B_{12} = B_{21} = B$
- $A_{21}/[u(\nu)B_{21}] = \exp(h\nu/k_B T) - 1$.

Exercício: estime as probabilidades relativas da emissão espontânea e da emissão estimulada, em equilíbrio à temperatura ambiente, para que uma transição ocorra i) no verde ($h\nu \sim 2$ eV) e ii) nas microondas ($h\nu \sim 0,1$ meV). Interprete os resultados. [Sol. i) $\sim 10^{33}$; ii) $\sim 0,004$]

Emissão estimulada



Inversão de população e amplificação de radiação



N_2 - número de átomos no estado 2
 N_1 - número de átomos no estado 1

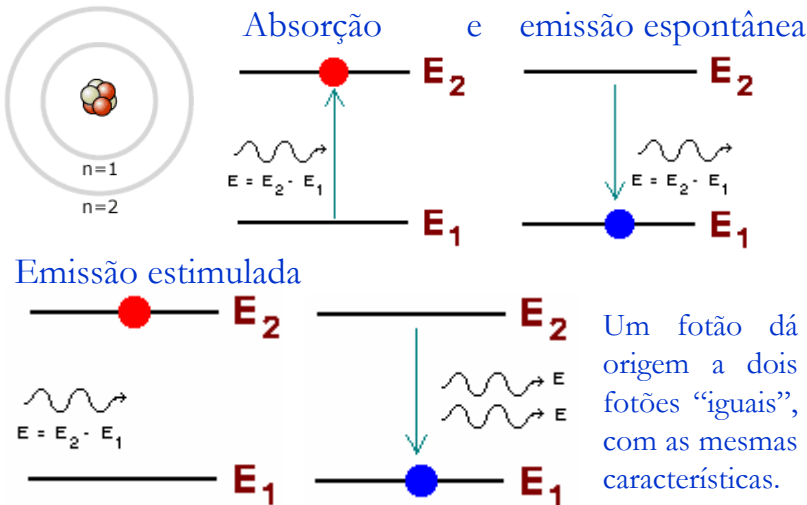
$$N_2 > N_1$$

Em geral, a *acção* laser envolve pelo menos três níveis de energia (ver nas páginas seguintes os diagramas de energia dos lasers de He-Ne e de rubi).

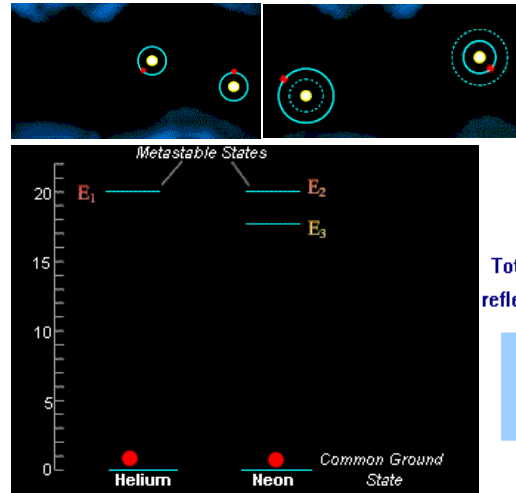
Laseres de Hélio – Néon e de Rubi

Laser: acrónimo de L[ight] A[mplification] (by) S[timulated] E[mission] (of) R[adiation], amplificação de luz por meio de emissão estimulada de radiação; dispositivo gerador de um feixe de radiação electromagnética intensa, quase monocromática.

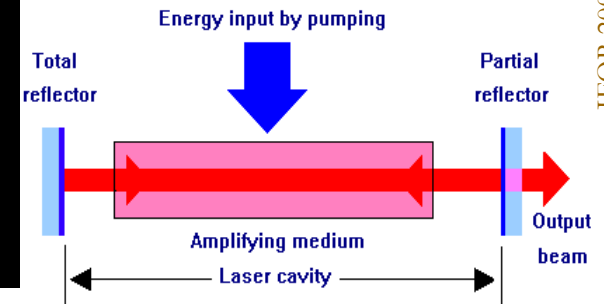
Absorção, emissão espontânea e emissão estimulada



«Bombeamento» e mecanismo de re-alimentação



A emissão laser (amplificação de luz) *estacionária* envolve pelo menos a participação de três níveis de energia. (ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht; F.C. Gulbenkian, pp. 605-622).



Stimulated Optical Radiation in Ruby,

T. H. Maiman, Nature, 6-8-1960

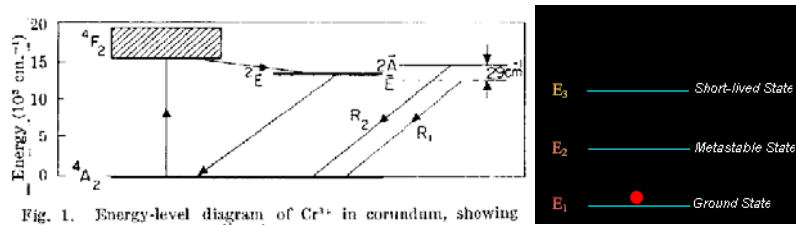


Fig. 1. Energy-level diagram of Cr³⁺ in corundum, showing pertinent processes

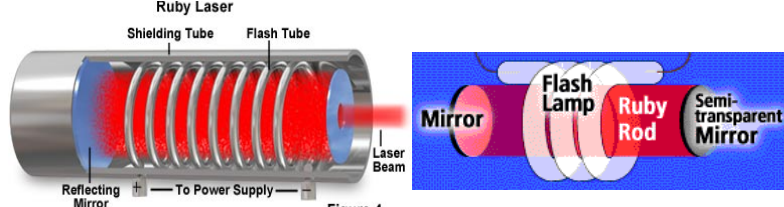


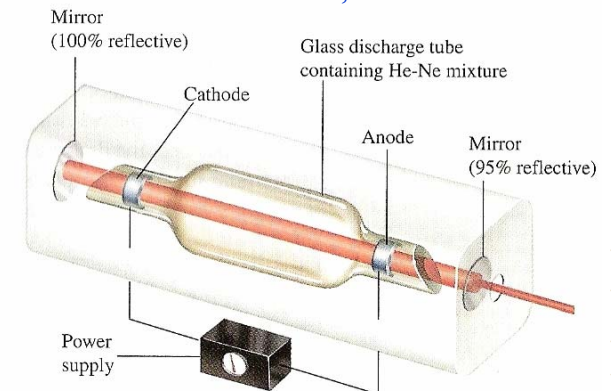
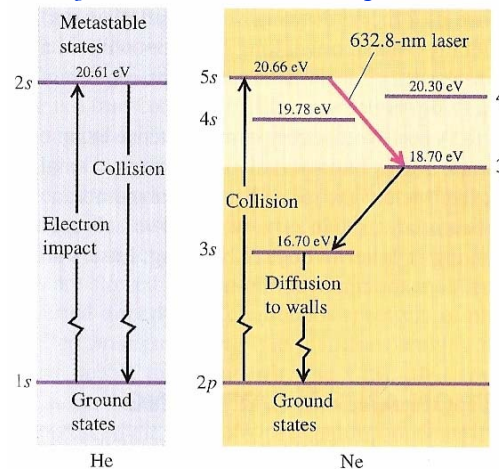
Figure 4

Laser de Hélio - Néon

Consta que o artigo original de Maiman descrevendo este laser foi rejeitado pelos editores da *Physical Review Letters*, “o que ainda hoje entristece visivelmente a revista ...”.

(ver *Óptica*, E. Hecht; F.C. Gulbenkian, pp. 613).

O bombeamento é eléctrico, “ac” ou “dc”.



O bombeamento é óptico. Este laser de rubi é pulsado.

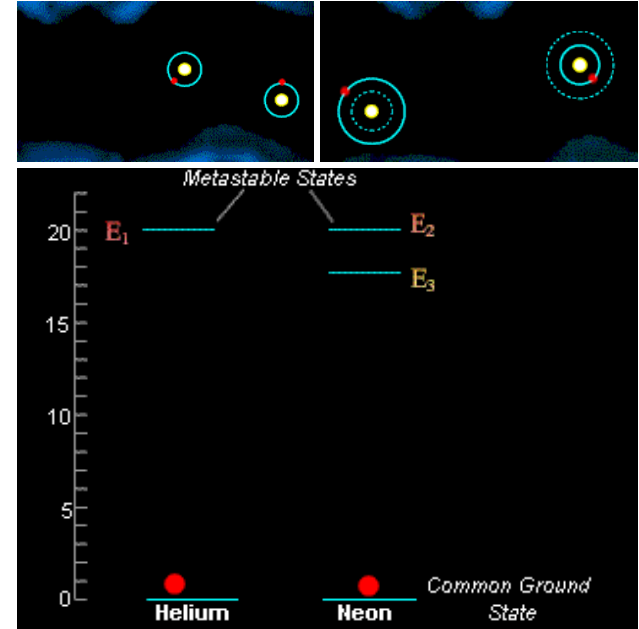
Pode ver algumas animações relacionadas com laseres em http://w3.ualg.pt/~jlongras/lope/Lasers_e_Optoelectronica.html.

Laseres de Rubi e de Hélio – Néon

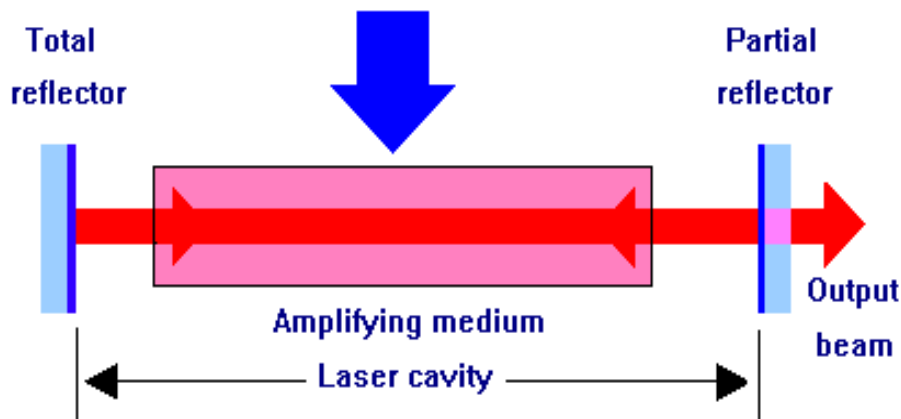
Laser: acrónimo de L[ight] A[mplification] (by) S[timulated] E[mission] (of) R[adiation], amplificação de luz por meio de emissão estimulada de radiação; dispositivo gerador de um feixe de radiação electromagnética intensa, quase monocromática.

Laser de He – Ne

A acção laser envolve, em geral, pelo menos três níveis de energia (ver laseres de 3 níveis ou laseres de 4 níveis).



«Bombeamento» e mecanismo de re-alimentação



Laser de Rubi

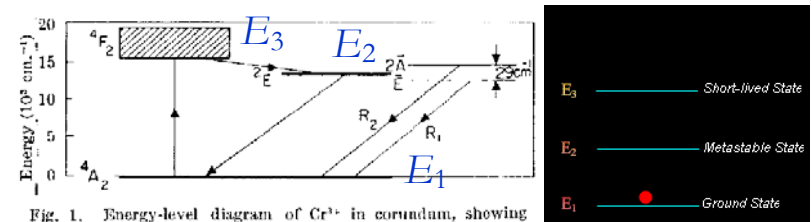
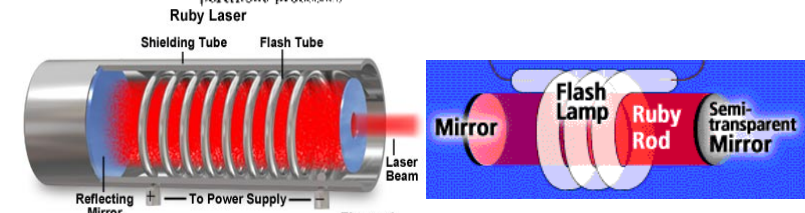


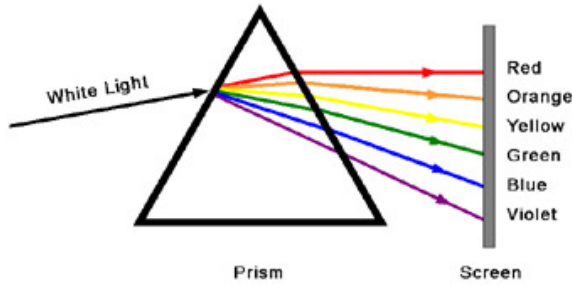
Fig. 1. Energy-level diagram of Cr³⁺ in corundum, showing pertinent processes



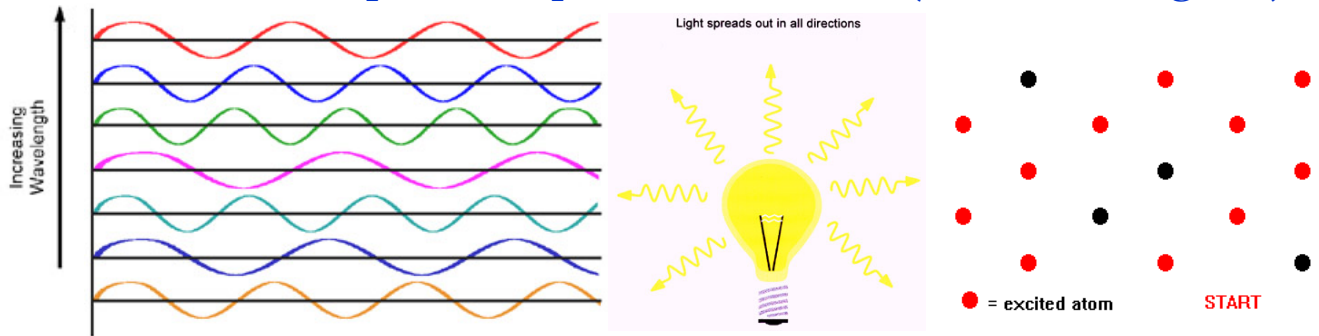
Luz «laser» versus luz «comum»

Para mais detalhe ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht; F. C. Gulbenkian, pp. 619-622.

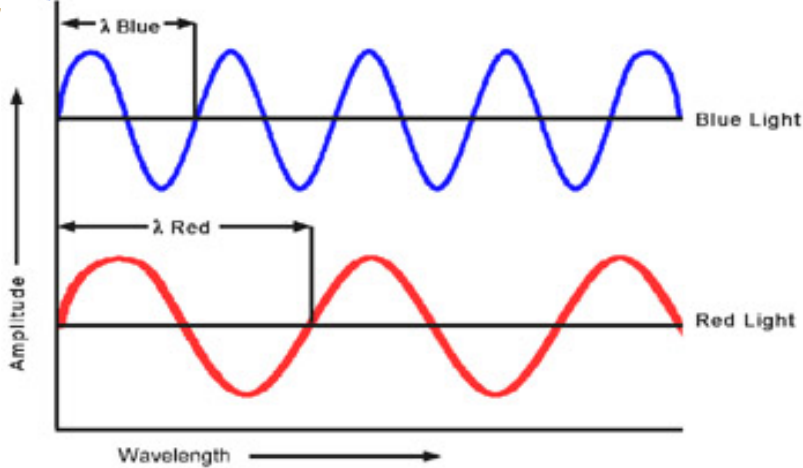
Luz “comum” Policromática



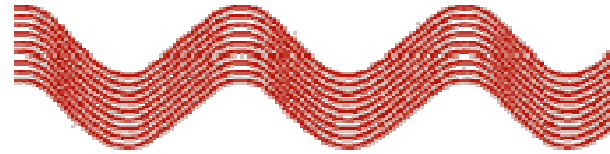
Incoerência temporal e é “pouco” direccional (“muito” divergente)



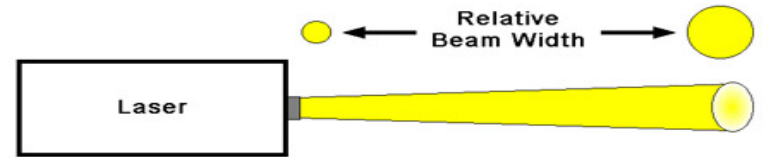
Luz laser Quasi-monocromática



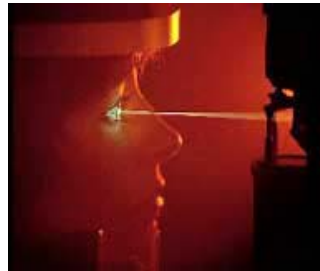
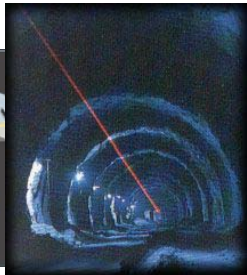
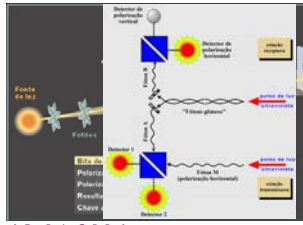
“Elevada” coerência temporal



Em geral, é “altamente” direccional (pouco divergente; limitada pela difracção) Highly Directional Beam (Narrow Cone of Divergence)



Aplicações:

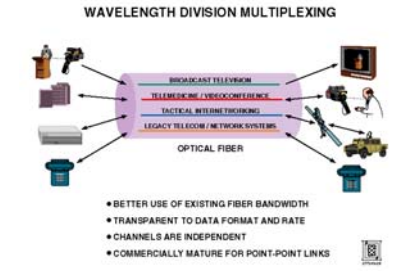
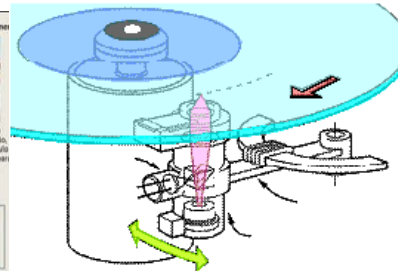


Cirurgia com Lasik, uma das técnicas de utilização do laser Eximer

Primeiro o cirurgião cria e desliza uma aba à superfície, denominada lenticula. Este é levantado e é agitado o laser para destruir algumas células e formar a córnea. O objetivo é alterar a forma da córnea para corrigir as erros refractivos. Uma vez realizado este processo de formação, volta a colocar o lenticulo no lugar, o qual funcionará como uma espécie de “pneu” nos dias seguintes à operação refractiva.

TIPOS DE ERROS REFRACTIVOS

Miopia Ponto focal Córnea Retina	Hipermetropia Ponto focal Córnea Retina	Asigmatismo Ponto focal Córnea Retina
---	--	--



Problemas (8)

1. a) Considere a teoria de Rutherford do átomo de hidrogénio. Calcule a frequência de revolução do electrão em torno do protão numa órbita de raio 0,1 nm. b) Verifique que $R=0,1$ nm não corresponde a uma órbita estacionária na teoria de Bohr. Considere o raio de Bohr igual a 0,053 nm.
2. Considere o modelo de Bohr do átomo de hidrogénio. Sabendo que o comprimento de onda mínimo das riscas correspondentes à série de Balmer (transições para o nível 2) é 364,6 nm, determine o comprimento de onda máximo da série de Lyman (transições para o nível 1).
3. Sabendo que as energias dos estados estacionários do átomo de hidrogénio são dados, na teoria de Bohr, por $E_n = -me^4 / [(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2]$, calcule a energia necessária para arrancar o electrão do ião lítio 2+ (ião *hidrogenoide* com $Z=3$).
4. a) Obtenha os comprimentos de onda do espectro Li^{2+} , no modelo de Bohr; b) Qual é a fracção de iões Li^{2+} excitados numa ampola contendo iões a 500 K? c) Pretende-se excitar o ião Li^{2+} por colisão inelástica com electrões acelerados por uma diferença de potencial V . Qual o valor mínimo de V necessário?
5. Derivar a expressão da frequência das riscas espectrais do átomo de hidrogénio na teoria de Bohr, considerando um núcleo de massa M . Mostre que, neste caso, a constante de Rydberg é $R_M = R_\infty / (1 + m/M)$, onde m representa a massa do electrão. (O caso tratado nas aulas teóricas corresponde a $M \rightarrow \infty$.) Esta distinção permite distinguir a presença de isótopos do hidrogénio como, por exemplo, o deutério, no espectro do hidrogénio.
6. O antiprotão tem a mesma massa e carga simétrica à do protão e forma com este um “átomo”, o *protónio*, semelhante ao átomo de H. a) Calcule as energias do seu estado fundamental e do primeiro estado excitado. [$\sim 918 \times 13,6$ eV; $\sim 330 \times 13,6$ eV] b) Calcule o “tamanho” do protónio. [0,58 pm]
7. Luz ultravioleta de 80 nm incide sobre o hidrogénio atómico. Calcule as energias cinéticas com que são arrancados os electrões dos átomos de H, exprimindo-os em eV (admita que é desprezável a probabilidade de encontrar átomos com energias superiores à do 1º estado excitado). Tome $R_H = 109677,581 \text{ cm}^{-1}$ e $E_1 = 13,6$ eV (energia do estado fundamental).
8. Diga justificando se são verdadeiras ou falsas as seguintes afirmações:
 - a) Para que haja efeito fotoeléctrico é necessário que a fonte luminosa tenha uma potência superior a um valor mínimo;
 - b) Na radiação do corpo negro existe um comprimento de onda máximo acima do qual não há energia radiada;
 - c) A teoria de Einstein da capacidade calorífica dos sólidos reduz-se à teoria clássica (Dulong e Petit) no limite das altas temperaturas;
 - d) Efeito de Compton: a alteração mínima da energia do fóton ocorre quando o comprimento de onda do fóton incidente é igual ao comprimento de onda de Compton λ_C ;
 - e) A energia de ionização do ião hidrogenoide He^* é superior à do átomo de hidrogénio (ambas inicialmente no estado fundamental);
 - f) O momento linear de um fóton não depende do comprimento de onda, mas apenas da temperatura;
 - g) A radiação emitida pelo corpo negro é monocromática;
 - h) No efeito fotoeléctrico a energia cinética dos electrões libertados depende da potência da fonte luminosa;
 - i) O momento linear de um fóton depende da temperatura.



Natureza ondulatória da matéria e princípio da incerteza



All of my meagre efforts go toward killing off and suitably replacing the concept of the orbital path which one cannot observe.

Heisenberg, letter to Pauli, 1925

The more precisely the position is determined, the less precisely the momentum is known in this instant, and vice versa. I believe that the existence of the classical "path" can be pregnantly formulated as follows: The "path" comes into existence only when we observe it.

In the sharp formulation of the law of causality - "if we know the present exactly, we can calculate the future" - it is not the conclusion that is wrong but the premise.

Heisenberg, in uncertainty principle paper, 1927

I knew of [Heisenberg's] theory, of course, but I felt discouraged, not to say repelled, by the methods of transcendental algebra, which appeared difficult to me, and by the lack of visualizability.

Schrödinger in 1926

The more I think about the physical portion of Schrödinger's theory, the more repulsive I find it...What Schrödinger writes about the visualizability of his theory 'is probably not quite right,' in other words it's crap.

Heisenberg, writing to Pauli, 1926

«Diálogo» entre Einstein e Heisenberg

Heisenberg: "We cannot observe electron orbits inside the atom...Now, since a good theory must be based on directly observable magnitudes, I thought it more fitting to restrict myself to these, treating them, as it were, as representatives of the electron orbits."

"But you don't seriously believe," **Einstein** protested, "that none but observable magnitudes must go into a physical theory?"

"Isn't that precisely what you have done with relativity?" I asked in some surprise...

"Possibly I did use this kind of reasoning," **Einstein admitted**, "but it is nonsense all the same....In reality the very opposite happens. It is the theory which decides what we can observe."

From Heisenberg, *Physics and Beyond*, Arnold J. Pomerans, trans. (New York: Harper, 1971), p. 63.

Princípio da correspondência

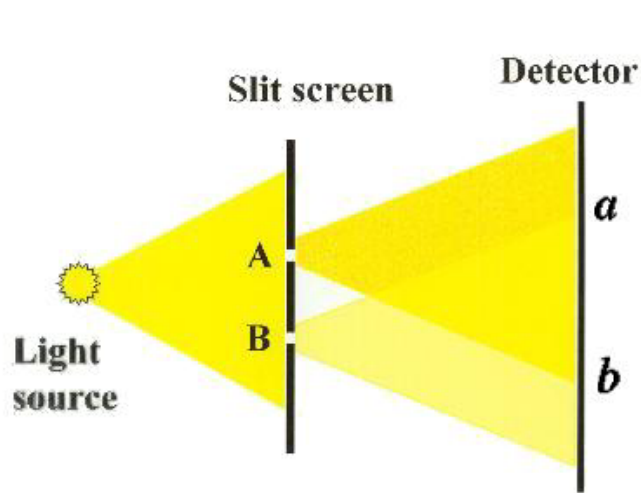
- *Conceito* formulado por Bohr atendendo à necessidade de por em paralelo as realidades, aparentemente contraditórias, do mundo quântico (*nanoscópico*), por um lado, e do mundo clássico, por outro. Em geral, todas as teorias da Física têm as suas limitações, mas não *perdem a validade* abruptamente, mas sim de uma maneira *suave*, dando resultados que concordam cada vez menos com a experiência. Por exemplo, as previsões da Mecânica Newtoniana tornam-se menos precisas, à medida que a velocidade tende para a da luz. Uma correlação semelhante existe entre as Físicas Quântica e Clássica: as grandezas quantizadas das observáveis tendem para o limite clássico quando os números quânticos associados ao sistema em questão tendem para o infinito. Contudo, convém referir que nem todas as grandezas quânticas tem a sua correspondência *clássica*. Pode-se invocar, como exemplo, os vários números quânticos encontrados na física de partículas, tais como o isospin, a estranheza, a hipercarga, o número leptónico e o número bariónico. No caso do spin, por exemplo, que é um momento angular, aceita-se que não há correspondência no mundo clássico, pois este só admite um número relativamente pequeno de valores projectados sobre o eixo de quantização. [Spin: momento cinético intrínseco do electrão e certas partículas fundamentais (como o protão e o neutrão), que não é devido ao facto de a partícula estar a descrever qualquer órbita, mas é uma propriedade caracteristicamente quântica] (Alerta-se que há autores que afirmam que existem sistemas clássicos com spin, razão pela qual este exemplo não é *pacífico*.)
- O raio da órbita do átomo de hidrogénio, correspondente ao estado de mais baixa energia (chamado estado fundamental), é obtido fazendo-se $n=1$ na equação para o raio *quantizado* obtém-se $R \sim 5,3 \times 10^{-11}$ m. Para $n=10\,000$, entretanto, o raio tornar-se-á $(10000)^2$ vezes maior, ou seja 5,3 mm. A este nível de separação espera-se que as frequências calculadas tanto pela teoria quântica quanto pela teoria clássica sejam praticamente iguais. Isto significa que os resultados deverão divergir para números quânticos pequenos e concordarem para números quânticos grandes.
- Em 1906, Planck mostrou que o limite $h \rightarrow 0$ «convertia» a sua teoria quântica na clássica: a distribuição de Planck converte-se na de Rayleigh-Jeans. A ideia geral da formulação do Princípio é que a teoria quântica tem de conter a teoria clássica com limite: as leis quânticas dever reduzir-se às clássicas, o que sugere a existência de uma correspondência entre qualquer lei quântica e a lei clássica.
- Arnold Sommerfeld mostrou que a formulação de Hamilton da mecânica era a ferramenta adequada ao formalismo da Mecânica Quântica e à aplicação do Princípio da Correspondência, observando que $\int p_k dq_k = n_k h$. [Este resultado foi a primeira indicação no sentido do princípio de incerteza (ver adiante).]
- O Princípio da correspondência permitiu, por exemplo, manter conceitos como energia, momento linear e momento angular.

Dualidade onda – corpúsculos da luz

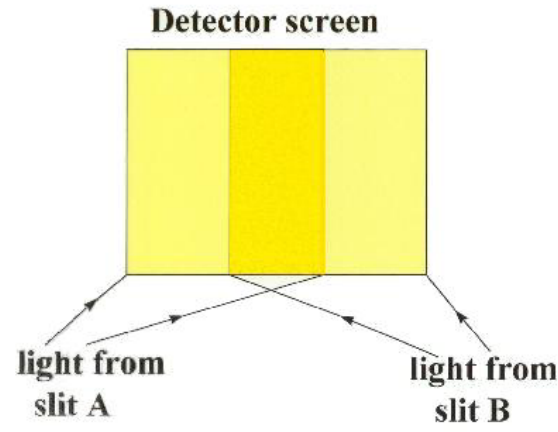
- De facto, a teoria da emissão, proposta por Newton em 1680, segundo a qual a luz é formada por um agregado de corpúsculos emitidos pela fonte luminosa, não sobrevivia aos fenómenos associados às experiências de interferência e difracção, levadas a cabo no início do século XIX, essencialmente por Young e Fresnel, insusceptíveis de serem explicados pela teoria corpuscular da luz. Estes fenómenos são facilmente explicados pela teoria ondulatória proposta por Huygens por volta de 1690. Os fenómenos de interferência são muito comuns na natureza (são facilmente observados, por exemplo, nas bolas de sabão, nas penas de pavão, nas asas de borboleta, etc.). Para que se observe difracção é necessário que as *dimensões* dos «objectos» que a provocam sejam da ordem do comprimento de onda da luz. Por conseguinte, se quiser observar fenómenos de difracção com raios x é necessário empregar um objecto com *protuberâncias* da ordem de 0,1 nm. Von Laue demonstrou, em 1912, que os cristais tinham essas características – as distâncias entre átomos são dessa ordem de grandeza. Em 1913, os Bragg mostraram que as respectivas figuras de difracção podiam ser interpretadas como resultado da interferência de *raios reflectidos* em diferentes planos da rede cristalina.
- Contudo, a teoria ondulatória era incapaz de esclarecer os processos de emissão e absorção da radiação pela matéria. Recordar que todos os átomos de um gás de hidrogénio, por exemplo, emitem a mesma série de linhas espectrais bem nítidas. Planck considerou em 1900 que as leis da radiação exigiam que a emissão e a absorção de energia pela matéria não tivessem lugar continuamente, mas por «quanta de energia» finitos $h\nu$. Na hipótese inicial de Planck, cada *risca* corresponde a um oscilador harmónico de frequência definida ν , que não pode absorver ou emitir uma quantidade arbitrária de energia, mas só múltiplos inteiros de $h\nu$.
- Einstein foi mais longe, em 1905, afirmando que tais propriedades são inerentes à própria natureza da radiação. Na hipótese dos quanta de luz (mais tarde designados fotões), a luz é constituída por quanta (corpúsculos) de energia $h\nu$ que se propagam no espaço como uma *saraivada de projecteis*, com a velocidade da luz no vazio. O efeito fotoeléctrico, uma transformação *directa* da luz em energia mecânica, é facilmente explicado se se admitir que a luz é constituída por quanta. Estas evidências foram reforçadas com as experiências de E. Meyer e W. Gerlach sobre o efeito fotoeléctrico em partículas de pó metálico.
- Os fenómenos até aqui referidos apenas indiciam que *a troca* de energia entre a luz e os átomos se realiza por quanta de energia. A natureza corpuscular da luz é claramente demonstrada claramente pelas leis da variação da frequência na experiência da dispersão dos raios x estudada por Compton, ininteligível pela teoria ondulatória. A dispersão de Compton corresponde a um processo em que a radiação se comporta como um corpúsculo de energia e momento linear bem definidos. Estes fenómenos não podem ser explicados pela teoria ondulatória, da mesma forma que os fenómenos de interferência não são reconciliáveis com a concepção corpuscular da radiação.
- As ideias a que chegámos até agora, no que respeita à estrutura da matéria, são confirmadas por experiências directas e indirectas, que revelam a existência de partículas cujas trajectórias podem ser «observadas», por exemplo, na câmara de Wilson. Estas experiências estabelecem, sem qualquer espécie de dúvida, que a matéria é formada por corpúsculos. Contudo, há também, como veremos, um conjunto de experiências que, de maneira igualmente definida, apenas parecem conciliáveis com a ideia de que um feixe molecular ou electrónico é um **trem de ondas** (do inglês, “wave train”).

Dualidade onda – corpúsculos da luz: fenómenos *ondulatórios*

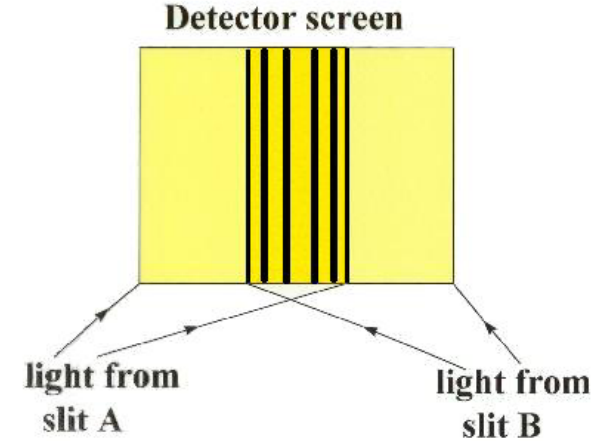
Experiência da dupla fenda (Young, ~1800)



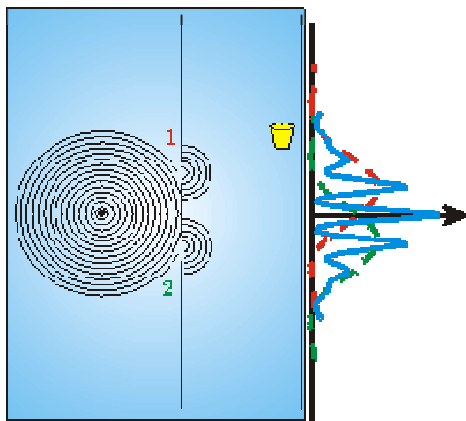
(Teoria corpuscular).



(Teoria ondulatória)



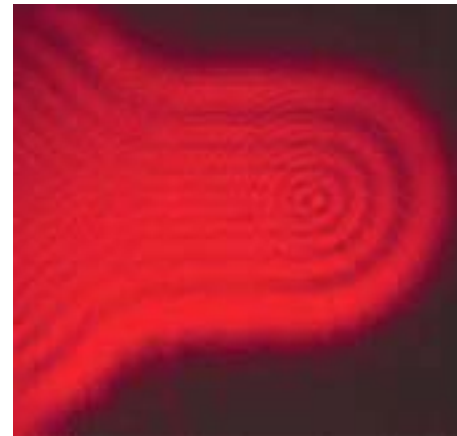
Interferência



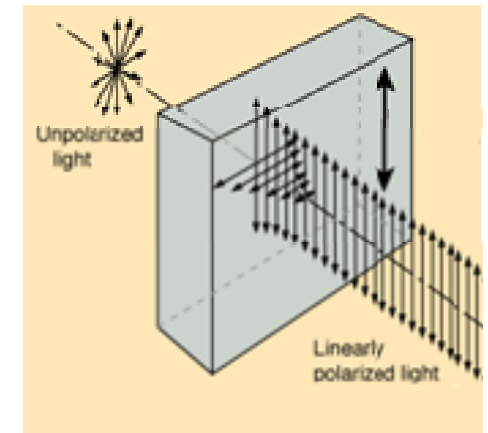
Interferência



Difracção



Polarização



Embora a reflexão e a refração da luz possam ser explicadas quer pela teoria ondulatória quer pela teoria corpuscular, os fenómenos de interferência, difracção e polarização não são explicados pela teoria corpuscular. Por outro lado, o efeito fotoeléctrico não tem explicação ondulatória.

(ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht, F. C. Gulbenkian).

Natureza ondulatória da matéria: proposta de de Broglie

- IFQR 2005-2006: Introdução à Física Quântica
- Em face dos resultados da experiência de Rutherford, o átomo é constituído por um núcleo maciço carregado positivamente em torno do qual orbitam os electrões (partículas de carga eléctrica negativa). No modelo de Bohr e de Sommerfeld, o átomo só pode existir em determinados estados estacionários discretos, com energias E_0, E_1, E_2, \dots . Deste modo só podem ser absorvidas as riscas do espectro para as quais $h\nu$ tenha exactamente um valor tal que possa *fazer passar* o átomo de um estado estacionário para outro de energia mais elevada: as riscas de absorção possíveis são pois definidas pelas igualdades $E_1 - E_0 = h\nu_1, E_2 - E_0 = h\nu_2, \dots$, onde E_0 representa a energia **do estado fundamental** (estado do átomo na ausência de qualquer perturbação exterior). Um átomo excitado pode apenas radiar quanta cuja energia seja igual à diferença das energias de dois estados estacionários, sendo as riscas de emissão dadas pela relação $E_n - E_m = h\nu_{nm}$.
 - O *dilema* onda – corpúsculos estendeu-se à matéria quando, em 1924, de Broglie propôs a hipótese segundo a qual o dualismo onda e corpúsculo que se observa na luz poderá também ocorrer na matéria. Assim, a uma partícula material corresponderá uma *onda de matéria*, como a um quantum de luz corresponde uma onda luminosa, sendo a conexão entre os dois aspectos «opostos» dada pela relação $E = h\nu$. Como, sob o ponto de vista da teoria da relatividade, energia e momento linear são entidades da mesma espécie (o momento linear é a parte espacial de um *quadrivector relativístico*, cuja componente temporal é a energia), parece óbvia a sugestão de de Broglie de escrever, por coerência, $p = h\kappa = h/\lambda$, onde $\kappa = 1/\lambda$ representa o número de ondas por unidade de comprimento (assim como $\nu = 1/T$ corresponde ao número de vibrações por unidade de tempo). Ter presente que aqui, E e p referem-se a uma massa pontual; ν e κ , pelo contrário, reportam-se a uma onda infinitamente extensa no espaço e no tempo.
 - De acordo com a hipótese de de Broglie, a uma partícula pontual com momento p na direcção do eixo dos xx e energia E , deve associar-se uma onda infinitamente extensa da forma $u(x,t) = Ae^{i(\omega t - kx)}$, por meio das duas relações $E = \hbar\omega$ e $p = \hbar k$, onde $\omega = 2\pi\nu$ e $k = 2\pi\kappa$. Esta onda propaga-se no espaço, com uma velocidade definida, a velocidade de fase V_f : $V_f = (dx/dt)_{\phi=\text{const}} = \omega/k$. Ter presente que a velocidade de fase de uma onda não se pode determinar experimentalmente (é uma concepção *puramente* artificial). Fisicamente apenas faz sentido falar na velocidade de grupo V_g da onda, dada por $V_g = (d\omega/dk)_{\phi=\text{const}}$, que corresponde à velocidade com que se pode transmitir informação. Verifica-se que a velocidade de fase da onda associada a uma partícula livre com velocidade V é dada por $V_f = c^2/V$, sendo, portanto, superior à velocidade da luz no vácuo. As superfícies de fase constante da onda de matéria propagam-se, portanto, com velocidade que excede a da luz no vácuo – uma indicação que, de acordo com a teoria da relatividade, a velocidade de fase não tem significado físico. Para a velocidade de grupo V_g obtém-se $V_g = V$, que é inferior à velocidade da luz no vácuo para partículas com massa de repouso não nula.
- (Ver, por exemplo, *Física Atómica*, Max Born, Fundação Calouste Gulbenkian).

«Demonstrações» experimentais da natureza ondulatória da matéria

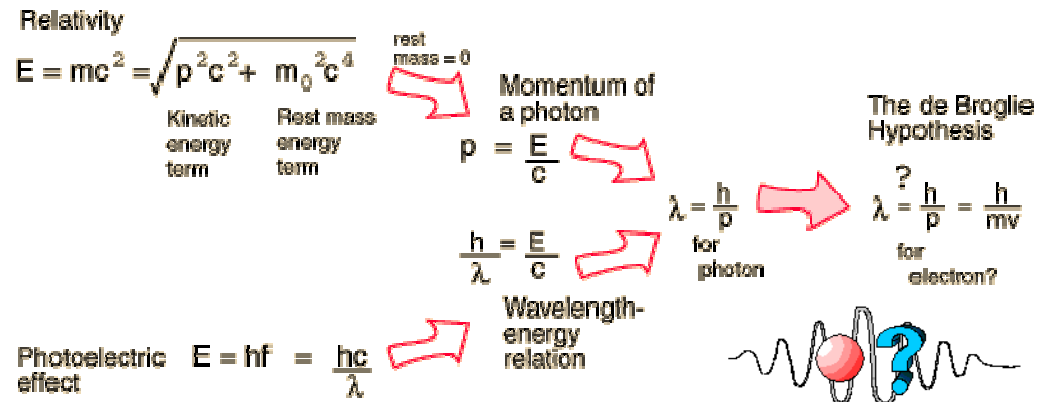
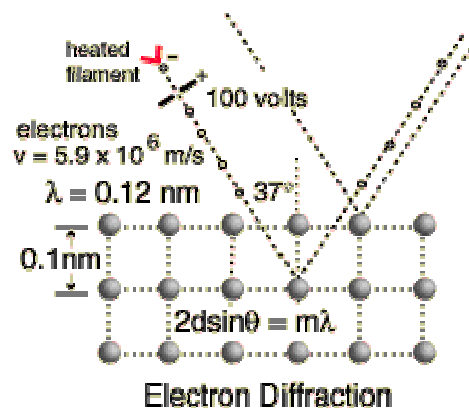
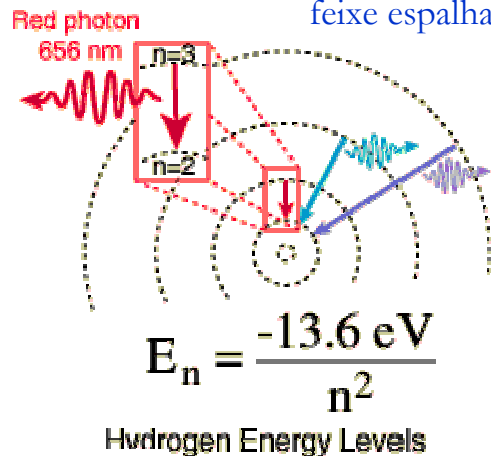
- Estes resultados permitem interpretar uma partícula material como um feixe de ondas resultante da sobreposição de um certo número de trens de ondas. Esta interpretação tentadora esbarra, todavia, com dificuldades *insuperáveis*, visto que um feixe de ondas desta natureza dissipar-se-ia rapidamente. Considere-se o caso das ondas na água: o aparecimento de uma crista de onda em qualquer ponto da superfície da água provoca a formação de cristas em todos os outros pontos, em resultado do espalhamento da onda, acabando esta por desaparecer rapidamente.
- Em 1925, Einstein fez notar que a concepção ondulatória da matéria fornece uma explicação simples da *degenerescência* dos electrões nos metais, que se traduz pelo comportamento anormal destes no que respeita à capacidade calorífica. (Ter presente que a teoria de Bohr se fundamentava essencialmente na suposição que o electrão é um corpúsculo carregado de electricidade.)
- Elsasser propôs, em 1925, a hipótese de que um feixe de electrões sofreria difracção por uma rede metálica, à semelhança do que ocorre na interferência de raios x em cristais; Davisson e Germer, em 1927, investigaram a *reflexão* de feixes de electrões por metais, observando desvios em relação ao resultado previsto pelos princípios clássicos, pois umas direcções espalhavam mais electrões do que outras, como se tivesse lugar uma espécie de *reflexão* selectiva sob certos ângulos. Uma das vantagens do uso de ondas electrónicas, quando comparado com o raios x, é a facilidade de construção de lentes, permitindo a construção, por exemplo, de microscópios electrónicos. A natureza ondulatória da matéria foi também demonstrada usando neutrões lentos. Stern e colaboradores observaram, em 1932, a natureza ondulatória de feixes *moleculares* de H₂ e He.
- Estas experiências de difracção com partículas materiais demonstram que a estrutura ondulatória da matéria é uma propriedade geral: a mecânica clássica deve ser substituída, a nível nanoscópico, por uma *nova mecânica ondulatória*. Os factos experimentais parecem indicar inequivocamente que não só a luz mas também as partículas materiais se comportam, em algumas situações, como um processo ondulatório e, em outros casos, como corpúsculos. Parece, pois, haver uma contradição entre estes dois comportamentos.
- Schrödinger procurou interpretar os corpúsculos materiais, em particular os electrões, como um feixe de ondas (“wave packets”). Contudo, como referido anteriormente, estes feixes de onda deviam dissipar-se com o decorrer do tempo.
- A interpretação geralmente aceite é que qualquer processo mecânico é acompanhado por um processo ondulatório, uma *onda piloto*, descrita, como veremos mais tarde, pela equação de Schrödinger, cujo significado é o de fornecer a probabilidade de um dado comportamento do processo mecânico (Born). Esta interpretação levanta alguns problemas conceptuais e *existenciais*. Por exemplo, será que as ondas e corpúsculos existem realmente?

Experiência de Davisson-Germer

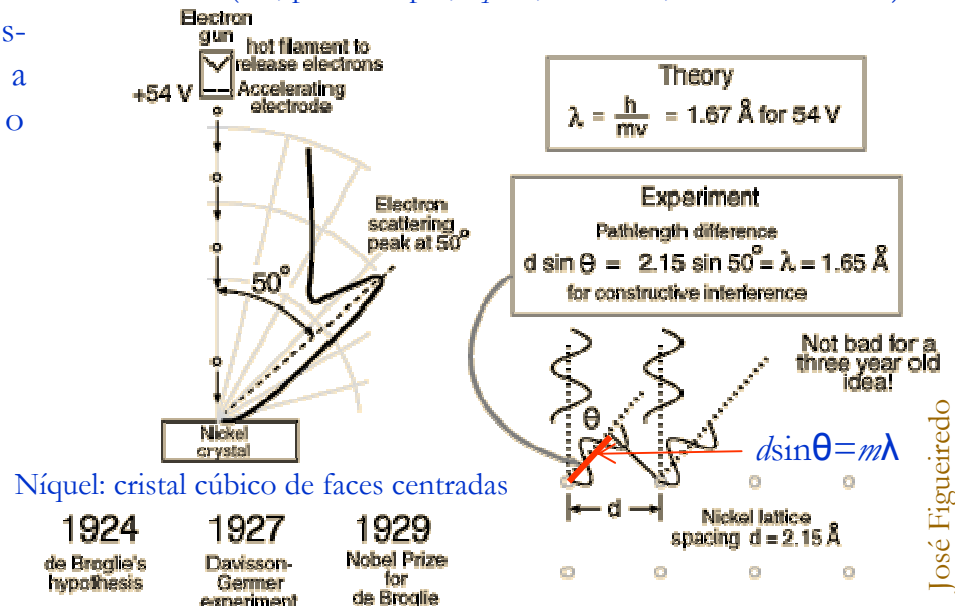
O efeito fotoelétrico apontava para que uma onda luminosa também tivesse um comportamento corpuscular. Louis De Broglie colocou a hipótese que os electrões e outras “partículas” exibiriam também propriedades ondulatórias: a aplicação da relatividade e das ideias ondulatórias apontavam para uma possibilidade interessante, ao electrão está associado um comprimento de onda. Os espectros atómicos discretos e a difracção de electrões em cristais suportam a hipótese de DeBroglie:

a natureza ondulatória do electrão deve ser invocada para explicar o seu comportamento quando confinado num volume da ordem do do átomo. Como veremos mais tarde, a natureza ondulatória é usada em mecânica quântica no estudo de uma “**partícula numa caixa**”. Os resultados deste modelo são usados para descrever a densidade de estados de energia dos electrões nos sólidos.

A experiência de Davisson-Germer demonstra a natureza ondulatória dos electrões, colocando a dualidade onda-partícula em «terreno seguro», representou um passo em frente no desenvolvimento da mecânica quântica. A relação de Bragg já havia sido aplicada à difracção dos raios-x, aplicando-se também na descrição da difracção de ondas associadas a partículas materiais: $2d\sin\theta = m\lambda$, onde θ representa o ângulo entre o feixe espalhado e os planos de atómicos.



Relação de Bragg: $d\sin\theta = m\lambda$, onde θ representa o ângulo entre o feixe espalhado e a perpendicular aos planos de atómicos. (ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht, F. C. Gulbenkian).

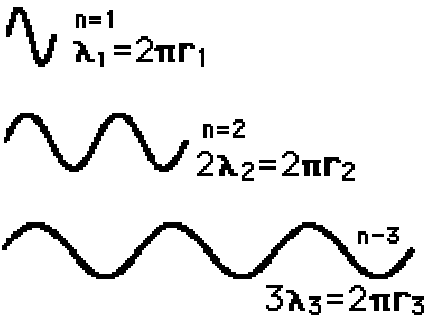


A teoria ondulatória da matéria e o modelo de Bohr do átomo

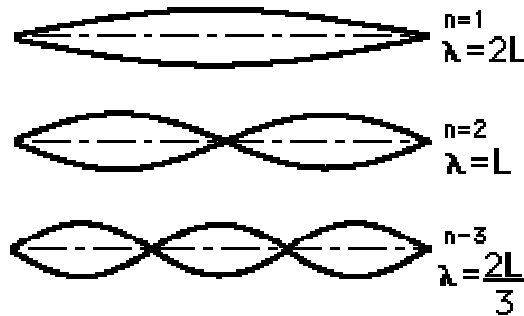
Guitarra, ondas *electrónicas* e os raios de Bohr no átomo de hidrogénio

Perguntar porque é que só existem determinados estado possíveis num átomo, é semelhante a perguntar como é que uma guitarra sabe que altura de som (frequência) deve produzir quando as suas cordas são percutidas.

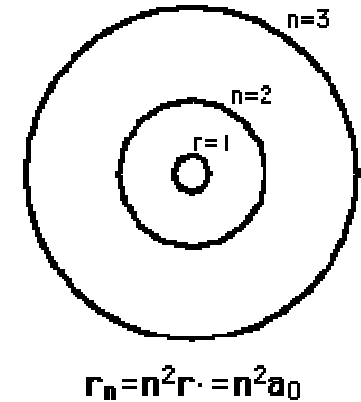
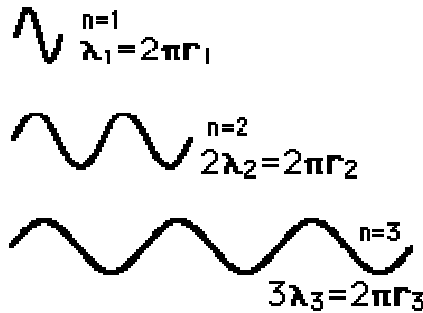
Electron wave resonance



String resonance modes

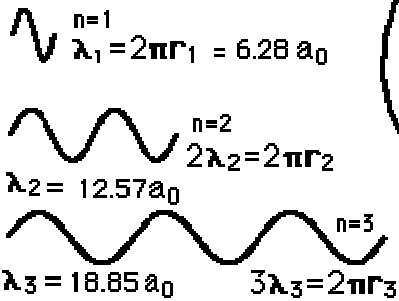


Electron wave resonance



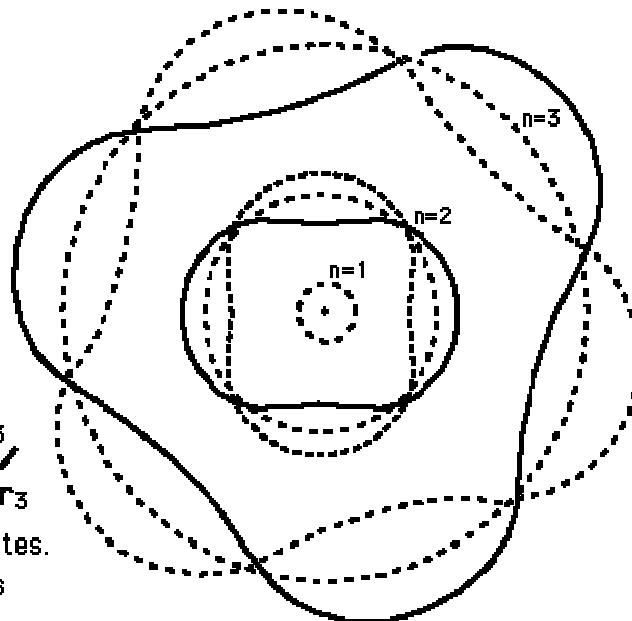
For a hydrogen atom:

Electron wave resonance



Wavelengths for hydrogen states.

$$a_0 = 0.529 \text{ \AA} = \text{Bohr radius}$$



O modelo de Bohr do átomo correspondeu a uma passo significativo no sentido da teoria moderna do átomo, postulando que o momento angular do electrão está quantizado, dando origem aos níveis de energia discretos permitidos. Os desenvolvimentos da teoria quântica e a proposta da equação de Schrödinger permitiram refinar os modelos atómicos e compreender os espectros descontínuos (valores de energia atómicos) obtidos.

Eliminação das contradições entre as teorias ondulatória e corpuscular

- Segundo Bohr, “todo o curso dos acontecimentos é determinado pelas leis de probabilidade”: a um estado no espaço corresponde uma probabilidade definida que é dada pela onda de de Broglie associada ao referido estado. Se, por exemplo, a amplitude da onda piloto associada a uma partícula material for zero num dado ponto do espaço, corresponde ao facto de que a probabilidade de encontrar essa partícula material nesse ponto é infinitamente pequena.
- Para Heisenberg, os conceitos de corpúsculo e onda devem sujeitar-se a um minucioso exame crítico. Por exemplo, ao conceito de corpúsculo está necessariamente associada a ideia de que *a coisa em questão* possui um momento linear bem definido e ocupa uma posição definida no instante considerado. Contudo, podemos realmente determinar exactamente a posição e a velocidade da «coisa» num dado momento? De facto, como veremos, é incompatível com as leis da mecânica quântica, firmemente alicerçadas na experiência, determinar simultaneamente a posição e a velocidade de uma partícula nanoscópica.
- Qualquer processo pode ser interpretado seja em termos de corpúsculos seja em termos de ondas. Contudo, está para além das nossas possibilidades *provar* que estamos realmente lidando com corpúsculos ou com ondas, pois não podemos determinar simultaneamente todos as outras propriedades que caracterizam um corpúsculo ou uma onda, conforme o caso. As descrições ondulatória e corpuscular devem ser apenas encaradas como maneiras complementares de conceber o mesmo e único processo objectivo, o qual só em casos limites definidos admite uma interpretação intuitiva completa.
- A descrição corpuscular significa ao fim e ao cabo que realizamos medições com o objectivo de obtermos informação *exacta* acerca das relações do momento linear e da energia (como, por exemplo, no efeito de Compton), enquanto as experiências que implicam determinação de posição e tempo podem ser intuídas em termos da representação ondulatória (por exemplo, a observação do padrão de difracção de electrões).
- Para Bohr os aspectos corpuscular e ondulatório são complementares: se demonstrarmos o carácter corpuscular de uma experiência, não será possível verificar ao mesmo tempo o seu carácter ondulatório, e inversamente. Ter presente que falar de uma partícula só tem significado se pudermos especificar experimentalmente pelo menos dois pontos da sua trajectória e, do mesmo modo, para uma onda, só quando forem observados pelo menos dois máximos de interferência.
- O dualismo onda-corpúsculo e a indeterminação a ele associada «coage-nos» a abandonar qualquer tentativa de instituir uma teoria determinista. A lei da causalidade, segundo a qual o curso dos eventos num sistema isolado é completamente determinado pelo estado do sistema num instante anterior, perde a sua validade, pelo menos no sentido da Física Clássica.

Considerações filosóficas acerca do dualismo onda-corpúsculo

- Uma «solução» consiste em descrever o estado instantâneo de um sistema por uma grandeza complexa (**função de onda**), que satisfaz a uma equação diferencial e, portanto, varia com o tempo de maneira completamente determinada pela sua forma no instante anterior, de modo que o seu comportamento é rigorosamente causal. Todavia, a significação física não está contida na **função de onda**. De acordo com Max Born, o significado físico – a *informação* – está contido no quadrado do seu módulo (*quadrado da amplitude*) e a outras expressões quadráticas construídas analogamente (elementos de uma matriz), que só parcialmente definem a função de onda. Resulta, portanto, que mesmo quando as grandezas fisicamente determináveis são completamente conhecidas do instante anterior, o valor inicial da função de onda não é necessariamente definível de maneira completa.
- Esta maneira de ver a questão é equivalente a afirmar que os acontecimentos se sucedem na realidade de uma maneira estritamente causal, mas que não conhecemos exactamente o estado inicial. Por conseguinte, nesse sentido, a lei da causalidade é vazia: a Física é indeterminista pela natureza das coisas e, portanto, do domínio da estatística. A razão primacial do *fracasso* da teoria de Bohr do modelo do átomo, para Heisenberg, é que ela faz intervir grandezas que escapam inteiramente à observação. Por exemplo, a teoria fala da órbita e da velocidade de um electrão em torno do núcleo, sem considerar que não podemos determinar a posição do electrão no átomo, a não ser destruindo imediatamente todo o *edifício* atómico. De facto, a fim de definirmos com qualquer rigor, a sua posição no átomo, cujo diâmetro é da ordem de algumas décimas de nanómetro, devemos *observar* o átomo com luz de comprimento de onda inferior ao da ordem de dimensão do átomo. Deve-se irradiar o átomo com raios x de alta energia ou raios gama. Contudo, usando esta radiação, o recuo de Compton dos electrões é suficientemente elevado para ionizar o átomo, quebrando-se a ligação dos electrões ao átomo.
- Assim, e de acordo com Heisenberg, a teoria de Bohr falha porque as ideias fundamentais em que se baseia (a imagem das órbitas, a validade das leis clássicas do movimento, etc.) não podem ser postas à prova. Heisenberg «postulou» que, para se construir uma «nova mecânica atómica» logicamente coerente, não devem ser *introduzidas* na teoria quaisquer entidades que não sejam fisicamente observáveis – como, por exemplo, as órbitas de um electrão – mas tão-somente as frequências e intensidades da luz emitida pelo átomo, essas sim observáveis. Tendo em conta este postulado, Heisenberg lançou os princípios orientadores de uma teoria desenvolvida, em 1925, por ele, Born e Jordan, a chamada «**mecânica das matrizes**», concebida para substituir a mecânica atómica de Bohr. Este teoria acumulou bastantes êxitos.
- Veremos mais tarde que Schrödinger mostrou que esta formulação é idêntica à mecânica ondulatória.

Princípio de incerteza de Heisenberg

Na Física Clássica está implícita a ideia de que qualquer grandeza associada ao movimento de uma partícula pode ser medida e descrita de modo exacto. Por exemplo, pode-se medir simultaneamente a posição e a velocidade de uma partícula sem perturbar o seu movimento. De acordo com a teoria quântica, o acto de medir perturba a partícula, alterando o seu movimento. Para compreender este facto, considere-se, como exemplo, a tarefa de *fotografar* um electrão do átomo de hidrogénio. Da Óptica sabe-se que, devido ao fenómeno de difracção, dois pontos separados por uma distância D podem ser resolvidos, ou seja, observados como distintos, se a observação for realizada usando radiação electromagnética de comprimento de onda λ menor ou de ordem da distância D entre os pontos. Tendo em conta que o raio de Bohr para o electrão no átomo de hidrogénio é $\sim 0,05$ nm, para *fotografá-lo* é necessário, portanto, usar radiação electromagnética com comprimento de onda $\lambda \sim 0,05$ nm. Tomando $v \sim 300$ Mm/s e $h \sim 4,14 \times 10^{-15}$ eV e levando em conta as expressões $v = c/\lambda$ e $E = hv$, segue-se que a radiação electromagnética em questão deve ter uma energia $E \sim 2,5 \times 10^4$ eV. Como a energia de *ligação* do electrão no átomo de hidrogénio é $\sim 13,6$ eV, *bombardear* esse electrão com radiação electromagnética de energia 10^4 eV, para *medir* a sua posição altera completamente a sua velocidade. Como, quanto maior for a precisão com que se pretende determinar a posição do electrão, menor deve ser o comprimento de onda da radiação a ser empregar (maior a sua energia), maior será a perturbação na velocidade do electrão e, portanto, maior será a incerteza na velocidade determinada. Este facto é consequência do princípio de incerteza de Heisenberg.

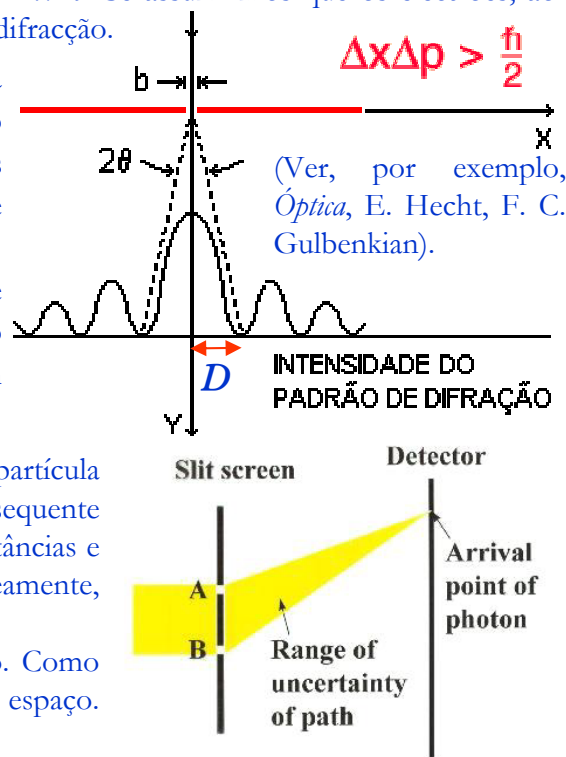
Considere-se que se pretende determinar a coordenada x dos electrões que se movem ao longo do eixo y (ver figura), observando se eles passam ou não através de uma fenda de largura b . A incerteza Δx na medida da coordenada x é dada pela largura da fenda: $\Delta x = b$. Se assumirmos que os electrões, ao passarem pela fenda, se comportam como uma onda produzem um padrão de máximos e mínimos associado à difracção.

O movimento dos electrões é, portanto, perturbado ao passar pela fenda, de modo que esta introduz uma incerteza Δp_x na componente x do momento linear dos electrões. Esta componente pode ser estimada pelo ângulo θ , correspondente ao primeiro mínimo do padrão de difracção, pois mais de 90% das trajectórias mais prováveis estão contidas no ângulo 2θ . Usando a relação $\sin\theta = \lambda/b$, da teoria ondulatoria, e a relação de de Broglie $p = h/\lambda$, resulta: $\Delta p_x \sim p_x \sin\theta = (h/\lambda)(\lambda/b) \sim h/\Delta x$ ou $\Delta p_x \Delta x \sim h$ (mostra-se que $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$).

Da expressão verifica-se que o produto das incertezas Δx e Δp_x é da ordem de grandeza da constante de Planck. Como consequência, diminuindo-se uma das *incertezas*, a outra aumenta na mesma proporção: o estreitamento da fenda (diminuição de b) para reduzir a incerteza na medida da coordenada x , acarreta um alargamento da região central do padrão de difracção, ou seja, um aumento na incerteza da componente p_x .

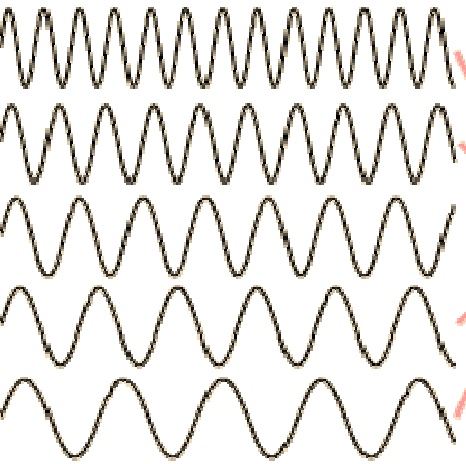
Classicamente, a perturbação introduzida num sistema qualquer para medir a posição e o momento de cada partícula que o constitui pode ser tão pequena quanto se queira, podendo-se determinar exactamente o movimento subsequente das partículas. Na teoria Quântica, uma tal descrição exacta de sistemas nanoscópicos que envolvam nano-distâncias e *pequenos* momentos lineares não é possível, já que, pelo princípio de incerteza, não se pode determinar simultaneamente, e com precisão arbitrária, a posição e o momento de cada partícula que constitui tais sistemas.

Assim, conceitos como órbita, por exemplo, não podem ser mantidos numa descrição quântica do átomo. Como veremos, o que se pode conhecer é a probabilidade de encontrar um ou outro electrão numa dada região do espaço. Estas distribuições de probabilidade definem o que se chama orbitais do electrão no átomo.



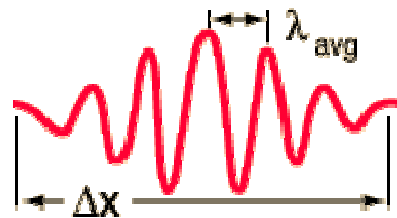
Relações de incerteza de Heisenberg

Precisely determined momentum



A sine wave of wavelength λ implies that the momentum p is precisely known: $p = \frac{h}{\lambda}$. But the wavefunction and the probability of finding the particle $\psi^*\psi$ is spread over all of space. p precise x unknown

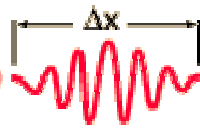
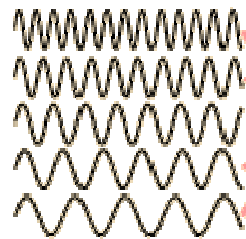
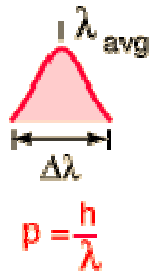
Adding several waves of different wavelength together will produce an interference pattern which begins to localize the wave.



but that process spreads the momentum values and makes it more uncertain. This is an inherent and inescapable increase in the uncertainty Δp when Δx is decreases.

$$\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$$

A continuous distribution of wavelengths can produce a localized "wave packet".



Each different wavelength represents a different value of momentum according to the DeBroglie relationship.

Superposition of different wavelengths is necessary to localize the position. A wider spread of wavelengths contributes to a smaller Δx .

$$\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$$



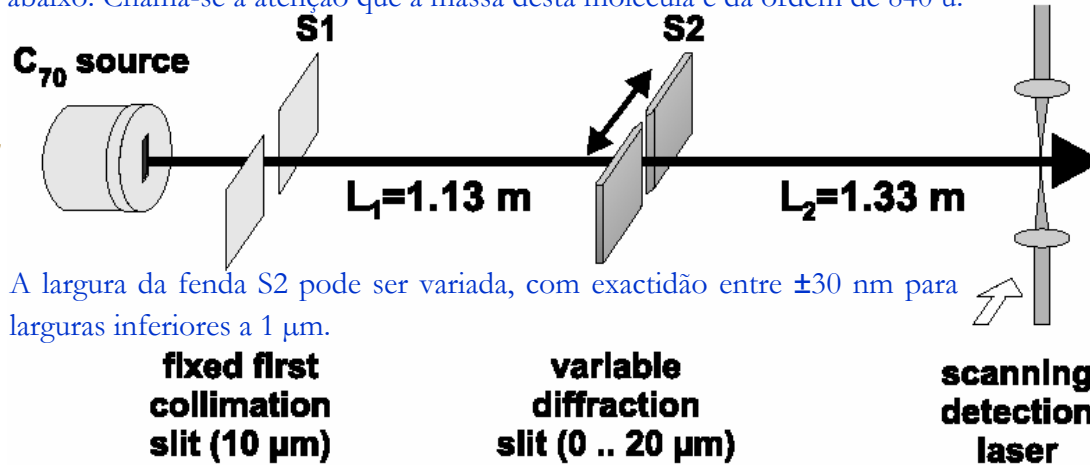
$$\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \Delta t > \frac{\hbar}{2}$$

- O princípio de incerteza verifica-se para qualquer par de grandezas ditas complementares.
- Considere-se, a título de exemplo, que se pretende medir a energia de um estado possível de um sistema. Se o intervalo de tempo disponível para medir a energia é Δt , então a incerteza na medida da energia do estado E satisfaz a seguinte relação: $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$.
- Considere-se um átomo num estado excitado. Se identificarmos Δt com o seu tempo de vida médio τ , verifica-se que a energia do estado está, grosso modo, compreendida entre os seguintes valores: $E - \Delta E/2$ e $E + \Delta E/2$. [Um estado de energia perfeitamente definido ($\Delta E = 0$) tem um tempo médio de vida τ infinito (estado ligado).]
- Ter presente o princípio da incerteza não resulta de uma incerteza devida aos instrumentos ou à qualidade dos métodos experimentais usados. Mas resulta das propriedades inerentes à descrição quântica da natureza. Mesmo com instrumentos *perfeitos* a incerteza é intrínseca à natureza das coisas.
- A demonstração rigorosa das relações de incerteza requer o emprego da teoria de Fourier (ver, por exemplo, *Física Atómica*, Max Born, Fundação Calouste Gulbenkian, pp. 168 e 426).

Verificação experimental do princípio de incerteza com moléculas de C₇₀

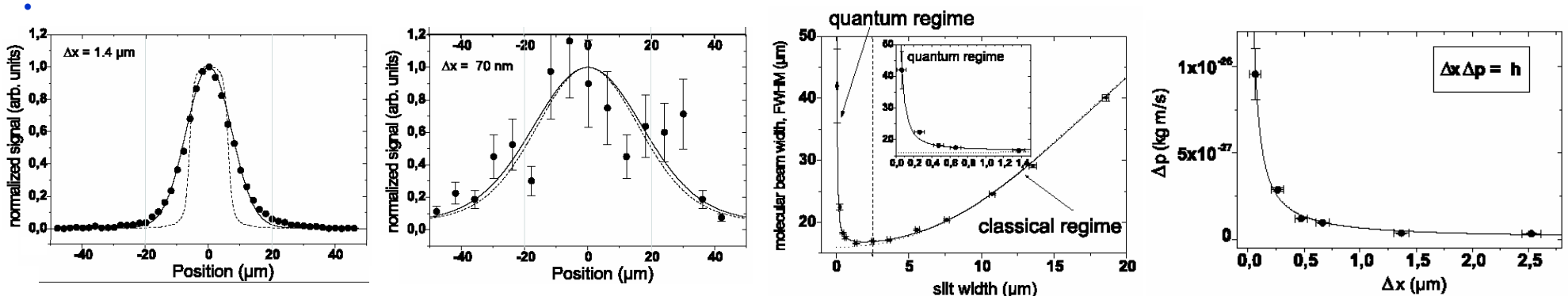
- A complementaridade é um dos paradigmas essenciais da mecânica quântica. A ideia consiste no seguinte: duas grandezas são mutuamente complementares quando o conhecimento completo (ou parcial) de uma implica o desconhecimento completo (ou parcial) da outra, e vice-versa. O caso mais conhecido é a complementaridade entre o momento e a posição, expressa pela relação de incerteza de Heisenberg: $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar/2$.
- O princípio de incerteza de Heisenberg para objectos materiais é uma pedra angular da mecânica quântica e «demonstra» a natureza ondulatória da matéria. A igualdade na relação $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar/2$ verifica-se apenas para um tipo particular de pacote de ondas: as ondas gaussianas.
- O que se segue é uma adaptação do artigo “*Experimental verification of the Heisenberg uncertainty principle for hot fullerene molecules,*” Olaf Nairz, Markus Arndt, Anton Zeilinger (ver http://arxiv.org/PS_cache/quant-ph/pdf/0105/0105061.pdf ou <http://prola.aps.org/abstract/PRA/v65/i3/e032109>). Neste artigo reporta-se a verificação experimental do princípio de incerteza de Heisenberg para a molécula de fullereno C₇₀, usando a montagem experimental indicada abaixo. Chama-se a atenção que a massa desta molécula é da ordem de 840 u.



A largura da fenda S2 pode ser variada, com exactidão entre ± 30 nm para larguras inferiores a 1 μm .

- Considere-se um feixe de moléculas passando pela fenda S2. Pode-se considerar a largura da fenda como uma medida da incerteza posicional Δx . A incerteza no momento Δp pode ser relacionada com a expansão do feixe devido à difracção na fenda. Quantitativamente pode-se definir Δp_x como o momento necessário para atingir o primeiro mínimo de interferência. Para pequenos ângulos tem-se: $\theta \approx \lambda / \Delta x = \Delta p / p = \lambda \Delta p / h$.

Um feixe térmico efusivo de C₇₀ é produzido por sublimação de pó de fullereno a 900 K. O feixe é «estretado» usando a fenda S1 (10 μm) e difractado pela fenda S2. A largura da fenda S2 pode ser variada, com exactidão entre ± 30 nm para larguras inferiores a 1 μm (usando um sistema da Piezosysteme Jena).



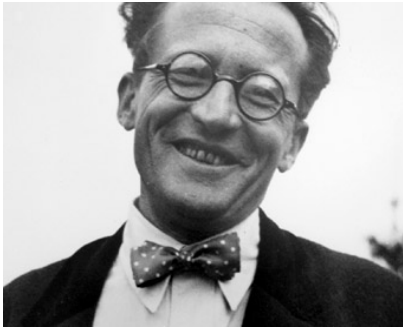
Problemas (9)

1. Considere uma bola de ténis com massa 0,15 kg, deslocando-se com velocidade de 40 m/s. Determine o comprimento de onda associado a este corpo. Compare o valor obtido com a dimensão típicas do átomo e do núcleo atómico. Comente o resultado. [$\sim 1 \times 10^{-34}$ m]
2. Considere um electrão, acelerado por uma diferença de potencial de 100 V. Assumindo que o electrão parte do repouso, determine o comprimento de onda a ele associado. Compare o valor obtido com o *menor* comprimento de onda da radiação visível. (Tenha cuidado de verificar se é necessário usar as expressões relativistas). [0,12 nm]
3. Determine o comprimento de onda de de Broglie da função de onda associada a um electrão com energia cinética 10 eV. [0,39 nm]
4. Considere uma partícula de massa 1 μg confinada numa caixa unidimensional com $L=1 \mu\text{m}$. Determine a energia cinética mínima da partícula e a correspondente velocidade. E se for um electrão confinado num poço de largura 0,1 nm. Comente os resultados. [$3,47 \times 10^{-29}$ eV; $\sim 1 \times 10^{-19}$ m/s; 3,81 eV; $\sim 1 \times 10^6$ m/s]
5. O que é que acontece à energia do ponto zero de uma partícula numa caixa unidimensional à medida que a largura L da caixa tende para infinito? Porque é que o princípio de incerteza não é notado em objectos macroscópicos.
6. Considere que as dimensões típicas de um átomo e do núcleo atómico são da ordem de, respectivamente, 0,4 nm e 20 fm. a) Determine a incerteza do momento linear do electrão no átomo e do protão no núcleo. [$1,66 \times 10^{-24}$ kgm/s; $3,31 \times 10^{-20}$ kgm/s] b) Estime a *energia de confinamento* do electrão no átomo e do protão no núcleo atómico. [~ 10 eV; ~ 2 MeV] (Tenha cuidado de verificar se é necessário usar as expressões relativistas).
7. Tendo em conta os dados do problema anterior, mostre que se o electrão fosse confinado ao volume nuclear a sua energia de confinamento seria da ordem de 3,8 GeV (Este valor é muito superior à energia associadas aos diferentes processos nucleares, indicando que o electrão não pode estar confinado no núcleo).
8. A maioria dos estados atómicos excitados decai, isto é, emitem um fóton 10 ns após a excitação (o tempo de vida do estado é 10 ns). Qual é a incerteza mínima na energia e na frequência do fóton emitido? [$6,6 \times 10^{-8}$ eV; $\Delta\nu \geq 1,6 \times 10^7$ Hz]
9. Usando o princípio de incerteza determine o tamanho e a energia do estado fundamental do átomo de hidrogénio. [Seja um electrão de momento p e à distância R do protão: $E=p^2/2m-k_e^2/R$; o raio do átomo do átomo de hidrogénio e a energia mínima igualando a zero a derivada da energia em ordem a R e substituindo o valor de R obtido na expressão da energia: 0,0529 nm; -13,6 eV]
10. Mostre que o princípio de incerteza implica que uma partícula confinada num espaço finito não pode ter energia cinética igual a zero. [Considere uma caixa unidimensional de largura $L/2$: $\Delta x \leq L/2$, o que implica que $\Delta p \geq \hbar/L$, $(\Delta p)^2 = (p - \langle p \rangle)^2 = \langle p^2 \rangle$, uma vez que a caixa é simétrica e, portanto, o momento médio é igual a zero, obtendo-se para a energia cinética $E = \langle p^2 \rangle / 2m = \hbar^2 / 2mL^2$ (este mínimo de energia da partícula numa caixa designa-se correntemente como energia do ponto zero)]



«Une intelligence qui pour un instant donné connaîtrait toutes les forces dont la nature est animée, et la situation respective des êtres qui la composent, si d'ailleurs elle était assez vaste pour soumettre ces données à l'analyse, embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'univers et ceux du plus léger atome: rien ne serait incertain pour elle, et l'avenir comme le passé serait présent à ses yeux.»

Essai Philosophique sur les probabilités, Pierre Simon de Laplace (1749-1827)



Introdução à Mecânica Quântica



Não se obtém uma resposta à questão «qual é o estado após a colisão?», mas apenas à questão «quão provável é um dado efeito de colisão?» [...] Do ponto de vista da nossa mecânica quântica, não há quantidade [Größe] que causalmente fixe o efeito de uma colisão num acontecimento individual. Será possível descobrir tais propriedades mais tarde [...] e determiná-las em acontecimentos individuais? [...] Pessoalmente, sinto-me inclinado a renunciar ao determinismo no mundo atómico, mas isto é uma questão filosófica, para a qual só argumentos físicos não estabelecem normas.

Max Born, *Z. Phys.*, 37, 863, 1926

A minha ideia de considerar o campo ondulatório de Schrödinger como um *Gespensterfeld* {*campo fantasma*} no seu sentido da palavra prova ser cada vez mais útil [...] O campo da probabilidade propaga-se, naturalmente, não no espaço ordinário, mas no espaço de fase (ou espaço de configuração). Max Born, carta a Einstein, 1926

«A natureza intrínseca da teoria quântica [...] força-nos a considerar a coordenação espaço-temporal e a exigência de causalidade, cuja união caracteriza as teorias clássicas, como características complementares, mas exclusivas, da descrição, simbolizando, respectivamente, a idealização da observação e da definição.» - *primeiro enunciado do princípio da complementaridade*, N. Bohr, *Nature*, 121, 580, 1928.

Adaptado de A. Pais (ver bibliografia)

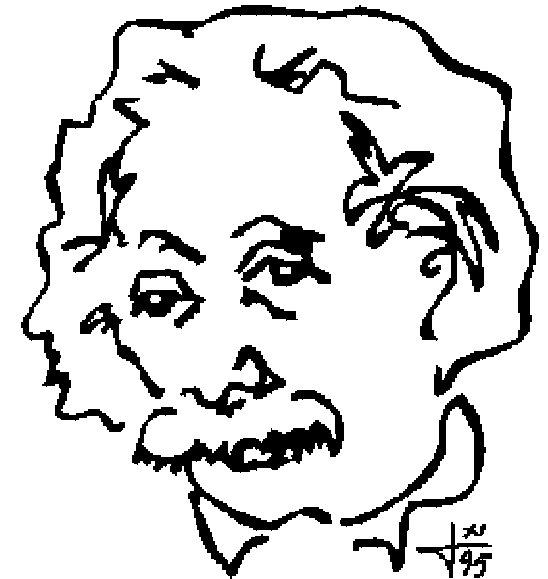
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

“Será que a Lua está lá quando não olhamos para ela?”*

(Einstein, ~1950).

*Ver *Is the moon there when nobody looks? Reality and the quantum theory*, N. David Mermin, PHYSICS TODAY, APRIL 1985, PAG. 38-47

“Einstein maintained that quantum metaphysics entails spooky actions at a distance; experiments have now shown that what bothered Einstein is not a debatable point but the observed behaviour of the real world.”



Função de onda

▪ Após a proposta de de Broglie, Schrödinger procurou interpretar os corpúsculos materiais, em particular os electrões, como um feixe de ondas (“wave packets”) materiais. Contudo, estes feixes de onda deviam dissipar-se rapidamente com o decorrer do tempo. Acresce ainda que, segundo Bohr, “todo o curso dos acontecimentos é determinado pelas leis de probabilidade”: a um estado (ou partícula) no espaço corresponde uma probabilidade definida que é dada pela onda de de Broglie associada ao referido estado. Mas qual é a relação entre a onda associada a um sistema (partícula) e as grandezas físicas que o caracterizam como, por exemplo, a energia, a posição e o momento linear? Como podem ser reconciliadas as descrições corpuscular e ondulatória?

▪ Max Born desmaterializou as ondas de de Broglie e de Schrödinger. Para ele, qualquer fenómeno mecânico não relativista é «acompanhado» por um *processo ondulatório* descrito, como veremos, pela equação de Schrödinger, e cujo significado é o de *fornecer* a densidade de probabilidade de um dado comportamento do *fenómeno* mecânico ocorrer. Se, por exemplo, a amplitude da *onda* representativa de uma partícula material for zero, num dado ponto do espaço e instante de tempo, a probabilidade de encontrar essa partícula material numa *região infinitesimal* em torno desse ponto, nesse instante, é infinitamente pequena.

▪ **A Interpretação de Copenhague**, desenvolvida por Niels Bohr e Werner Heisenberg, pode ser resumida em três ideias fundamentais: i) os resultados da mecânica quântica são indeterminísticos; ii) a Física é a ciência dos resultados de processos de medida; iii) o acto de observar provoca o "colapso da função de onda", o que significa que, embora antes da medição o estado do sistema permitisse muitas *possibilidades*, apenas uma delas é *escolhida* aleatoriamente pelo processo de medição, e a função de onda modifica-se instantaneamente para reflectir essa escolha. (Há interpretações menos *populares*, ex., a de Bohm.)

▪ De facto, o procedimento aceite consiste em descrever o estado instantâneo de um sistema (ou partícula) através de uma função complexa contínua $\Psi(\mathbf{r},t)$, a função de onda, que satisfaz a uma equação diferencial - a equação de Schrödinger - e, portanto, varia no tempo de maneira completamente determinada pela sua forma no instante anterior, de modo que o seu comportamento é rigorosamente causal. Isto é, cada estado de um sistema é representado por uma função de onda $\Psi(\mathbf{r},t)$, que contém toda a informação «observável» ou «medível» acerca do sistema. Todavia, a função de onda não tem «significado» físico.

▪ O significado físico está associado ao quadrado do módulo da função de onda $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t)$, onde $\Psi(\mathbf{r},t)^*$ é o complexo conjugado de $\Psi(\mathbf{r},t)$: $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t)$, representa a densidade de probabilidade de *o sistema estar* num dado *estado* na posição \mathbf{r} e no instante t . A probabilidade de *o sistema estar* num dado *estado* na região entre \mathbf{r} e $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$, no instante t , é dada por $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r}$. Esta interpretação é equivalente à intensidade de uma onda electromagnética, que é proporcional ao módulo do quadrado da amplitude do campo eléctrico (ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht; F.C. Gulbenkian).

▪ Ter presente que a soma das probabilidade de o sistema ocupar todos os estado possíveis é igual a 1, isto é, $\int \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 1$. A função de onda que satisfaz a relação anterior diz-se normalizada. Se a função não for normalizada, isto é, se $\int \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = C \neq 1$, com C finito, a função fica normalizada se se dividir $\Psi(\mathbf{r},t)$ por \sqrt{C} . Para os estados estacionários, estado em que energia não depende do tempo, a probabilidade também não é função do tempo.

▪ De forma a poder representar um sistema físico observável, a função $\Psi(\mathbf{r},t)$ deve ser: i) uma função contínua, com primeiras derivadas contínuas; ii) deve ser uma solução da equação de Schrödinger (ver adiante); iii) ser normalizável, o que implica que o *valor* da função deve tender para zero à medida que a posição \mathbf{r} tende para infinito. Ter presente que o espaço e o tempo são considerados como contínuos, isto é, a posição e o tempo são grandezas contínuas.

Operadores, funções próprias e valores próprios

▪ De acordo com a Mecânica Quântica, associado a cada parâmetro mensurável (observável) está um operador quântico. Estes operadores são necessários porque a mecânica quântica descreve a natureza através de funções de onda, em vez de partículas materiais cuja cinemática e dinâmica podem ser descritas deterministicamente com as equações de Newton.

▪ Parte do desenvolvimento da mecânica quântica consiste na «descoberta» de operadores associados às diferentes grandezas (parâmetros) necessárias para descrever um sistema. Eis alguns exemplos de «parâmetro»-operador quântico conhecidos:

- $f(x)$ [qualquer função da posição como, por exemplo, x ou o potencial $V(x)$] ▶ $f(x)$
- p_x [componente x do momento; as componentes y e z são da mesma forma] ▶ $-i \hbar \partial / \partial x$
- E [Hamiltoniano do sistema, independente do tempo] ▶ $-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + V(x) \equiv \hat{H}$
- E [Hamiltoniano do sistema, dependente do tempo] ▶ $i \hbar \partial / \partial t \equiv \hat{E}$
- E_C (energia cinética, para movimento segundo x) ▶ $-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$

▪ Faz parte da estrutura básica da Mecânica Quântica que as funções da posição não são alteradas na equação de Schrödinger, enquanto que o momento toma a forma de derivadas espaciais. O operador Hamiltoniano contém derivadas espaciais e temporais.

▪ Como referido, a função de onda de uma dado sistema contém a informação mensurável acerca do sistema. Para obter um valor específico de um dado parâmetro físico, ex. a energia, deve-se «operar» sobre $\Psi(\mathbf{r},t)$ com o operador associado a esse parâmetro.

▪ Sempre que aplicado sobre uma função de onda $\Psi_j(\mathbf{r},t)$, um operador \hat{G} produz uma igualdade do tipo $\hat{G}\Psi_j(\mathbf{r},t) = g_j\Psi_j(\mathbf{r},t)$, diz-se que $\Psi_j(\mathbf{r},t)$ é uma função própria do operador \hat{G} , com valores próprios g_j . Os valores g_j podem ser discretos ou contínuos. Se os valores próprios são discretos, diz-se que a variável física a ele associada está quantizada, e o índice j toma o papel de um «número quântico», que caracteriza o estado do sistema.

▪ O operador quântico associado à energia é o Hamiltoniano, e a operação sobre a função de onda $\Psi(\mathbf{r},t)$ é a equação de Schrödinger.

Postulados da Mecânica Quântica

1. Associado a um sistema caracterizado por um campo de forças conservativo está uma função de onda $\Psi(x,t)$ que contém toda a informação que se pode conhecer sobre ele.

2. A toda a observável (grandeza) física g está associado um operador quântico \hat{G} , que quando operado sobre a função de onda $\Psi_n(x,t)$ produz o produto de g_n com a função de onda $\Psi_n(x,t)$, i.e., $\hat{G}\Psi_n(x,t) = g_n\Psi_n(x,t)$.

3. Qualquer operador \hat{Q} associado com uma grandeza física mensurável q , é hermitico:

$$\int \Psi_a^* \hat{Q} \Psi_b dr = \int (\hat{Q} \Psi_a)^* \Psi_b dr$$

4. O conjunto de funções próprias de um operador \hat{Q} forma um conjunto completo de funções linearmente independentes:

$$\hat{Q}\Psi_j = q_j\Psi_j \quad \Psi = \sum c_j\Psi_j$$

5. Para um dado sistema descrito por uma dada função de onda normalizada, o valor esperado de qualquer grandeza q pode ser obtido determinando o valor esperado do integral do produto do complexo conjugado da função de onda

com o operador \hat{Q} actuando sobre a função: $\langle q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dr$

6. A evolução temporal da função de onda de um sistema isolado é dada pela equação de Schrödinger dependente do tempo: $\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, onde \hat{H} representa o operador Hamiltoniano referido na página anterior.

Observável adj. 2 gén. susceptível de ser observado; digno de observação; (fis.) diz-se das grandezas da ciência física, que na mecânica quântica são representadas por matrizes (mecânica matricial) ou por operadores (mecânica ondulatória). (Do lat. observabile-, «admirável; notável; observável»).

“Aproximação” à equação de Schrödinger a partir da partícula livre

- Embora a equação não possa ser derivada, verifica-se que é consistente com a experiência. Ter presente que o teste determinante de qualquer modelo físico é a sua capacidade de descrição fiel do mundo real. Como se referiu, a natureza ondulatória do comportamento do electrão, e de outras partículas/sistemas nanoscópicas, é claramente demonstrada na experiência de Davisson-Germer. Esta constatação levanta a questão: “qual é a natureza da onda” associada às partículas materiais? A resposta retrospectiva consiste em afirmar que a onda é a função de onda associada ao electrão.
- Começando com a expressão de onda progressiva a uma dimensão, é possível estabelecer uma relação com a equação de Schrödinger, fazendo uso da relação de de Broglie entre o comprimento de onda e o momento e da relação de Planck-Einstein, entre a energia e a frequência.
- É fácil mostrar a sua relação com a equação de Schrödinger escrevendo a função de onda associada a uma partícula livre na forma exponencial complexa usando a relação de Euler: $\Psi(x,t) = A \exp[-i(\omega t - kx)]$, que é a forma padrão da função de onda de uma partícula livre. Um a partícula diz-se livre quando não está sujeita a qualquer constrangimento ou ligação.
- Se se derivar a função de onda associada a uma partícula livre em ordem ao tempo e à posição, verifica-se que estas derivadas estão associadas à energia e ao momento da partícula material, respectivamente.

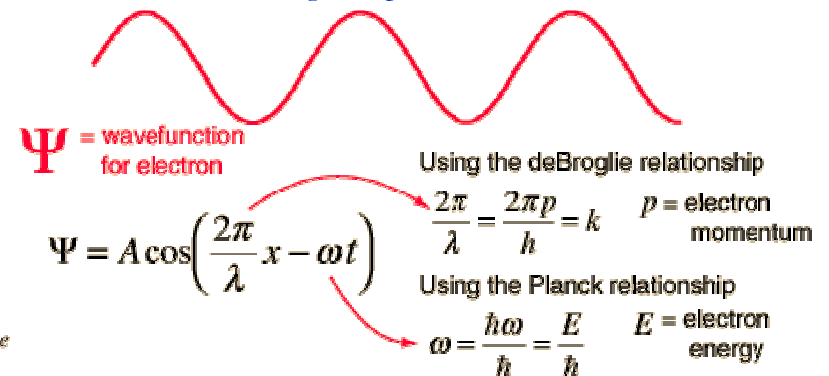
$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik\Psi = \frac{ip}{\hbar} \Psi \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi = \frac{-iE}{\hbar} \Psi \quad \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \leftarrow \text{particle} \quad E \quad \rightarrow \text{wave} \quad hv = \hbar\omega$$

The momentum connection The energy connection

- Quando se efectua uma operação sobre uma função, cujo resultado é o produto da função por uma constante, a constante e a função designam-se valor próprio e função própria da operação, respectivamente. As duas relações obtidas podem ser reescritas como:

$$P_{operator} \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p\Psi \quad E_{operator} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \quad P_{operator} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad E_{operator} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

- Adoptando este tipo de procedimento, outros operadores quânticos podem ser propostos para as diferentes quantidade física *observáveis*.
- A conexão com a equação de Schrödinger pode ser feita examinando as expressões para a função de onda e a energia da partícula livre
- Adoptando este tipo de procedimento, outros operadores quânticos podem ser propostos para as diferentes quantidade física *observáveis*.
- A conexão com a equação de Schrödinger pode ser feita examinando as expressões para a função de onda e a energia da partícula livre: ver figura à direita.



$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Schrodinger equation for free particle in one dimension.

- Propondo a equivalência entre expressões para a energia e para o momento da partícula, e usando as definições dos respectivos operadores quânticos obtém-se a equação de Schrödinger.

Equação de Schrödinger a 1 dimensão

- A hipótese de de Broglie, foi verificada experimentalmente para os electrões por Davisson e Germer, em 1927. Os desenvolvimentos na última metade dos anos 20 do século passado, fizeram com que a dualidade onda-partícula se tornasse parte do nosso modo de descrever a natureza. É de esperar que as ferramentas matemáticas necessárias para descrever o comportamento das ondas associadas aos electrões ou outras partículas sejam idênticas às usadas para descrever as ondas clássicas como, por exemplo, a onda elástica numa corda ou uma onda electromagnética plana:

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\rho}{\tau} \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2}.$$

- De facto, a equação de onda proposta por Erwin Schrödinger em 1926, mostra algumas similaridades com as equações acima, na versão a 1 dimensão:

$$\hat{H}\Psi(x,t) \equiv \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x,t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}.$$

- Pressupondo que a função de onda representa um estado de energia bem definido E , a equação pode ser escrita como:

$$\hat{H}\Psi(x,t) \equiv \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x,t) = E\Psi(x,t) \quad (1) \quad \text{Equação de Schrödinger independente do tempo}$$

- Para uma “partícula” livre, $V(x)=0$, e sempre que o potencial só dependa da posição, é possível escrever $\Psi(x,t)$ como $\Psi(x,t)=A\psi(x)\phi(t)$, verificando-se que $\Psi(x,t)$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo toma a forma:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = E\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (2).$$

- Assumindo uma função de onda com dependências temporal e espacial da forma $\Psi(x,t) = Ae^{ax}e^{bt}$, obtém-se $a = i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $b = -i\frac{E}{\hbar}$.
- Tratando o sistema a ela associado como uma partícula onde $E = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m$, resulta $a = ip/\hbar$. Se por sua vez considerarmos o sistema como *um pacote de ondas* (“wave packet”) ou como uma entidade semelhante ao fóton, obtém-se, usando a hipótese de Planck, $E = \hbar\omega$, e, portanto, $b = -i\omega$. Das relações de de Broglie e do comprimento de onda resulta $a = ip/\hbar = ib/\hbar\lambda = i2\pi/\lambda = ik$.

- E a solução da equação (2) é do tipo onda plana: $\Psi(x,t) = A \exp\left[i\frac{2\pi}{\lambda}x\right] \exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] = Ae^{i(kx-\omega t)}$, com $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ e $\omega = \frac{E}{\hbar}$.

- Ter presente que sempre que o potencial seja apenas função da posição, a função de onda associada a um dado sistema pode ser escrita como o produto de duas funções, uma dependente da posição e outra dependente do tempo: $\Psi(\mathbf{r},t) = A\psi(\mathbf{r})\phi(t)$. Diz-se que a equação é separável em duas equações independentes. Como veremos, há situações em que $\Psi(\mathbf{r})$ se pode escrever como $\Psi(\mathbf{r}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$. Nestes casos, $\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\phi(t) = \Psi(\mathbf{r})\exp(-iEt/\hbar)$.

«Derivação» da equação de Schrödinger a 1 dimensão

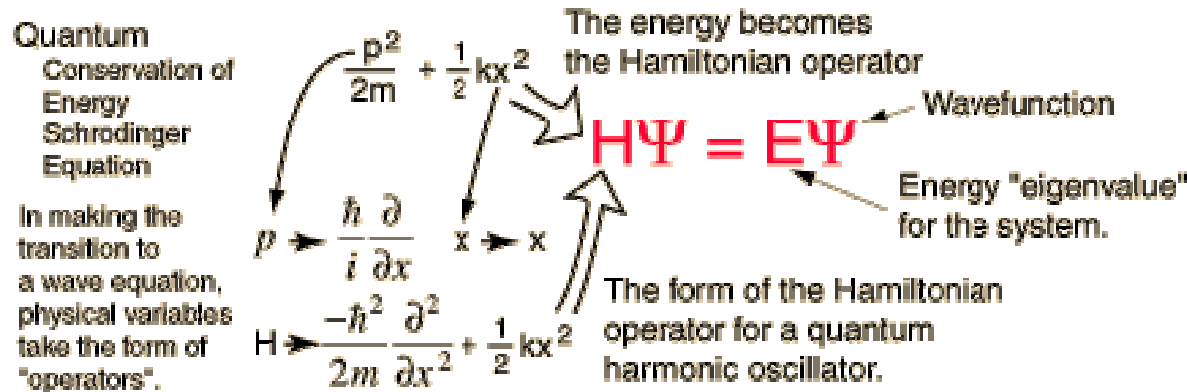
Na mecânica quântica a equação de Schrödinger tem o mesmo papel que as leis de Newton e a lei de conservação de energia na mecânica clássica, isto é, permite prever o comportamento dinâmico de um sistema físico. Possibilita a determinação da probabilidade de um dado evento ou «resultado/efeito». Um evento particular *é resultado do acaso*. Contudo, dado um grande número de idênticos sistemas, a equação de Schrödinger permite prever a distribuição de resultados.

A equação de onda de Schrödinger para 1 dimensão, assumindo um potencial independente do tempo, toma a forma:

$$\hat{H}\Psi(x,t) \equiv \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x,t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Convém esclarecer que não há equivalente clássico da equação de Schrödinger. Contudo, pode-se fazer uma «demonstração» da equação de Schrödinger substituindo na expressão do Hamiltoniano clássico as variáveis físicas momento e posição pelos respectivos operadores. A título de exemplo considere-se o Hamiltoniano do oscilador harmónico clássico isolado, isto é, considera-se que há conservação de energia e de momento, o que quanticamente corresponde a considerar a equação de Schrödinger independente do tempo.

<i>Física Clássica</i>	Kinetic Energy + Potential Energy = E	$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$
Classical Conservation of Energy Newton's Laws	$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$ $F = ma = -kx$	Harmonic oscillator example.

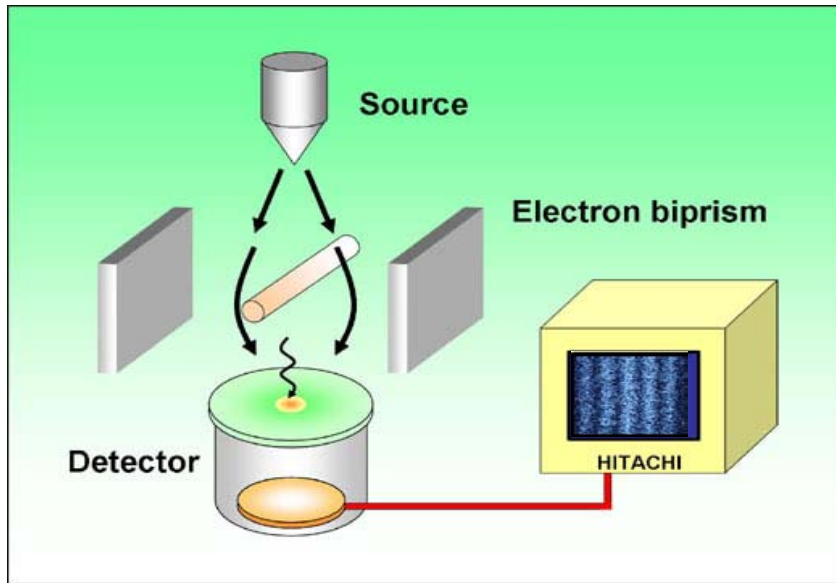


As energia cinética e potencial do oscilador clássicas são transformadas no operador Hamiltoniano, que actuando na função de onda permite determinar as funções de onda associadas ao sistema e sua *evolução* da no espaço e no tempo.

Adiante, verificar-se-á que a equação de Schrödinger nos permite determinar os valores próprios do Hamiltoniano, isto é, os valores (quantizados) de energia dos diferentes estados do oscilador harmónico, para além da forma da função de onda.

O conhecimento das funções próprias do Hamiltoniano possibilita a determinação de outras grandezas físicas observáveis do sistema em análise, como, por exemplo, os valores esperados da posição ou do momento da partícula.

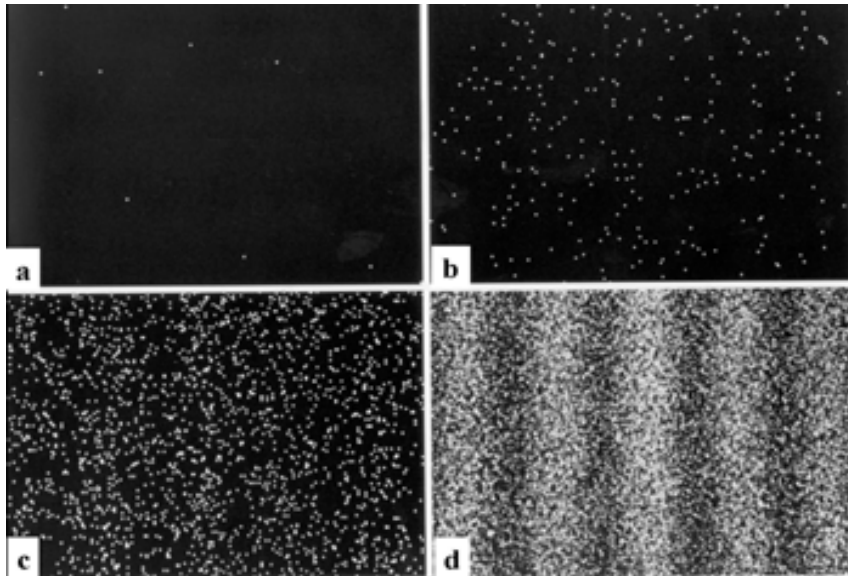
Esperimento di interferenza con elettroni (Akira Tonomura, 1973)



Filmato (richiede QuickTime)

<http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/doubleslit.cfm>

- Gli elettroni emessi da una sorgente sono inviati a un “bi-prisma”. Gli elettroni possono passare ai due lati del filamento centrale che li focalizza sul piano del rivelatore in basso.
- Anche quando arrivano solo 10 elettroni/sec, l’accumulazione di singoli elettroni forma una figura di interferenza.

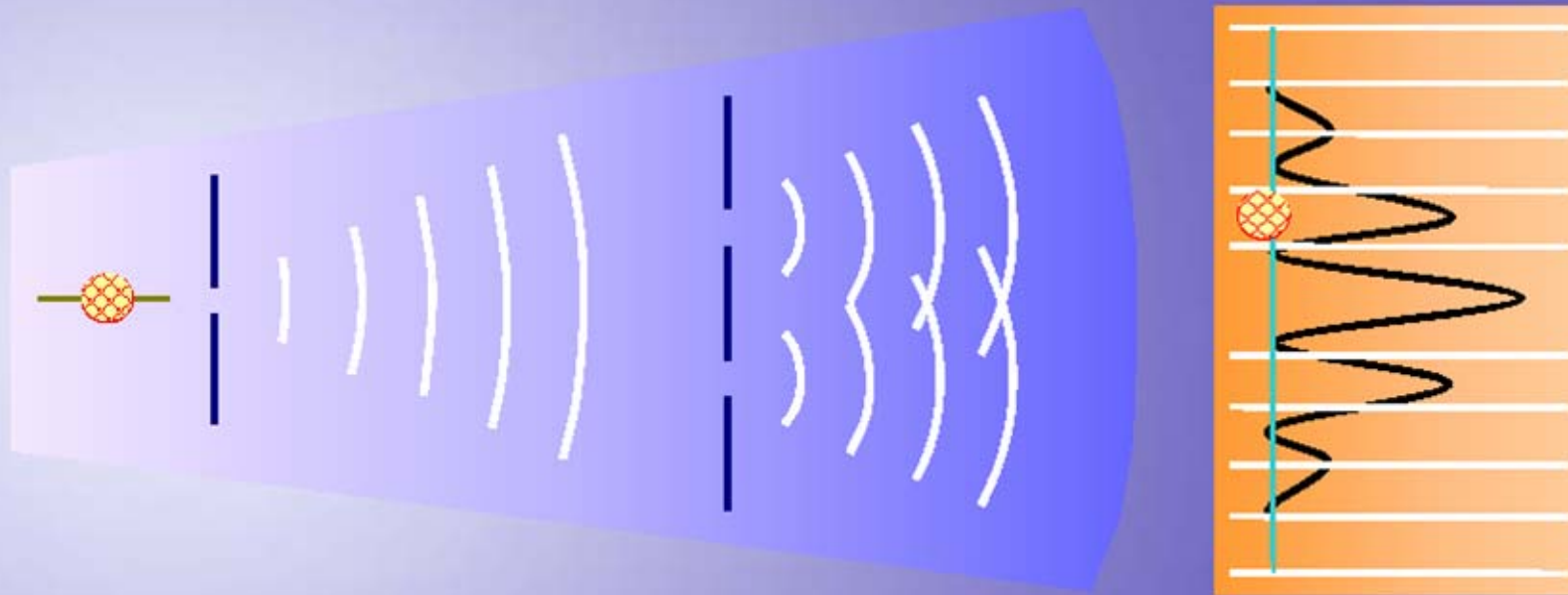


- Elettroni accumulati sullo schermo:
- (a) 8 electrons,
- (b) 270 electrons,
- (c) 2000 electrons,
- (d) 6000.
- Il tempo di esposizione dall’inizio alla fase (d) è di 20 minuti.

Wave-particle Duality of C_{60} Molecules

Markus Arndt, Olaf Nairz, Julian Vos-Andreae,
Claudia Keller, Gerbrand van der Zouw & Anton Zeilinger

Recordar a “verificação experimental do princípio de incerteza com moléculas de C_{70} .”



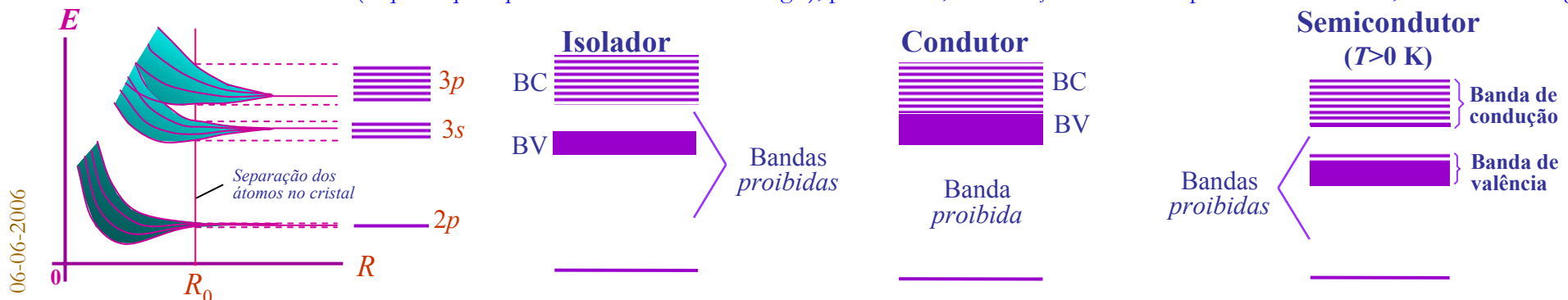
- Nature 401 (1999) 680

Exemplos de blocos constituintes
de vários dispositivos electrónicos, optoelectrónicos,
fotónicos e nanotecnológicos:
poços quânticos, barreiras de potencial,
múltiplos “poços” de potencial, fios quânticos,
e pontos quânticos

“Building blocs of the information *era*”

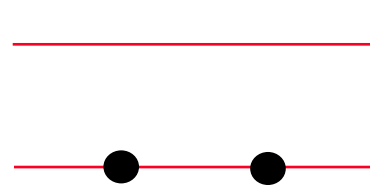
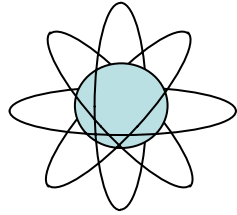
Formação de um sólido cristalino

- Considere-se um sistema constituído por vários átomos neutros idênticos e suficientemente afastados, de forma que a interação mútua é desprezável. Neste sistema *hipotético* todos os átomos apresentam níveis de energia discretos de com valor semelhante.
- À medida que a separação entre átomos diminui, as **funções de onda** as associadas aos estados de maior número quântico principal (*estados de valência*), começam a sobrepor-se e os valores de energia destes estados alteram-se, em consequência do princípio de exclusão de Pauli. Agora os estados de valência (estados associados *aos electrões de valência*), que anteriormente formavam um níveis de energia discretos bem definidos, formam agora bandas de energia que contêm todos os valores de energia dos associados a estes estados, verificando-se que a separação em energia entre estes estados é inferior a $k_B T$.
- Se os átomos de aproximarem suficientemente um dos outros, i.e., se o número de átomos por unidade de volume, n , é da ordem do número de Avogadro, eventualmente forma-se um sólido - configuração em que o sistema de átomos tem a menor energia de configuração. Neste caso, pode-se assumir que as bandas de energia dos níveis mais elevados correspondem a distribuições contínuas de energia (ver Figura). Este efeito só é significativo para os *estados de valência* – níveis de energia atômicos ocupados pelos átomos no estado fundamental. Os valores de energia do estados associados aos níveis mais interiores são muito pouco afectados porque as **funções de onda** praticamente não se sobrepõem.
- A natureza da estrutura de bandas de energia associada aos níveis de maior energia determina se um sólido é bom ou mau condutor de corrente eléctrica.
- Nos **isoladores** e **semicondutores**, a zero absoluto, os estados de valência preenchem por completo a última banda ocupada, que se designa por **banda de valência (BV)**. A banda imediatamente superior chama-se **banda de condução** e está completamente vazia a 0 K. Uma vez que na BV não há estados desocupados, não pode ocorrer deslocamento efectivo de carga eléctrica, mesmo sob a acção de um campo eléctrico aplicado, i.e., a 0 K é nula a corrente associada aos electrões na BV. Para haver fluxo de carga eléctrica (corrente eléctrica) tem de haver uma transição atómica que envolva a desocupação de um estado da banda de valência e a ocupação de um estado desocupado na banda de condução (BC). Isto só é possível se o átomo absorver uma quantidade de energia da ordem de 1 eV (valor relativamente grande - e raramente disponível – quando comparado com a energia térmica a 293 K, ~ 25 meV).
- Nos **condutores**, a **separação entre a bandas de condução e a banda de valência ou não existe ou é da ordem de energia térmica**, podendo o átomo ser facilmente excitado (o que requer quantidades ínfimas de energia), permitindo, sob a acção de um campo eléctrico externo, um fluxo de carga.



Níveis de energia num sólido cristalino

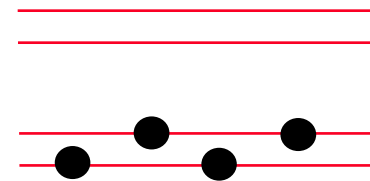
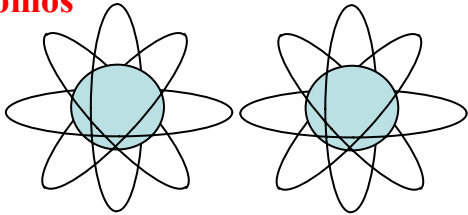
Um átomo



Primeiro nível de energia atómico não preenchido

Electrões de valência

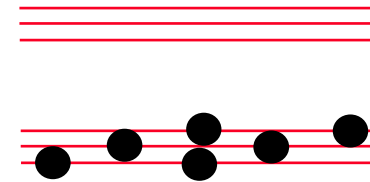
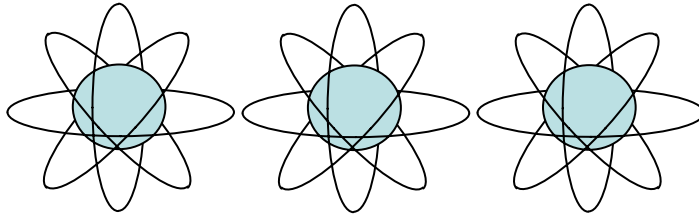
dois átomos



Separação dos estados de energia Degenerados – um para cada átomo

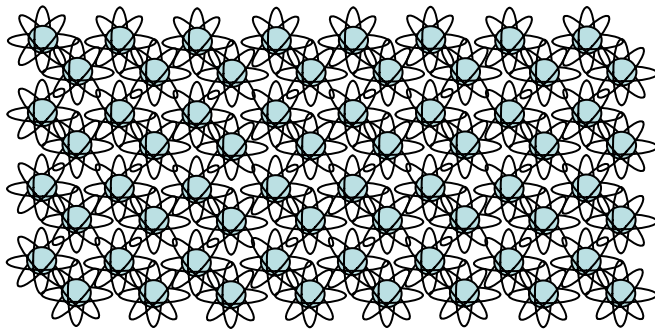
Parelia de níveis de energia de valência

Três átomos



Tripleto de níveis de energia de valência

Biliões de átomos num sólido cristalino

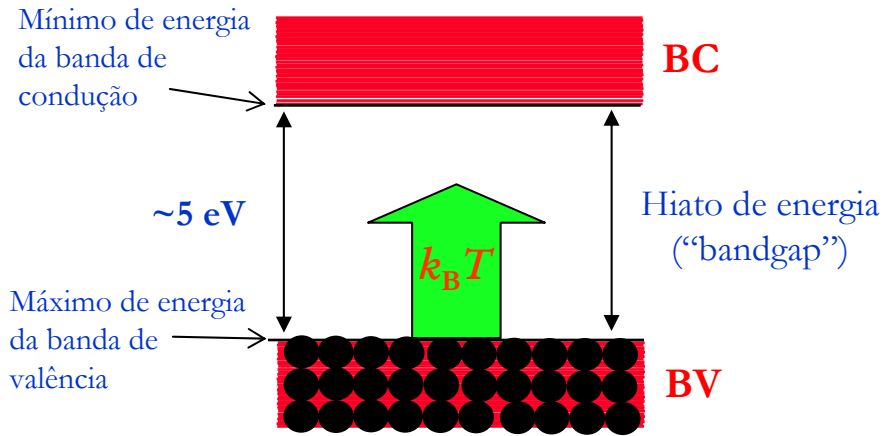


Banda de condução

Hiato de energia

Banda de valência

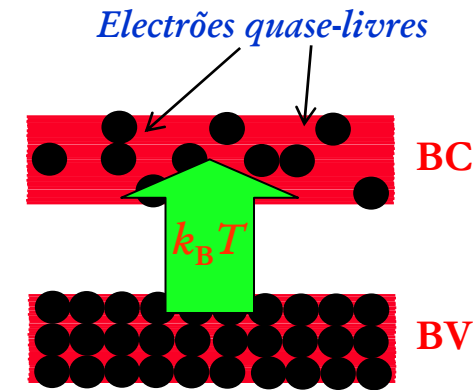
Dieléctricos, metais e semicondutores



ISOLADOR

A energia dos estados da banda de condução é muito superior à níveis de energia dos estados da banda de valência.

A excitação do sistema para níveis de energia na banda de condução requer energia muito superior à energia térmica.

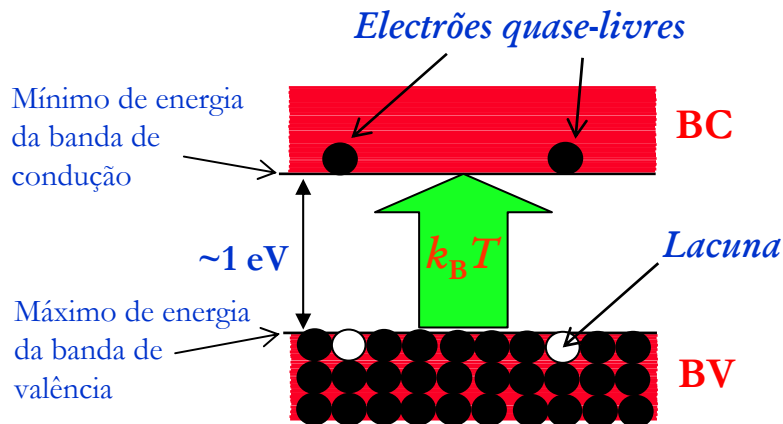


METAL

A separação em termos de energia entre as bandas de condução e de valência é inferior ou da mesma ordem da energia térmica. O sistema é facilmente excitado para estado de energia correspondentes à banda de condução, fazendo com que os electrões fiquem quase *livres* de ai se *moverem*. Assim, a aplicação de um campo eléctrico muito “modesto” é suficiente para induzir corrente eléctrica no metal.

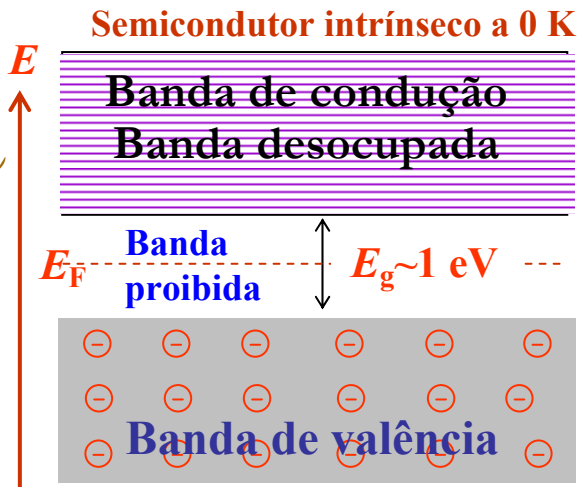
SEMICONDUCTORES

A separação em termos de energia entre as bandas de condução e de valência é várias vezes superior energia térmica. Alguns *componentes* (electrões) do sistema podem ser excitados para níveis de energia pertencentes à banda de condução por *sugestão* térmica ou radiação electromagnética. (Ver página seguinte.)



Semicondutores intrínsecos

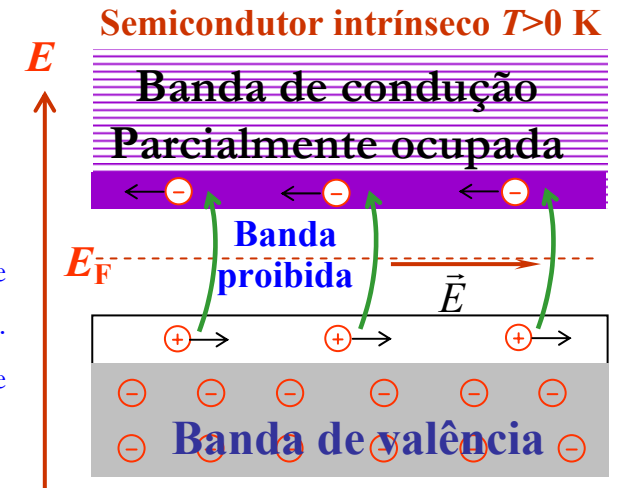
- À temperatura do zero absoluto, os materiais semicondutores puros comportam-se como isoladores perfeitos (todos os *estados* de valência tomam parte na ligação covalente) e, portanto, não há electrões na banda de condução (*electrões livres*) para contribuir para a corrente eléctrica. Contudo, à medida que a temperatura aumenta, parte dos *electrões* de valência adquirem energia suficiente para escaparem à respectiva banda e tornam-se electrões quase-livres na banda de condução, deixando um “buraco” na correspondente banda de valência (ligação covalente). A *vaga* deixada na banda de valência (BV) designa-se por buraco, vazio ou **lacuna**. Por cada electrão (*n*) *transferido* da BV para a banda de condução (BC), cria-se na primeira (BV) uma lacuna (*p*): num semicondutor puro, por cada electrão quase-livre na BC, existe uma lacuna na BV, i.e., sempre que um electrão *deixa* a BV gera-se um **par electrão-lacuna**.
- Entretanto, um electrão que tenha *passado* da BV para a BC, *ficando livre* na BC, pode perder a sua energia e regressar à BV, *aniquilando* a lacuna: este processo designa-se por **recombinação**.



A probabilidade de um electrão ocupar um nível de energia E , é dada pela distribuição de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \left[\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1},$$

onde F identifica o nível de energia com probabilidade de ocupação igual a $1/2$ (50%), que se designa **nível de Fermi**. Num SC intrínseco, o nível de Fermi situa-se sensivelmente a meio da banda proibida (ver figuras).

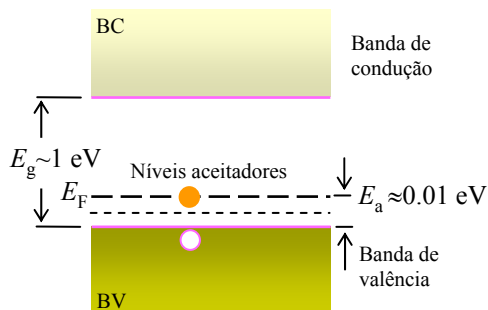
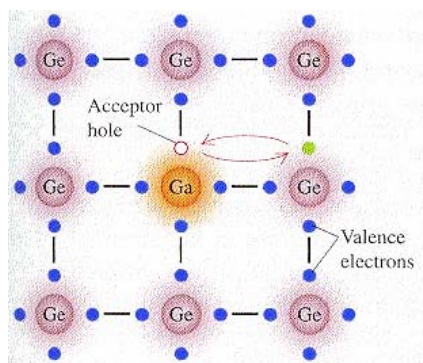


- Como referido, num semicondutor intrínseco em equilíbrio térmico, o número de electrões n_i quase-livres iguala o número p_i de lacunas; à temperatura T , tem-se: $n_i = p_i \propto \exp(-E_g/2k_B T)$; para o Si e o Ge (a 300 K), $n_i = p_i = 1.45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ e $2.4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, respectivamente. Quer o electrão, quer a lacuna, na ausência de um campo eléctrico, *deslocam-se* aleatoriamente entre os átomos do semicondutor (SC), e a corrente eléctrica efectiva é nula.
- Contudo, quando é aplicada uma diferença de potencial eléctrico (tensão) entre dois pontos do semicondutor, os electrões quase-livres na BC passam a mover-se ordenadamente, em direcção do polo positivo, dando origem a uma corrente eléctrica: corrente de electrões. Por seu lado, um estado desocupado na BV (que pode ser preenchido por electrões de valência de outros átomos, transferindo-se a lacuna para a outra ligação, sem significativa variação de energia), sob a acção de um campo eléctrico, comporta-se como um portador de carga positiva, deslocando-se na direcção do polo negativo da fonte de tensão: corrente de lacunas. A corrente total no semicondutor é, pois, a soma destas duas componentes.

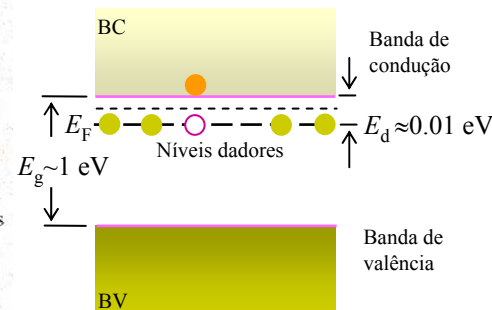
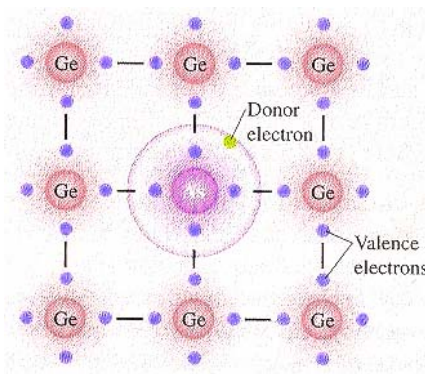
Semicondutores extrínsecos

- Os materiais semicondutores não são «bons» condutores de corrente eléctrica, devido ao número reduzido de electrões livres na banda de condução e de vazios na banda de valência (para o Si e o Ge, a 300 K, $n_i=p_i=1.45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ e $2.4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, respectivamente – comparar com o número de electrões livre no cobre ou no sódio, por exemplo). Para *terem interesse industrial* os materiais semicondutores (SC) devem ser modificados de forma a aumentar o número de portadores livres (electrões na BC e/ou vazios na BV), de modo a alterar a sua **condutibilidade**, o que permite a construção de diversos dispositivos electrónicos e optoelectrónicos. Tal efeito é conseguido substituindo alguns átomos do material SC original por elementos de valência inferior ou superior e de tamanho semelhante ao do constituinte base. Este processo é designado por **dopagem**, e o material SC torna-se **extrínseco** (*impuro*).
- Quando os átomos são substituídos por elementos de valência inferior ao do elemento base, o semiconductor obtido diz-se de **tipo p**; quando a impureza possui uma valência superior, o SC designa-se de **tipo n**. À temperatura ambiente, a presença no SC de impurezas de valência inferior, **impurezas aceitadoras/receptoras** (em geral, elementos do 13º grupo da tabela periódica), aumenta o nº de vazios na BV, tornando a componente da corrente devida às lacunas maior; elementos de valência superior, **impurezas dadoras** (geralmente, elementos do 15º grupo da tabela periódica), dão origem a semicondutores em que o nº de electrões livres na BC é substancialmente maior que o nº de lacunas na BV, fazendo, neste caso, com que a componente da corrente devida aos electrões livres seja superior à componente devida às lacunas.
- Deste modo, a condutibilidade de um sc intrínseco é significativamente alterada pela substituição de uma pequena fracção de átomos base por elementos do 13º ou do 15º grupos, tornando os sc muito mais interessantes do ponto de vista tecnológico. A **dopagem** de um semiconductor não só aumenta a sua condutibilidade, como permite criar um material em que os portadores de carga são, maioritariamente, electrões (*n*) ou lacunas (*p*), de acordo com o tipo de impureza. A concentração de **dopantes** necessária para alterar de forma significativa a condutividade de um semiconductor, quando comparada com a concentração dos átomos nativos do semiconductor: a condutibilidade do germânio, a 30 °C, aumenta cerca de 12 vezes, se substituirmos 1 em cada 10^8 átomos de Ge por um átomo de As (elemento com cinco electrões de valência).

Semicondutores tipo-p



Semicondutores tipo-n



Semicondutores directos e indirectos

As **funções de onda** associadas aos estados nas bandas de condução e de valência são caracterizadas pelos valores próprios de energia e pelos respectivos vectores de onda, \mathbf{k}_n e \mathbf{k}_p (os momentos lineares dos portadores de carga são $\mathbf{p}_n = \hbar\mathbf{k}_n$ e $\mathbf{p}_p = \hbar\mathbf{k}_p$, respectivamente).

A transição de electrões entre as bandas de condução e de valência, como qualquer outro processo físico, tem de satisfazer duas leis fundamentais: *i*) **conservação da energia** e *ii*) **conservação do momento linear**.

Nos semicondutores de **banda proibida directa**, o máximo de energia da banda de valência e o mínimo de energia da banda de condução ocorrem ao mesmo valor do vector de onda, i.e., $\mathbf{k}_n = \mathbf{k}_p$ (o momento linear dos portadores nos máximos/mínimos das respectivas bandas é o mesmo). Num semiconductor de banda proibida directa, as transições entre estados de energias próximos do máximo de energia da banda de valência (E_V) e estados de energia próximos do mínimo de energia da banda de condução (E_C), induzidas por absorção de um fóton verificam a conservação do momento linear, dado que o momento linear do fóton é muito menor do que o momento linear de qualquer dos portadores de carga.

Nos SCs directos, a recombinação não-radiativa é significativamente inferior à componente radiativa, permitindo obter fontes ópticas de elevada eficiência; os emissores ópticos mais eficientes são baseados em ligas semicondutoras de banda proibida directa (GaAs, InP, InGaAs, InGaAlAs, InGaAsP, ...).

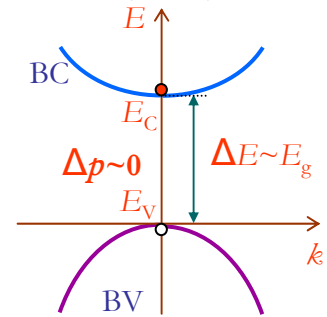
No caso de semicondutores de banda proibida indirecta, o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorrem a diferentes valores do vector de onda dos portadores nas respectivas bandas, i.e., $\mathbf{k}_n \neq \mathbf{k}_p$ (o momento linear dos portadores nos máximos/mínimos das respectivas bandas é diferente), pelo que a conservação do momento linear exige a intervenção de uma terceira *partícula* (o fonão) nos processos de geração e recombinação de portadores (o momento linear associado ao fóton, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, é muito menor que a variação de momento linear necessária).

Os semicondutores de banda indirecta são muito utilizados em dispositivos electrónicos. Em optoelectrónica, os semicondutores indirectos são usados, essencialmente, como detectores (foto-detectores): o Si é usado para detecção de radiação de comprimento de onda até 1,1 μm , e o germânio para radiação de c.d.o. superior a 1.3 μm .

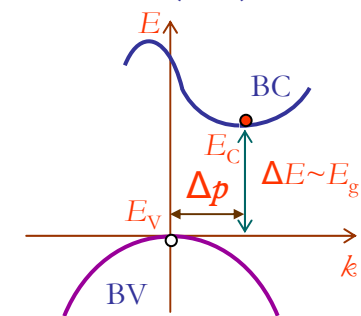
As ligas semicondutoras III-V e II-VI de banda proibida directa são, também, muito usadas em foto-detectores, maioritariamente na região espectral 1,3 μm e 1,55 μm (região onde as fibras ópticas apresentam baixas dispersão e baixas perdas). Fotodetectores rápidos operando a comprimentos de onda iguais ou superiores a 1,3 μm , empregam InGaAs (ou outros materiais III-V) e não silício ou germânio (ver na próxima aula: coeficiente de absorção).

(Ver, por exemplo, <http://w3.ualg.pt/~jlongras/Notas-FES-2005-2006.pdf> - Cap. 7 Bandas de energia.)

Semiconductor directo (SCD)



Semiconductor indirecto (SCI)



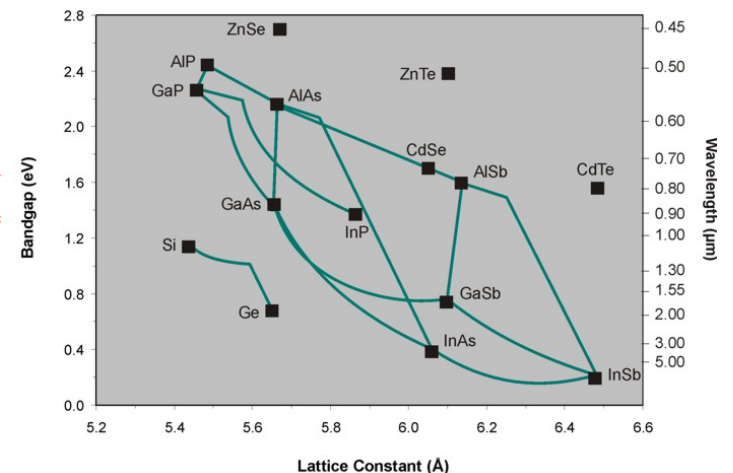
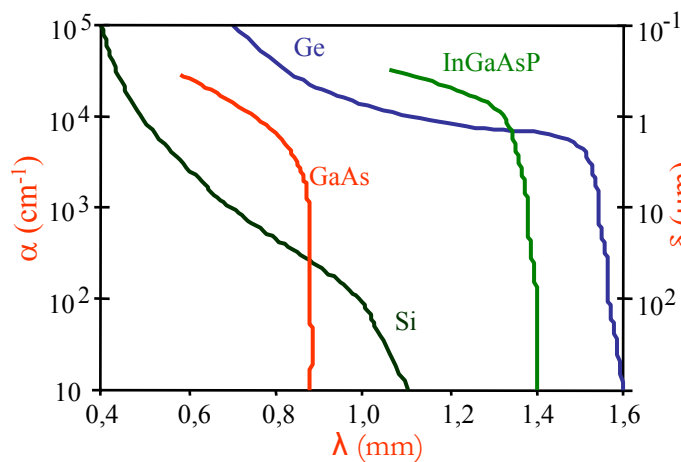
A transição de um electrão da BV para a BC num SCI requer, para além de uma quantidade de energia ($\geq \Delta E_g$), uma alteração do momento linear do electrão de $\Delta \mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_p)$.

Índice de refração e coeficiente de absorção de um material

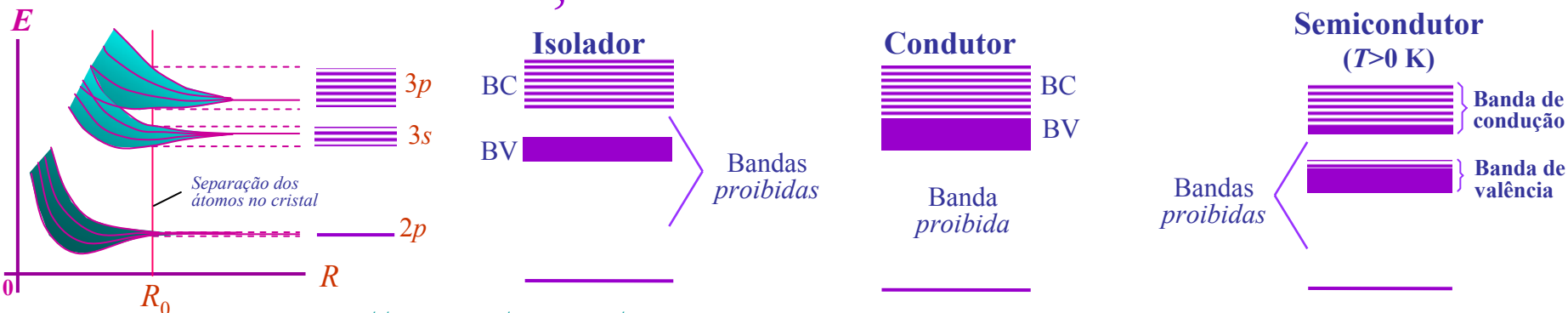
- Do ponto de vista electromagnético um material é caracterizado pelas respectivas permitividade eléctrica, ϵ , e permeabilidade magnética, μ (Rever equações de Maxwell.) As propriedades ópticas de um material são *definidas* pelo **índice de refração**, n_r , e pelo **coeficiente de absorção**, α .
- O **índice de refração**, n_r , é definido como a razão entre a velocidade da radiação no vácuo, c , e a velocidade de fase da radiação no material, v_f : $n_r = c/v_f$; (nos semicondutores com mais interesse em optoelectrónica $n_r = 3-4$). É de referir que o índice de refração é, em geral, função do comprimento de onda da radiação: fenómeno da **dispersão**.
- O **coeficiente de absorção**, α , está relacionado com a taxa de variação espacial da intensidade da radiação no material, $dI/dx = -\alpha I(x)$, onde $I(x)$ representa a intensidade da radiação na região de coordenada x , i.e., $I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$ (I_0 representa a intensidade de radiação incidente na superfície no material).
- Em geral, α depende, fortemente, do comprimento de onda (c.d.o., λ). Os materiais SCs cujo coeficiente de absorção diminui bruscamente para comprimentos de onda superiores a $\lambda_g = hc/E_g$ dizem-se **semicondutores de banda proibida directa** (exemplos: GaAs, InP, InGaAs, InGaAlAs, InGaAsP). Isto é, nos semicondutores de banda proibida directa a transição de electrões da BV para a BC, em resultado da absorção de radiação electromagnética, só é permitida se a energia do fóton correspondente for $\geq E_g$; se $E_g > E_{\text{fóton}}$, o fóton não é absorvido.
- O germânio e o silício são semicondutores de **banda proibida indirecta**: os seus coeficientes de absorção variam gradualmente com o comprimento de onda (ver figura). Contudo, também nestes SCs a absorção só ocorre se $E_{\text{fóton}} \geq E_g$.
- A 1ª Figura representa o coeficiente de absorção em função do comprimento de onda de radiação, na porção óptica do espectro electromagnética de 0,4 μm a 1,6 μm , para alguns semicondutores usados em electrónica e optoelectrónica; representa-se também o **coeficiente de penetração**, δ , que

corresponde ao inverso do coeficiente de absorção, $\delta = 1/\alpha$: δ é numericamente igual à espessura de material necessária para absorver aproximadamente 63% da radiação incidente perpendicularmente na superfície do material: $I(x = \delta) = I_0 e^{-1}$.

Na Figura da direita representa-se o hiato de alguns semicondutores em função do parâmetro da rede cristalina.



Condutores, semicondutores e dielétricos



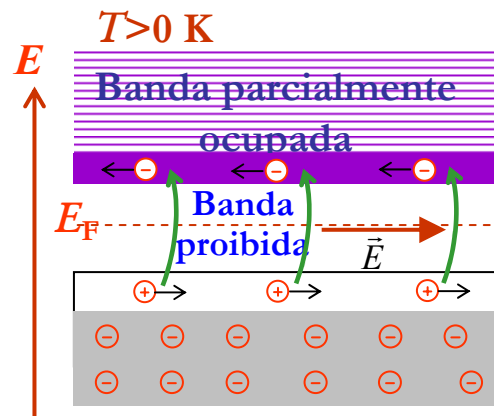
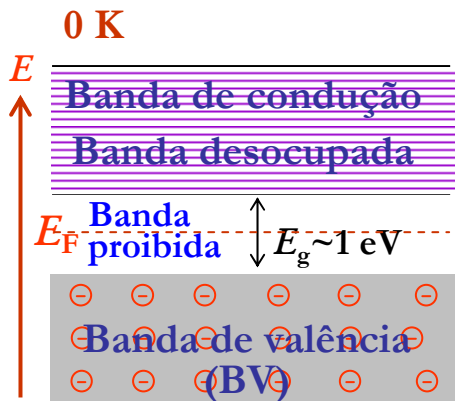
24-04-2006 (Ver, por exemplo, <http://w3.ualg.pt/~jlongras/Notas-FES-2005-2006.pdf> - Cap. 7 Bandas de energia.)

Semicondutores intrínsecos

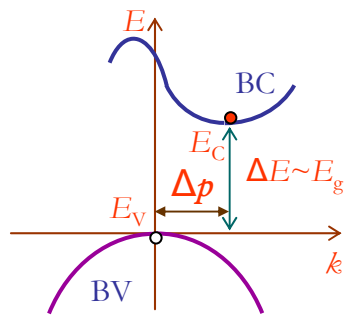
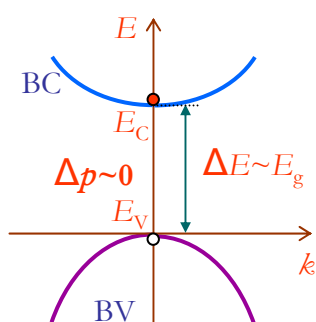
A probabilidade de um electrão ocupar um nível de energia E , é dada pela distribuição de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \left[\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}$$

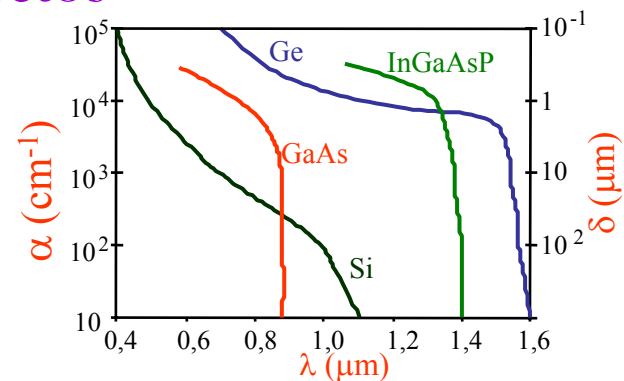
onde F identifica o nível de energia com probabilidade de ocupação igual a $1/2$ (50%), que se designa **nível de Fermi**. Num SC intrínseco, o nível de Fermi situa-se sensivelmente a meio da banda proibida (ver figuras).



Semicondutores directos e indirectos



A transição de um electrão da BV para a BC num SCI requer, para além de uma quantidade de energia ($\geq \Delta E_g$), uma alteração do momento linear do electrão de $\Delta p = \hbar(k_n - k_p)$.

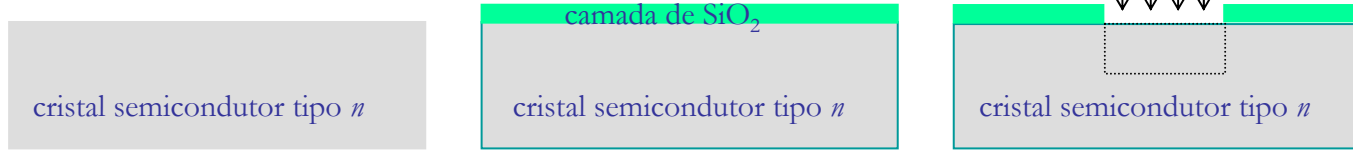


<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

Homojunções semicondutoras

- Uma junção p-n é obtida dopando, de forma selectiva, o cristal semicondutor (normalmente referido como substrato), criando, neste substrato, regiões com características de condução eléctrica muito diferentes. Pode-se afirmar que a dopagem selectiva é a base de toda a microelectrónica/electrónica-integrada. Quase todos os componentes electrónicos e optoelectrónicos incorporam uma ou mais junções p-n.
- Uma **homojunção** corresponde à região de confluência de duas porções de um mesmo cristal semicondutor com propriedades eléctricas distintas. O exemplo clássico é a zona fronteira entre regiões do tipo p e do tipo n num mesmo cristal semicondutor, designada por **junção p-n**. **Notar que o cristal semicondutor, a menos das impurezas, é o mesmo.** Quando a junção é entre dois cristais semicondutores diferentes, por exemplo o Ge e o Si ou GaAs e AlGaAs, por exemplo, diz-se que se trata de uma **heterojunção**.

“Fabricação” de homojunções p^+-n : método planar



Partindo de um substrato do tipo n, cuja superfície foi oxidada (face com uma fina camada de sílica, SiO_2), na qual é seleccionada uma região a ser dopada com impurezas aceitadoras, após um processo fotolitográfico, seguido da remoção de sílica na zona seleccionada: à medida que prossegue a dopagem com impurezas do tipo p (elemento que origina uma concentração elevada de lacunas quase-livres), na região localizada do material n (onde existe uma concentração elevada de electrões quase-livres), ocorre forte **difusão** e **recombinação** dos portadores livres na zona da junção. A figura ao lado representa, de forma esquemática, a junção p^+-n (o sinal + indica que a concentração de átomos aceitadores no lado p é superior à concentração de átomos dadores no lado n). Na figura, são identificados, apenas, os iões dopantes (aceitadores ou p; dadores ou n) e os resultantes portadores quase-livres (lacunas; electrões).

Os átomos das impurezas (fixos na rede cristalina) do lado p e do lado n, na vizinhança de junção, perdem, respectivamente, lacunas (que se difundem para o lado n) e electrões (que se difundem para o lado p), originando uma região localizada de densidade de carga não nula: região espacial de carga ou zona de depleção. Desta distribuição de carga resulta uma barreira de potencial e, portanto, um campo eléctrico (ver equação de Poisson da Electrostática). O campo eléctrico assim criado provoca, por sua vez, o deslocamento de electrões (minoritários) do lado p para o lado n e de vazios (minoritários) do lado n para o lado p. Em equilíbrio, as correntes devidas à difusão dos portadores livres majoritários são anuladas pelas correntes de arrastamento dos portadores minoritários induzidas pelo campo eléctrico.

Ter presente que o nível de Fermi é constante através da junção em equilíbrio (ver diagrama de energia da junção), sendo a corrente efectiva através da junção nula. Se tal não acontecesse, os electrões/lacunas de um lado da junção teriam uma energia média superior aos electrões/lacunas do outro lado, havendo transferência de electrões/lacunas até se igualarem os níveis de Fermi.

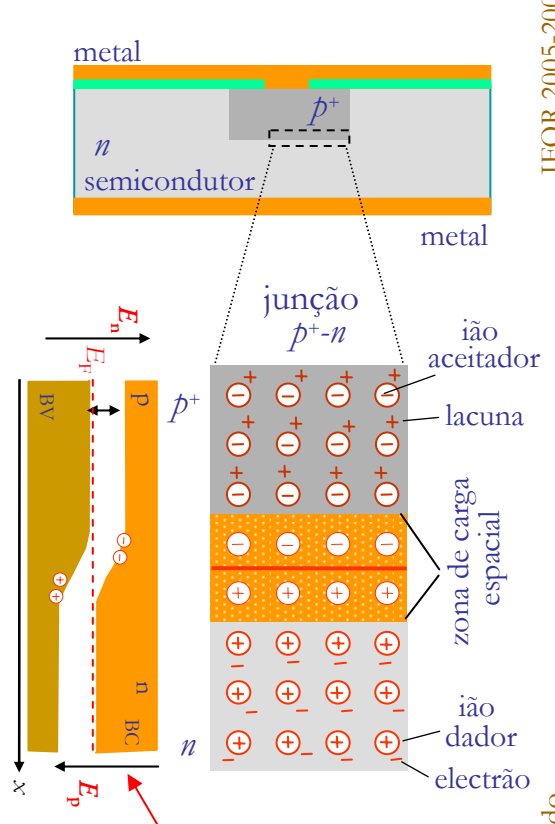
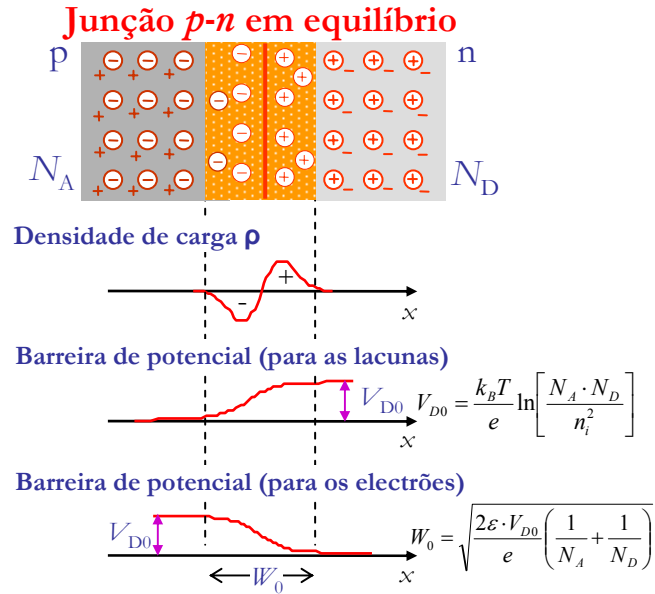


diagrama de bandas de energia da junção

Junção *p-n* polarizada directamente

Uma **junção *p-n*** é obtida dopando, de forma selectiva, um cristal semiconductor **único** tipo *p* (*n*), normalmente referido como substrato, com impurezas de substituição do tipo *n* - átomos dadores - (tipo *p* - átomos aceitadores), criando regiões com características de condução eléctrica únicas.



A ddp criada pela difusão de lacunas e de electrões das regiões *p* e *n*, respectivamente, actua como uma barreira de potencial para os portadores majoritários (vazios no lado *p* e electrões no lado *n*). A probabilidade destes atravessarem a barreira é proporcional ao factor de Boltzmann ($\exp[-eV_{D0}/k_B T]$), i.e., a intensidade de corrente I_D devida à difusão dos portadores majoritários é proporcional a $\exp[-eV_{D0}/k_B T]$. Contudo, a mesma ddp actua como uma queda de potencial para os portadores minoritários, promovendo a sua passagem através da barreira (vazios do lado *n* para o lado *p* e electrões da região *p* para a região *n*), dando origem à corrente de arrastamento, I_A . Em equilíbrio, $I_D + I_A = 0$.

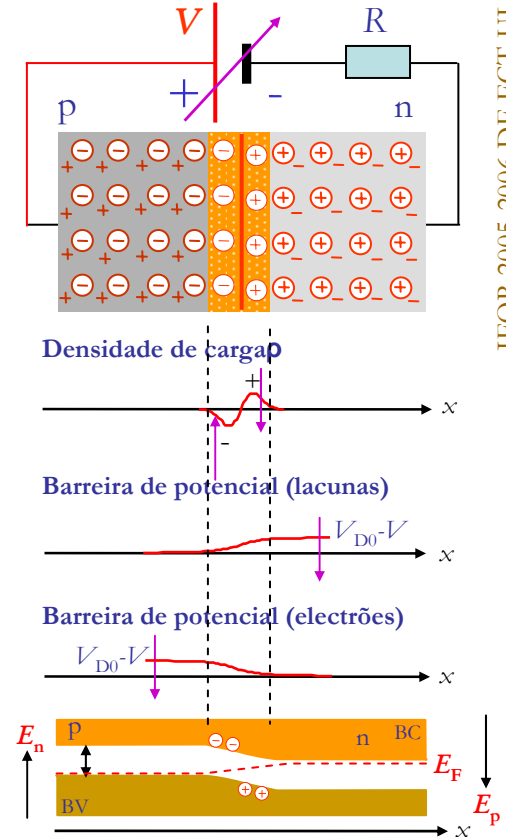
Junção *p-n* Polarizada Directamente

Se a junção *p-n* for **polarizada directamente**, i.e., se se aplicar uma diferença de potencial entre as regiões *p* e *n*, em que o lado *p* corresponde à região de maior potencial, há injeção, através da junção, de lacunas do lado *p* para o lado *n* e de electrões do lado *n* para o lado *p*. A concentração p_n de lacunas no lado *n* sobe relativamente ao valor de equilíbrio térmico p_{n0} . De forma análoga, a concentração n_p de electrões no lado *p* sobe relativamente ao valor de equilíbrio térmico n_{p0} . Como consequência, a densidade espacial de carga diminui, reduzindo a ddp (e do campo eléctrico) entre os lados *p* e *n* da junção, o que corresponde a um decréscimo da barreira de potencial. Como resultado desta transferência de portadores através da junção (vazios do lado *p* para o lado *n*, e electrões da região *n* para a região *p*), a intensidade de corrente devida à difusão torna-se dominante ($I_D \gg I_A$).

Diagrama de bandas de energia de uma junção *p-n*:

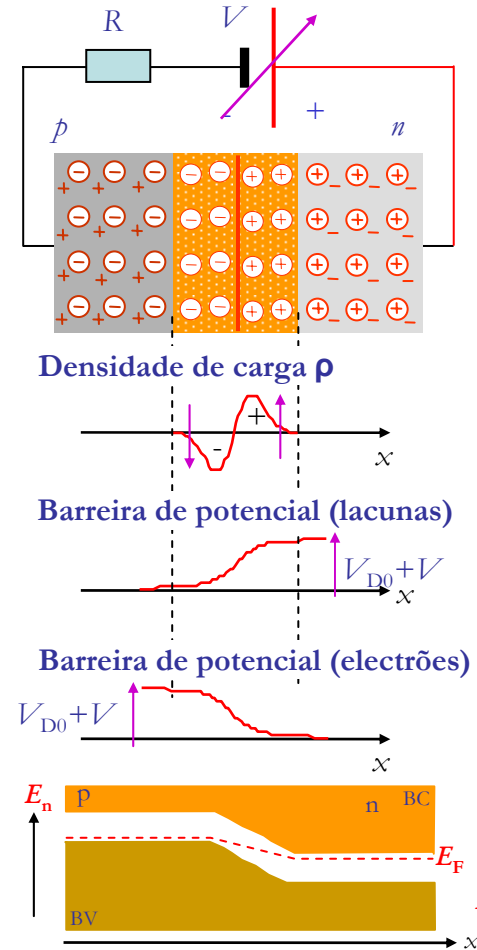
(E_n representa a energia dos electrões e E_p indica a energia dos vazios. Notar que não existem vazios na BC.)

A corrente de arrastamento (devida ao campo eléctrico) mantém-se praticamente inalterável. A corrente de difusão é proporcional a $\exp[-e(V_{D0}-V)/k_B T]$, onde e representa a carga do electrão, e V a tensão aplicada. Para junções de silício, $V_{D0} \sim 0.7$ V; para o germânio, $V_{D0} \sim 0.3$ V. Quando a tensão aplicada V é contrabalançada pela barreira de potencial V_{D0} , a corrente total através da junção é limitada pelos outros elementos do circuito. Na prática, quando $V = V_{D0}$, considera-se que a corrente na junção é independente da tensão aplicada, sendo limitada pelos outros elementos do circuito em que esta se insere (no caso da figura, a resistência R), e que a ddp entre os terminais da junção mantém-se $\cong V_{D0}$.

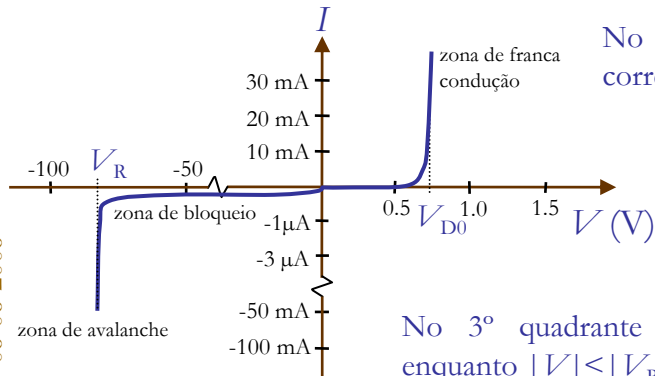


Junção p-n polarizada inversamente

Se a junção p-n for **polarizada inversamente**, i.e., se se aplicar uma ddp entre as regiões p e n, em que o lado p corresponde à região de menor potencial, os electrões livres do lado n são atraídos para o polo positivo da fonte, deixando lacunas no seu lugar, o que levará à expansão da região espacial de carga positiva no lado n. Ao mesmo tempo, os vazios do lado p são atraídos para o polo negativo da fonte, originando o aumento da região espacial de carga negativa no lado p. A concentração de lacunas no lado n, p_n , desce, relativamente ao valor de equilíbrio térmico p_{n0} e, de forma análoga, a concentração de electrões no lado p, n_p , diminui relativamente ao valor de equilíbrio térmico n_{p0} . O que também faz com que o volume da região espacial de carga cresça, originado o aumento da barreira de potencial entre os lados p e n da junção (e do campo eléctrico), o que diminui o número de portadores livres na vizinhança da junção e a corrente devida à difusão dos portadores livres através da junção, rompendo-se o equilíbrio entre a corrente de difusão e a corrente de arrastamento: $I_D < I_A$. A corrente na junção é, quase exclusivamente, devida à corrente de arrastamento, que é proporcional à concentração dos portadores minoritários e, portanto, não varia com a tensão aplicada. (O número de portadores minoritários é, praticamente, independente da tensão aplicada.) O valor da corrente através da junção polarizada inversamente designa-se por **corrente inversa** ou **corrente de fuga** (I_S). Em junções de silício, $I_S \sim \text{nA}$; para o germânio, $I_S \sim \mu\text{A}$. Há, contudo, um valor de tensão, **tensão de ruptura da junção**, a partir do qual a intensidade da corrente inversa é limitada, apenas, pelos outros elementos do circuito em que a junção se insere, sendo, praticamente, independente da tensão inversa aplicada. A ruptura pode ocorrer devido ao **processo de avalanche** ou ao **efeito de Zener** (ver adiante – efeito de túnel através de barreiras de potencial).



Característica Corrente-Tensão (I-V) de uma Junção p-n



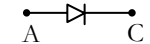
No 1º quadrante da característica I-V, a corrente é dada por:

$$I(V) = I_S \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right]$$

com $I_S \propto \exp\left(-\frac{eV_{D0}}{k_B T}\right)$

No 3º quadrante da curva I-V, têm-se $I = -I_S$, enquanto $|V| < |V_R|$ ($I_{S,\text{Si}} = 1 \text{ nA}$; $I_{S,\text{Ge}} = 1 \mu\text{A}$).

O dispositivo mais simples baseado numa junção p-n é o **díodo semicondutor rectificador**, cujo símbolo é:

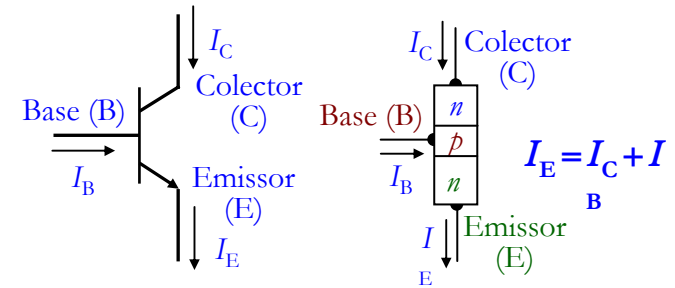


onde **A** representa o terminal ânodo (correspondente ao lado p da junção) e **C** indica o cátodo (região n da junção). A seta indica o sentido da corrente directa. Em condução um díodo apresenta uma queda de tensão entre os seus terminais, que no caso de díodos de silício é $V_D \sim 0.7 \text{ V}$.

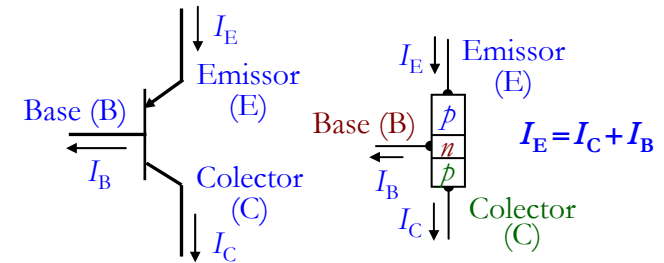
O Primeiro Transístor, ~1947



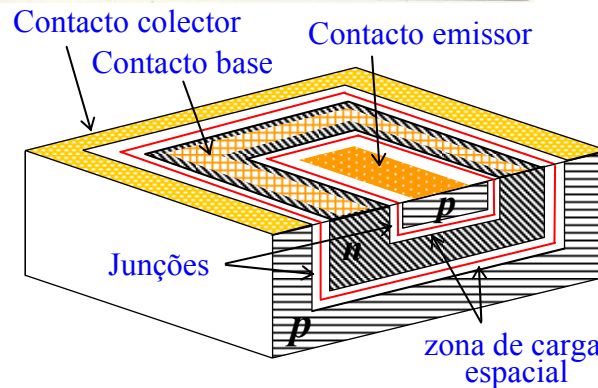
Símbolo do transístor *n-p-n*



Símbolo do transístor *p-n-p*



Esquema simplificado da estrutura de um transístor bipolar *pnp* «+ moderno»

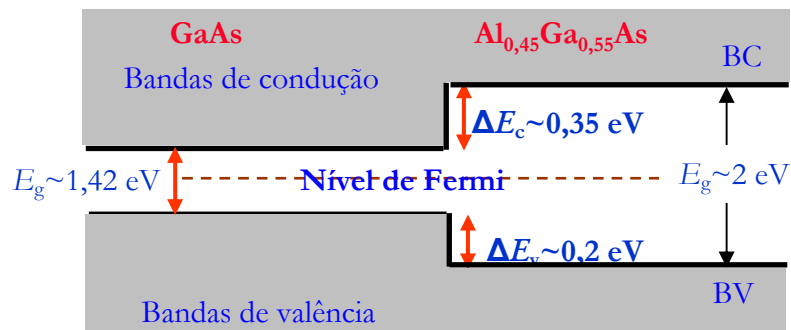


- Região do tipo *p*
- Região do tipo *n*

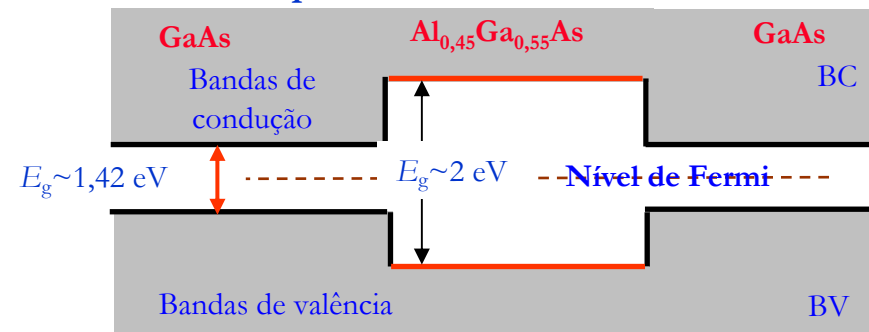
Estruturas mesoscópicas e nanoscópicas

- Uma estrutura apresenta comportamento clássico como, por exemplo, características óhmicas – a intensidade de corrente eléctrica depende linearmente da tensão aplicada –, se as suas dimensões são muito superior a um dos seguintes comprimentos característicos:
 - comprimento de onda associado à função de onda representativa da partícula;
 - livre percurso médio da partícula;
 - comprimento de relaxação de fase (“phase-relaxation length”), que corresponde à distância que a partícula pode percorrer sem que a sua relação de fase inicial seja destruída.
- Estas escalas de comprimento variam de material para material, sendo fortemente influenciados pela temperatura, campos eléctricos e magnéticos, etc.
- Estruturas cujas dimensões são muito maiores que o átomo, mas não o suficientemente grande para apresentarem um comportamento óhmico, por exemplo, designam-se **mesoscópicas**.
- Uma heterojunção corresponde ao estabelecimento da *ligação cristalina* entre dois materiais diferentes, ver figura da esquerda. Ter presente que na interface entre os dois *materiais*, neste caso dois semicondutores, a energia do nível de Fermi através da estrutura é *constante*, isto é, *não depende da posição*. Este facto implica que o mínimo das bandas de condução e o máximo das bandas de valência possam sofrer descontinuidades ao longo da estrutura (ver figuras).
- Por exemplo, *sanduichando* uma camada de $\text{Al}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{As}$ entre duas camadas de GaAs, figura da direita, obtém-se uma barreira de potencial para os electrões e para as lacunas: o perfil do mínimo da banda condução desta estrutura apresenta uma barreira de potencial para os electrões quase livres e o perfil do máximo da banda de valência corresponde a uma barreira para as lacunas.
- A altura da barreira na banda de condução é determinada pelas descontinuidades da banda de condução entre o $\text{Al}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{As}$ e o GaAs; a altura da barreira na banda de valência resulta das descontinuidades da banda de valência entre o $\text{Al}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{As}$ e o GaAs.

Degrau de potencial



Barreira de potencial

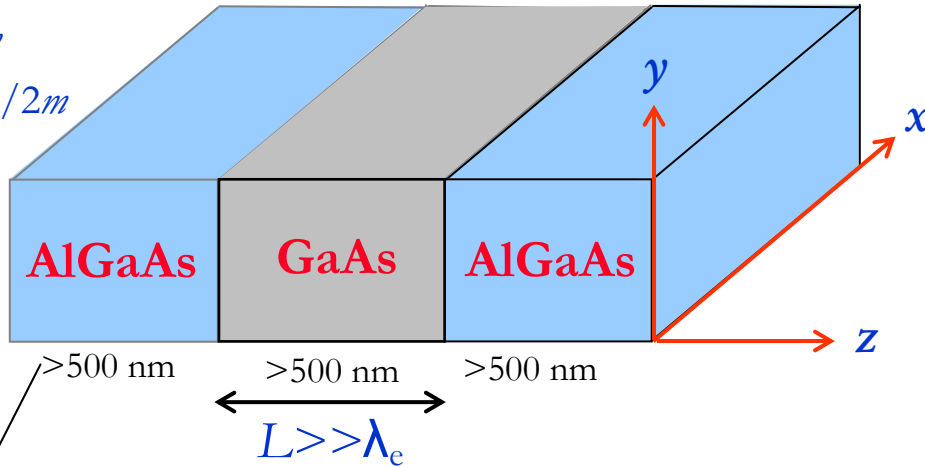


- O hiato do arseniato de gálio é $\sim 1,42$ eV; o hiato do AlGaAs depende da composição de alumínio ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$): se $x=0$, obtém-se GaAs; se $x=1$ tem-se AlAs. Várias características do material são função da concentração de alumínio: o hiato aumenta com x , o índice de refração diminui com x , a massa efectiva dos portadores de carga (electrões na BC e lacunas na BV) também depende de x (adiante serão apresentadas as respectivas relações). De forma análoga as propriedades dos compostos InGaAs, InAlAs, InGaAsP/InP, InGaAlAs/InP, por exemplo, dependem da concentração de índio e de alumínio.

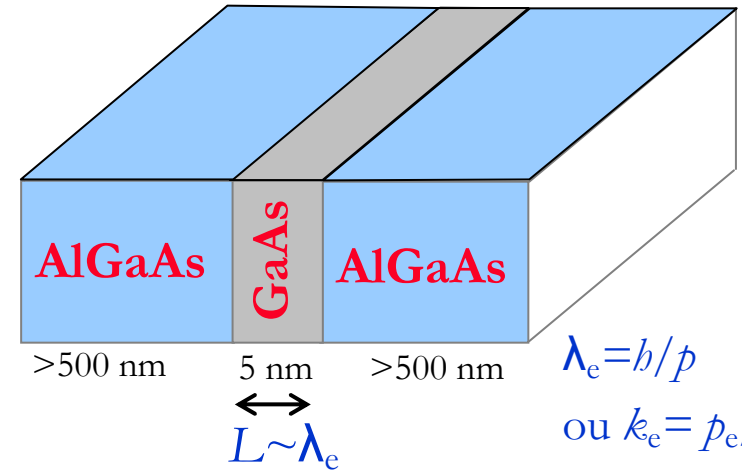
Confinamento quântico a 1D: “poço” de potencial

$\lambda_e = h/p$
 ou $k_e = p_e/\hbar$
 $E = p^2/2m$
 $E = (\hbar k_e)^2/2m$

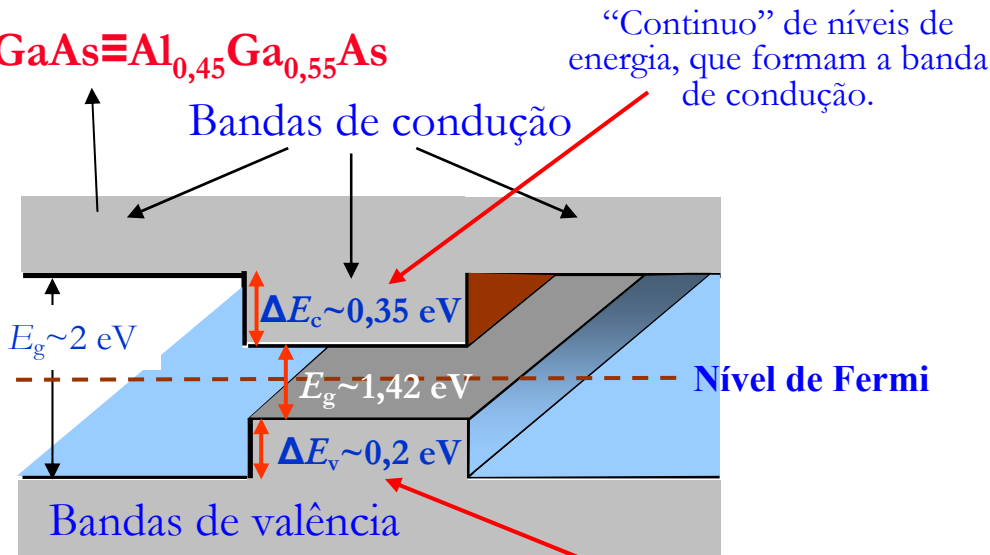
Heterojunção semicondutora



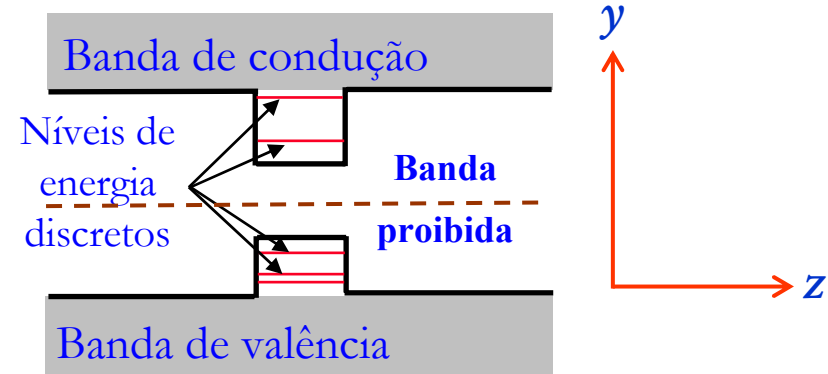
Camada nanométrica entre camadas micrométricas



$\lambda_e = h/p$
 ou $k_e = p_e/\hbar$
 $E = p^2/2m$
 $E = (\hbar k_e)^2/2m$



Poço quântico



$L \sim \lambda_e$ Nos poços os portadores de carga têm apenas 2 graus de liberdade: k_x , e k_y .

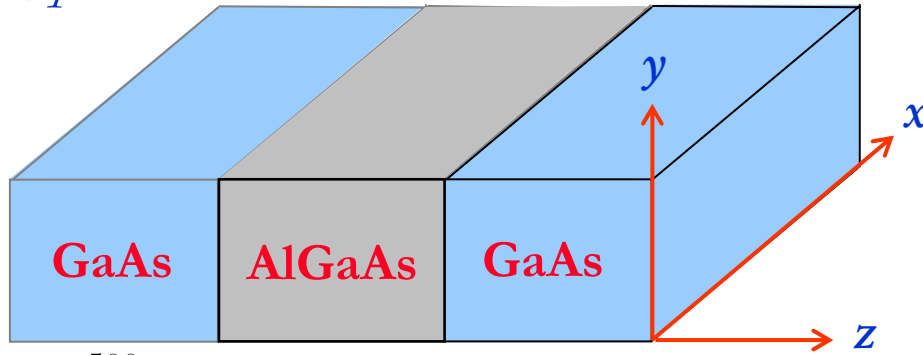
Os portadores de carga mantêm os 3 graus de liberdade em toda a estrutura: k_x , k_y e k_z

“Continuo” de níveis de energia, que formam a banda de valência.

“Confinamento” quântico a 1D: “barreira” de potencial

$$\lambda_e = h/p$$

Semicondutores 3D



>500 nm >500 nm >500 nm

$L \gg \lambda_e$

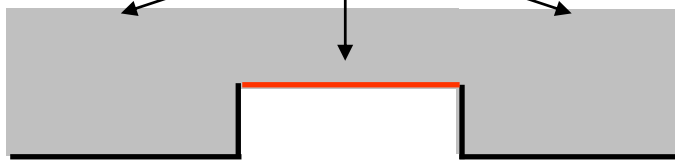
$$\lambda_e = h/p$$

ou $k_e = p_e/\hbar$

$$E = p^2/2m$$

$$E = (\hbar k_e)^2/2m$$

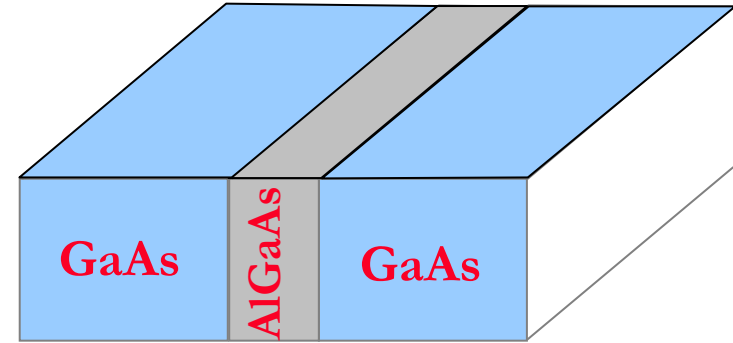
Bandas de condução



Nível de Fermi

Bandas de valência

Camada nanométrica entre camadas micrométricas



>500 nm 5 nm >500 nm

$L \sim \lambda_e$

Barreira de potencial



Banda de condução

Banda de valência

$L \sim \lambda_e$

Exemplo do diagrama de bandas de energia numa estrutura $p-i-n$

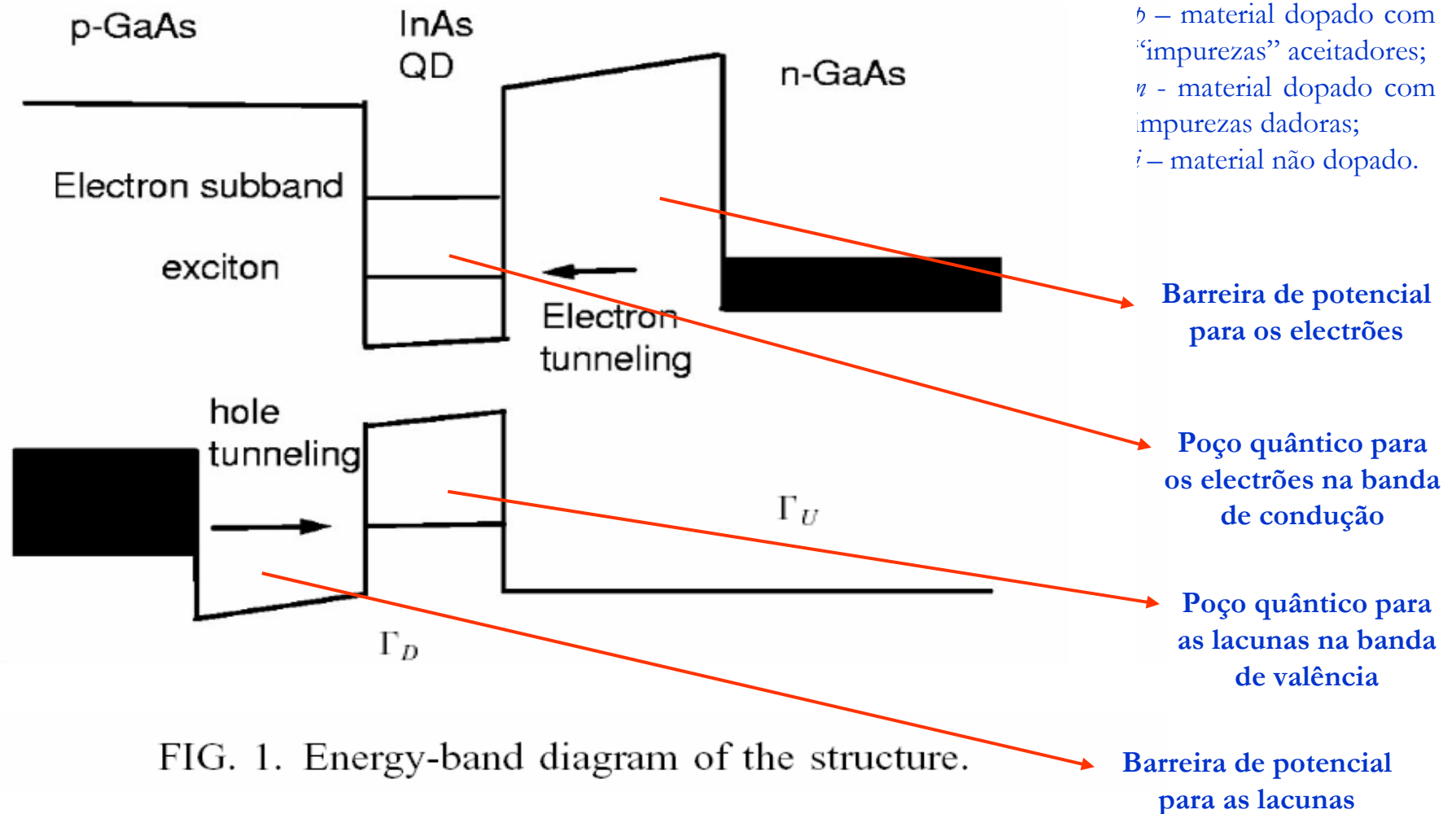


FIG. 1. Energy-band diagram of the structure.

“Typical InAs QD exciton decay time: 1.3 ns.”

QD: “quantum dot” (ponto quântico).

Ver definição de excitão (“exciton”).

Análise do “poço” de potencial de profundidade infinita

- Considere uma distribuição de potencial $V(x)$ que toma o valor zero no interior de uma caixa unidimensional de largura L , e infinito no exterior da caixa. Vamos considerar apenas as soluções correspondentes aos estados estacionário, i.e., estado em que a energia não depende do tempo. Esta situação corresponde a considerar a equação de Schrödinger independente do tempo. Ter presente que a solução será do tipo: $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r})\Phi(t) = \Psi(\mathbf{r})\exp(-iEt/\hbar)$.
- O problema consiste em determinar as funções de onda de uma partícula sujeita a esta distribuição de potencial que satisfaz a equação de Schrödinger. Neste caso, poço de profundidade infinita, é possível determinar analiticamente a função de onda associada à partícula no interior da caixa. Como a energia da partícula fora da caixa seria infinita, tal facto implica que a partícula fica confinada à região de potencial zero, sendo a probabilidade de encontrar a partícula fora da caixa nula, o que significa que a função de onda é idênticamente nula fora da caixa. Dentro da caixa a função de onda é idêntica à de uma partícula livre. Estas condições são resumidas matematicamente impondo: $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$. A solução geral será do tipo $\Psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$.
- A solução que satisfaz as condições fronteira é $\Psi(x) = A\sin(k_n x)$, com $k_n = n\pi/L$. A função normalizada correspondente, após “normalização”:

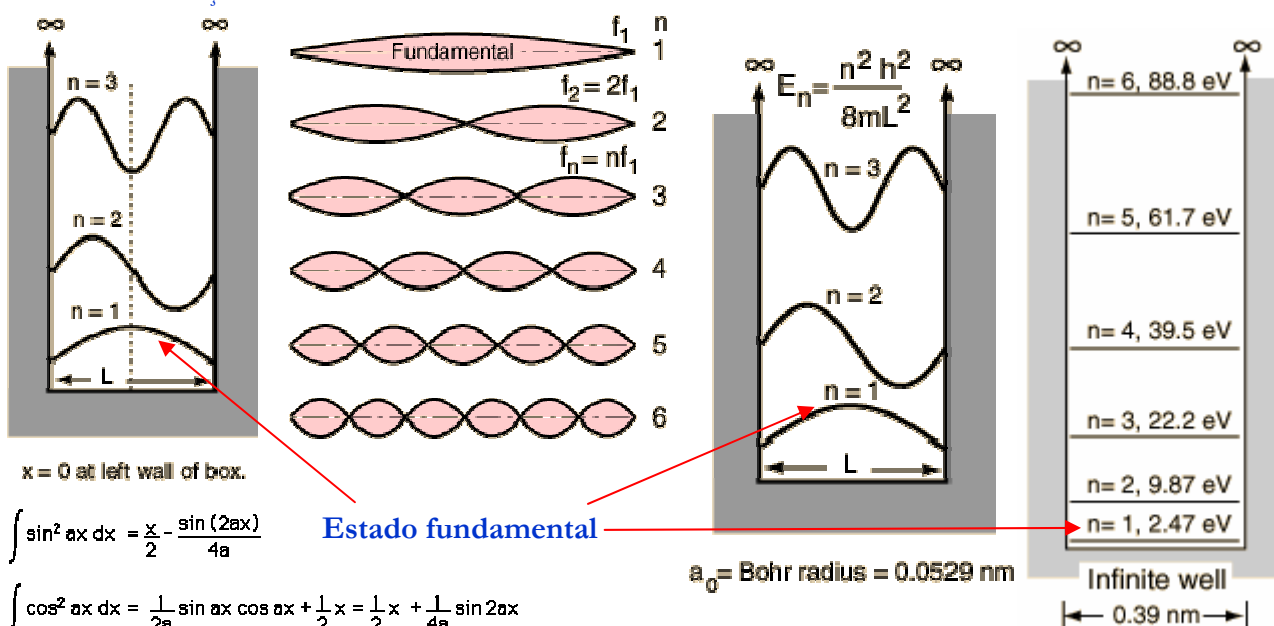
$$\int_0^L \Psi^* \Psi dx = \int_0^L A_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 = A_n^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin\left(2\frac{n\pi}{L}x\right)}{4n\pi/L} \right]_0^L \quad \text{ou} \quad A_n^2 \frac{L}{2} = 1, \quad \text{é} \quad \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi}{L}x \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Na figura abaixo estão representadas as três primeiras funções próprias do operador hamiltoniano. As soluções obtidas são idênticas aos modos de vibração de uma corda

Das relações de Einstein e de de Broglie ($\lambda = h/p$, $k = p/\hbar$, $E = p^2/2m$, $E = (\hbar k)^2/2m$) obtém-se os valores próprio da energia da partícula dentro do poço de potencial: $E = (\hbar k)^2/2m = n^2 h^2/8mL^2$ (ver figuras abaixo).

Na figura são indicados os valores de energia dos primeiros seis estados permitidos num poço de potencial de profundidade infinita, de largura 0,39 nm. Considera-se que a partícula tem a massa do electrão em repouso.

Deve ter-se presente, tendo em conta as funções próprias da energia, que a probabilidade de encontrar a partícula em certas posições segundo x é nula, para além de a probabilidade de encontrar a partícula junto às paredes do poço é nula em todos os estados permitidos. Tome-se o segundo estado permitido, por exemplo: a probabilidade de encontrar a partícula no centro do poço é nula. Voltaremos a este assunto. (Ver também a aula teórica de 16-05-06).



$$\int \sin^2 ax dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$$

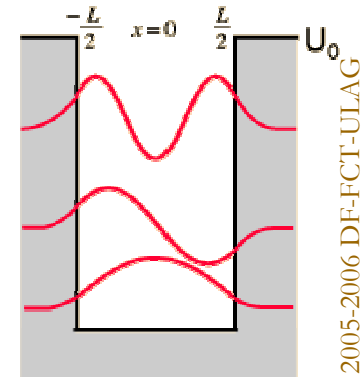
$$\int \cos^2 ax dx = \frac{1}{2a} \sin ax \cos ax + \frac{1}{2}x = \frac{1}{2}x + \frac{1}{4a} \sin 2ax$$

Estado fundamental

$a_0 = \text{Bohr radius} = 0.0529 \text{ nm}$

Análise do “poço” de potencial de profundidade finita

- Considere uma distribuição de potencial $V(x)$ que toma o valor zero no interior de uma caixa unidimensional de largura L , e igual a U_0 no exterior da caixa. Vamos considerar apenas as soluções correspondentes aos estados estacionário, i.e., estado em que a energia não depende do tempo. Esta situação corresponde novamente a considerar a equação de Schrödinger independente do tempo. De momento apenas estamos interessados em estado do sistema cuja energia da partícula é inferior à altura do poço, i.e., $E < U_0$. Notar a alteração da origem do sistema de eixos, que agora está no centro do poço.
- Como agora a energia da partícula fora da caixa é finita, é possível encontrar a partícula no interior das paredes (barreiras) do poço. Contudo, a probabilidade de encontrar a partícula no interior das paredes do poço diminui com o afastamento do poço, sendo nula no infinito. As condições fronteira são agora que a função de onda e as respectivas derivadas devem ser contínuas nas paredes do poço, i.e., $\Psi(-L/2) = \Psi(-L^+/2)$, $\Psi(+L/2) = \Psi(+L^+/2)$, e ainda $d\Psi(-L/2)/dx = d\Psi(-L^+/2)/dx$, $d\Psi(+L/2)/dx = d\Psi(+L^+/2)/dx$.
- Dentro da caixa a função de onda é idêntica à de uma partícula livre:



Dentro da caixa a função de onda é idêntica à de uma partícula livre:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Cuja solução é do tipo $\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ ou $\Psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$.

$$\beta = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$$

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

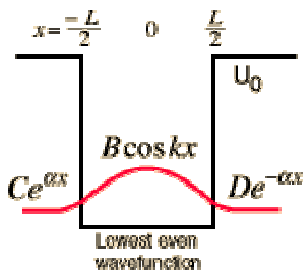
Fora do poço a função de onda deve satisfazer a equação:

$$\text{com } \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\beta^2 - k^2} \quad (1)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = (E - U_0)\Psi(x) \quad \text{ou} \quad \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = \alpha^2 \Psi(x) \quad \text{with general solution of form:}$$

$$\Psi(x) = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x}$$

Soluções par



Estado fundamental

The condition of continuity for the wavefunction at the boundaries gives:

$$C e^{-\alpha L/2} = B \cos(-kL/2) \quad \text{so } C = D$$

$$D e^{-\alpha L/2} = B \cos(kL/2)$$

The condition of continuity for the derivative of the wavefunction gives:

$$\alpha C e^{-\alpha L/2} = -k B \sin(-kL/2)$$

$$\alpha D e^{-\alpha L/2} = -k B \sin(kL/2)$$

Dividing either of these two sets gives:

$$\alpha = k \tan \frac{kL}{2} = \sqrt{\beta^2 - k^2} \quad (2)$$

The condition of continuity for the wavefunction at the boundaries gives:

$$C e^{-\alpha L/2} = B \sin(-kL/2) \quad \text{so } C = -D$$

$$D e^{-\alpha L/2} = B \sin(kL/2)$$

The condition of continuity for the derivative of the wavefunction gives:

$$\alpha C e^{-\alpha L/2} = k B \cos(-kL/2)$$

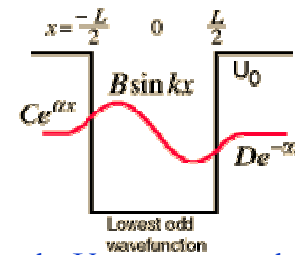
$$-\alpha D e^{-\alpha L/2} = k B \cos(kL/2)$$

Dividing either of these two sets gives:

$$\alpha = \frac{-k}{\tan \frac{kL}{2}} = \sqrt{\beta^2 - k^2} \quad (3)$$

Soluções impar

Fazendo $X = kL/2$ e $Y = \alpha L/2$, obtém-se da eq. 2:



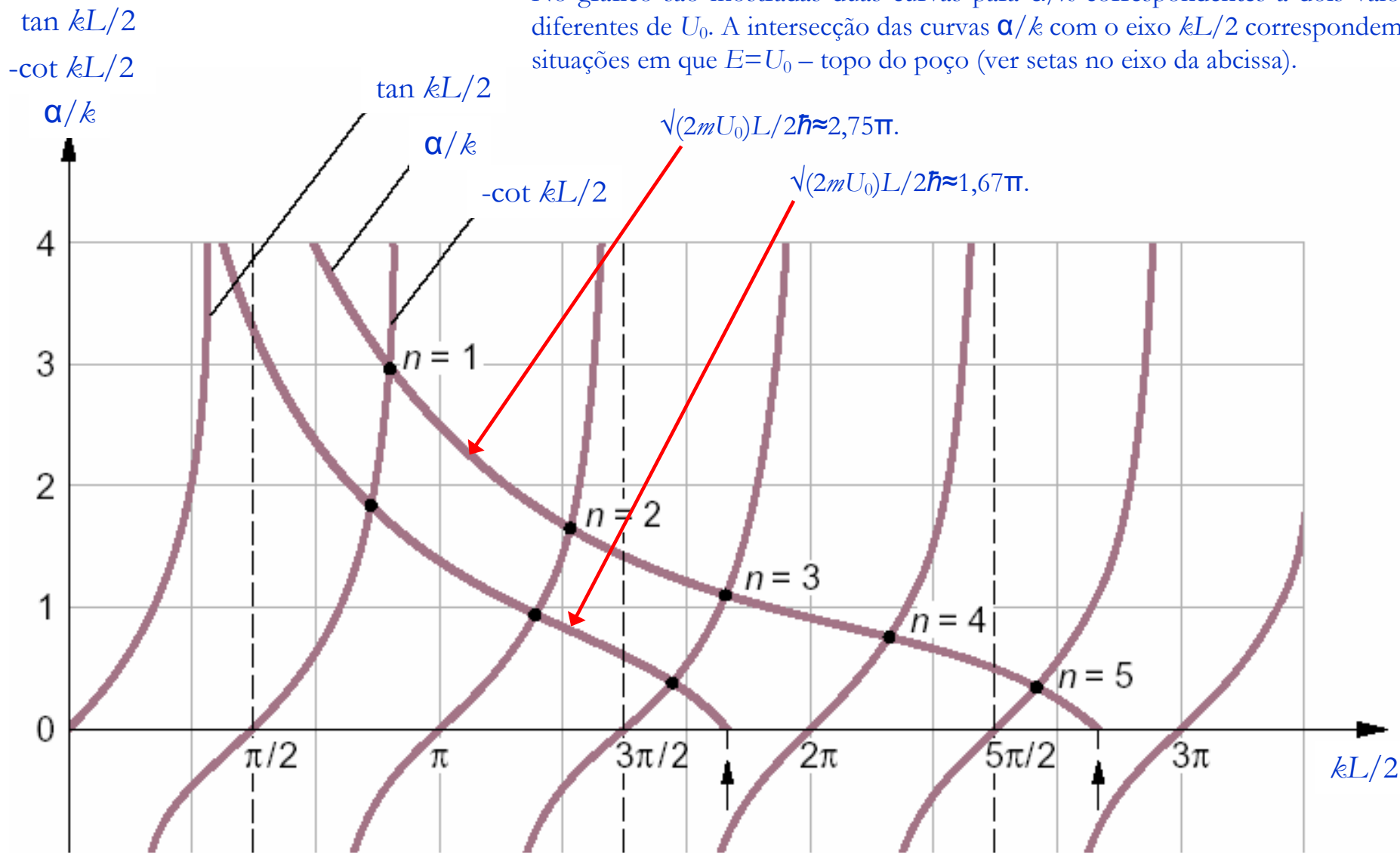
$Y = X \tan X$ [eq. 4]; e da eq. 1: $X^2 + Y^2 = mU_0 L^2 / 2\hbar^2 \equiv \beta^2$ [eq. 5]. As relações 4 e 5 podem ser representadas graficamente no plano XY:

os valores de X e, portanto, de k , possíveis correspondem aos pontos de intersecção das duas curvas. O mesmo se aplica para a equação (3), i.e., à solução anti-simétrica. Ver, por exemplo., o texto de R. Potting, pp 52. Outra possibilidade é a descrita na página seguinte.

As equações (2) e (3) também podem ser tratadas numericamente, obtendo-se os valores possíveis para k e, portanto, para E : o espectro de energia é discreto.

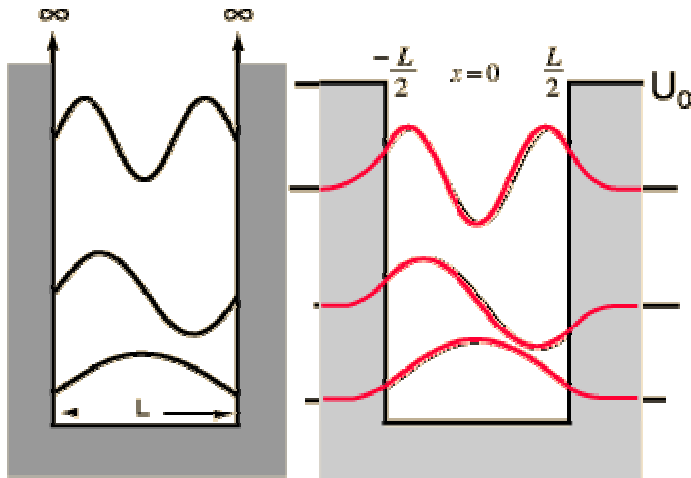
Solução gráfica para um poço de potencial quadrado finito

No gráfico são mostradas duas curvas para α/k correspondentes a dois valores diferentes de U_0 . A intersecção das curvas α/k com o eixo $kL/2$ correspondem às situações em que $E=U_0$ – topo do poço (ver setas no eixo da abcissa).



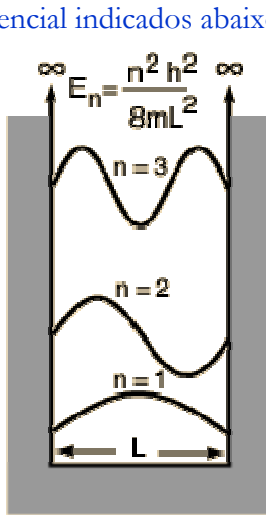
Diferenças entre os “poços” de potencial finito e infinito

■ Considere-se um electrão confinado nos poços de potencial indicados abaixo:

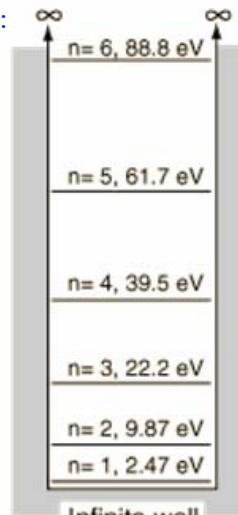


Infinite square well: wavefunction zero at walls.

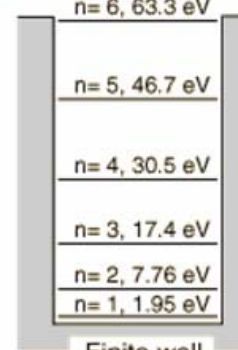
Finite square well: wavefunction has exponential attenuation at the walls.



$a_0 = \text{Bohr radius} = 0.0529 \text{ nm}$



$U_0 = 64 \text{ eV}$



Comparar os valores da energia dos diferentes estados permitidos.

Nas figuras são indicados valores para a energia dos estados permitidos para os casos de um poço de potencial de profundidade infinita e de um poço finito, de igual largura, com profundidade $U_0=64 \text{ eV}$ (valores obtidos graficamente/numericamente). Contudo, pode-se determinar as energias correspondentes

aos estados de menor energia permitidos num poço de potencial finito de largura L , de forma aproximada, representando o poço finito pelo seu «equivalente» infinito cuja a largura é igual à largura efectiva do poço finito para esses estado, isto é, para um estado com número quântico n a largura do poço infinito «equivalente» é $L+2/\alpha_n$, em vez de L . Mas como obter α_n ? Ter presente que o conhecimento de α_n é equivalente a conhecer k_n ou E_n . Pode-se estimar α_n a partir do valor de energia $E_{n,\infty}$ do poço infinito de largura L :

$$\alpha_n^L = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E_{n,\infty}^L)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(U_0 - \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \right)}$$

$$L_n^* = L + 2/\alpha_n^L$$

$$E_n^L = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_n^{*2}} n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \frac{L^2}{L_n^{*2}} n^2 = E_{n,\infty}^L \frac{L^2}{L_n^{*2}}$$

Exemplo: Considere-se os poços das figuras acima.

Dos dados da figura obtém-se $\alpha_{n=1} = 42,3 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$,

$L^* = 0,44 \text{ nm}$ e $E_{n=1}^L = 2,47 (0,39/0,44)^2 \text{ eV} = 1,94 \text{ eV}$.

Para $n=2$: $E_{n=2}^L = 7,74 \text{ eV}$.

For the finite potential well, the wavefunction is of the form $\Psi = A e^{-\alpha x}$, which diminishes to $A e^{-1}$ at $x = \frac{1}{\alpha}$. This is used to estimate an effective width, which can be refined to reach a numerical solution.

Ter presente que à medida que o número quântico n aumenta a precisão deste método diminui. Assim, deve-se usar esta metodologia apenas para estimar o valor da energia de estados com energia significativamente menor que U_0 .

Efeito do campo eléctrico nas funções de onda do poço de potencial

Sistema material GaAs/Al_xGa_{1-x}As

$$E_g(x) = 1,424 + 1,247x \text{ eV, para } x < 0,45; \Delta E_g(x) = 1,247x \text{ eV}; \Delta E_C \approx 0,6\Delta E_g(x); \Delta E_V(x) = \Delta E_g(x) - \Delta E_C(x)$$

$$m_e = (0,066 + 0,0835x)m_0$$

$$m_{hh} \approx 0,45m_0$$

$$m_{lh} \approx 0,082m_0$$

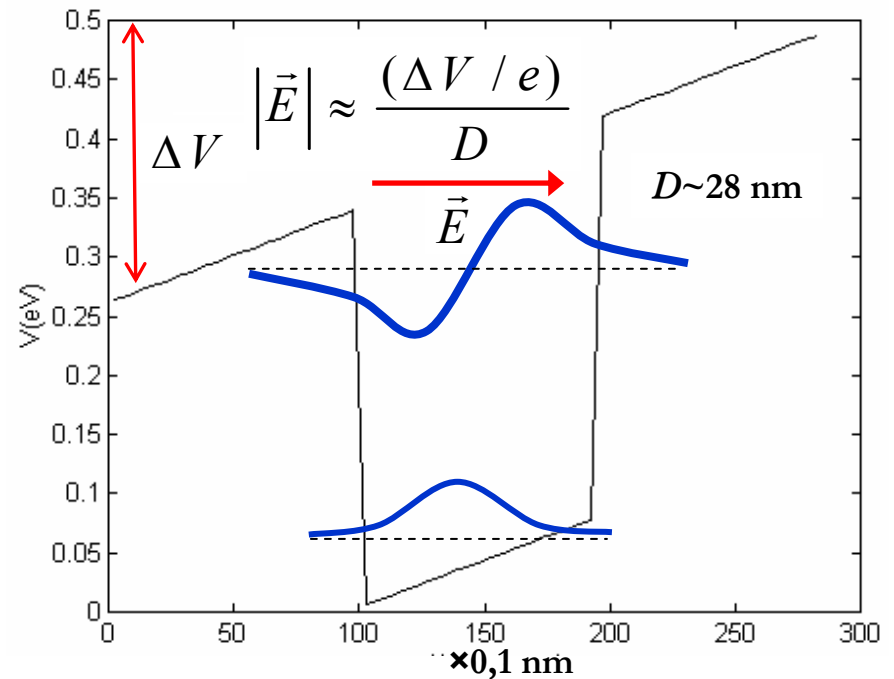
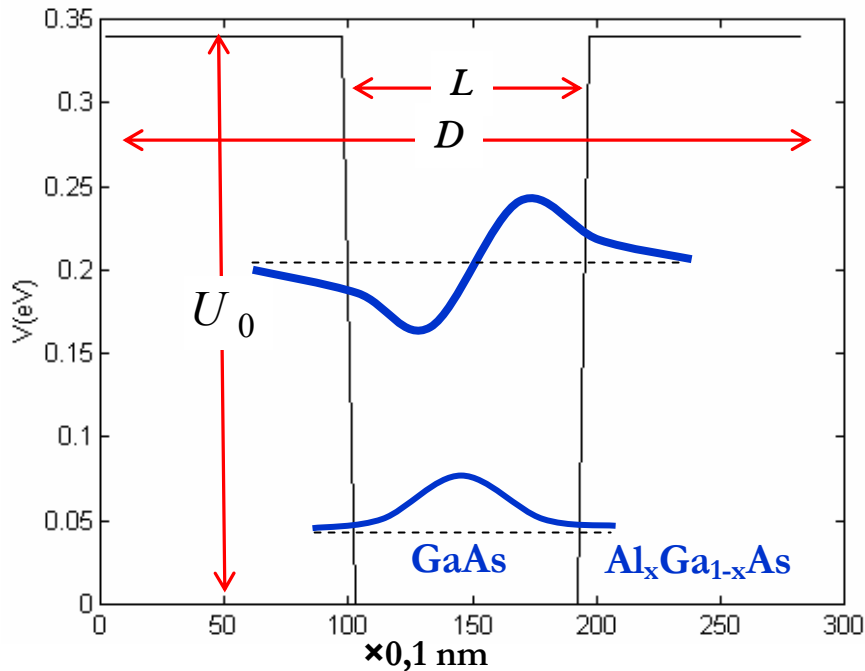
Chama-se a atenção que, em geral, podem ocorrer mais do que um tipo de lacunas na banda de valência, nomeadamente, lacunas leves e lacunas «pesadas».

Ver, por exemplo, <http://w3.ualg.pt/~jlongras/PHD-JMLF.pdf>, pp. 34.

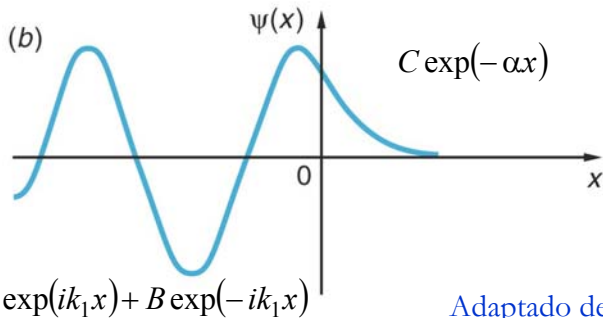
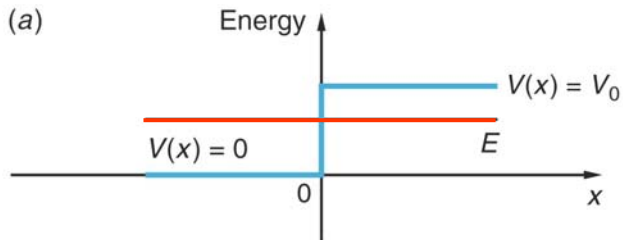
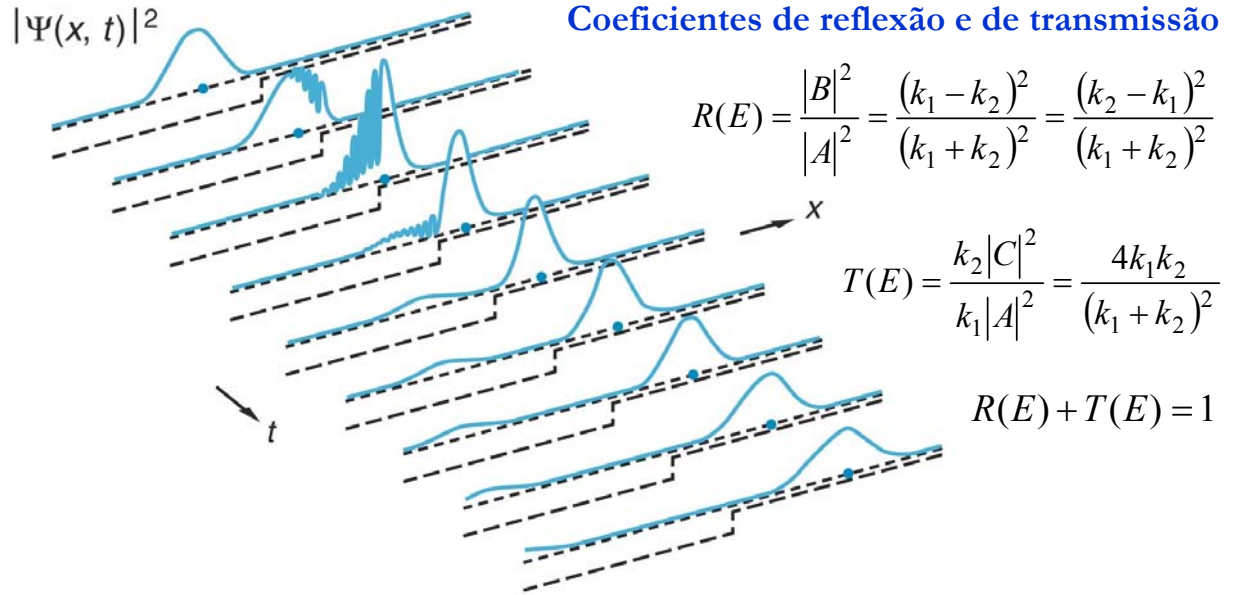
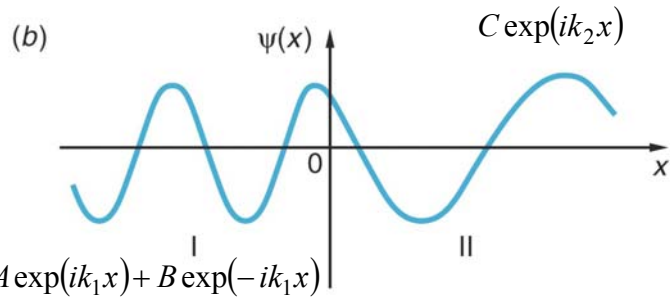
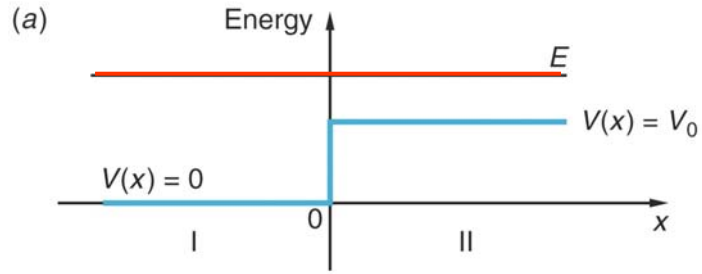
Poço quântico de GaAs/Al_xGa_{1-x}As, sob a acção de um campo eléctrico externo nulo

Considere $x=0,45$, $L=9,5 \text{ nm}$, $U_0=0,34 \text{ eV}$: perfil do mínimo da banda de condução em função do campo eléctrico \vec{E} : 0 V/cm e $\sim 10 \times 10^4 \text{ V/cm}$.

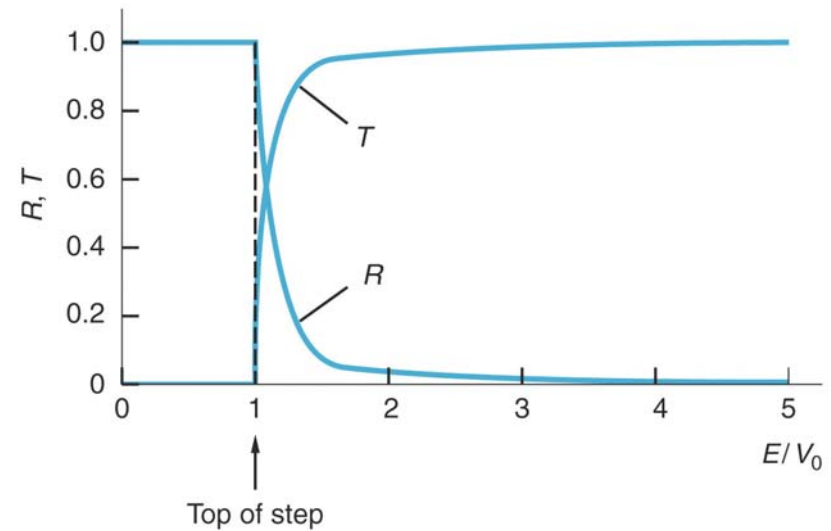
Poço quântico de GaAs/Al_xGa_{1-x}As, sob a acção de um campo eléctrico externo



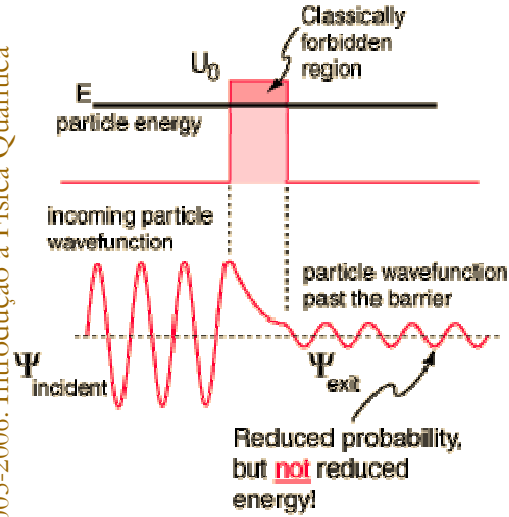
“Degrau” de potencial



Coeficientes de transmissão e de reflexão



Análise da barreira de potencial

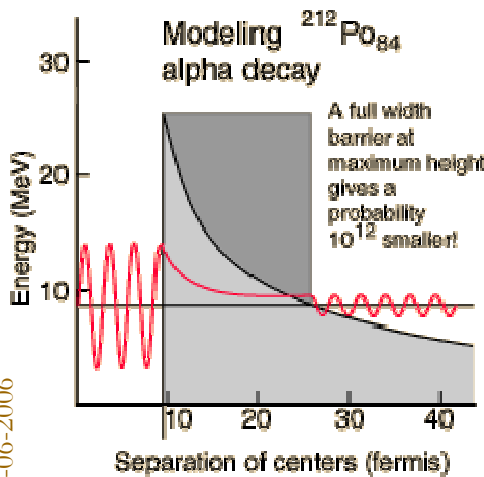


- De acordo com a Física clássica, uma partícula de massa m e com energia E inferior à altura U_0 de uma barreira de potencial, de espessura d , deslocando-se na direcção da barreira, não pode penetrar a barreira – a região no interior da barreira é uma região proibida para a partícula segundo a Física clássica.
- Contudo, de acordo com a descrição quântica a função de onda associada a uma partícula livre deve ser contínua na interface da barreira, verificando-se um decaimento exponencial da função de onda associada à partícula no interior da barreira. A função de onda deve ainda ser contínua na interface oposta, o que permite concluir que existe uma probabilidade finita da partícula “passar” para a região a jusante da barreira – “the particle tunnels through the barrier”. Aplicações: diodo de efeito de túnel e estruturas de dupla barreira de potencial, entre outras.
- No movimento em direcção à barreira, a partícula *livre* é descrita pela função de onda $\Psi(x)=A*\exp(ikx)+B*\exp(-ikx)$. Quando atinge a barreira, a função de onda deve satisfazer a equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = (E - U_0) \Psi(x) \quad \text{Cuja solução no interior da barreira é da forma: } \Psi(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$$

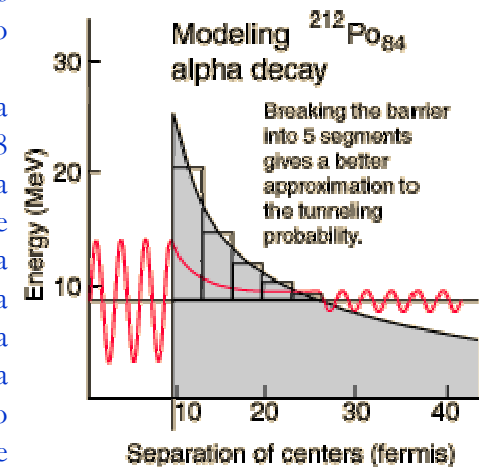
- No espaço a jusante à barreira, a partícula será descrita novamente pela função de onda propagando-se para a direita: $\Psi(x)=F\exp(ikx)$.
- A probabilidade de uma partícula com $E < U_0$ atravessar a barreira é dada por: $T \equiv |F/A|^2 = \{1 + \sinh^2(\alpha d) / (4E/U_0 - 4E/U_0^2)\}^{-1}$, onde $\alpha = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$ e d é a espessura da barreira. Se $\alpha d \gg 1$, verifica-se $T \approx 16E/U_0(1 - E/U_0)\exp(-2\alpha d)$.

Exemplo de uma barreira de potencial “natural”: transmutação nuclear por emissão de partículas alfa



Os tempos de meia vida de muitos elementos «pesados» que emitem partículas alfa varia em mais de 20 ordens de magnitude, desde décimas de microsegundo até milhares de milhões de anos.

A figura ilustra a barreira de potencial de altura 26 MeV, que uma partícula alfa enfrenta no núcleo do polónio 212, que emite partículas alfa com energia 8,78 MeV, com meia vida da ordem de 0,3 μ s. A barreira nuclear cai com o inverso da distância ao núcleo. Da expressão para a barreira rectangular pode concluir-se que a probabilidade de transmissão através da barreira diminui com a altura e com a largura da barreira. Numa primeira aproximação podemos considerar a barreira como rectangular. Se quisermos melhorar o calculo podemos assumir que a barreira é formada por uma sucessão de barreiras de potencial com altura progressivamente menor (figura da direita): a probabilidade final é igual ao produto das probabilidades parcelares. No caso representado obtém um valor de probabilidade correspondente a um tempo de meia vida de $\sim 0,25 \mu$ s.

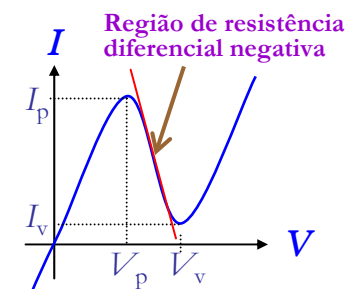


Outras aplicações do efeito de túnel

- Como referido anteriormente, para cada junção p-n, há um valor de tensão inversa a partir do qual a intensidade da corrente inversa aumenta rapidamente, tornando-se, praticamente, independente da tensão aplicada: **tensão de ruptura da junção**. A ruptura pode ocorrer devido ao **processo de avalanche** ou ao **efeito de Zener**.
- **Efeito de avalanche:** à medida que a tensão inversa cresce, embora o número de portadores minoritários não varie de forma significativa sob a acção do campo eléctrico crescente, a energia dos portadores aumenta e pode tornar-se suficiente para produzir na zona de deplecção novos pares electrão-vazio os quais vão aumentar o valor da corrente. O processo de multiplicação de portadores é semelhante ao efeito de uma avalanche. Atingido o valor da tensão que desencadeia o efeito de avalanche, a tensão mantém-se praticamente constante, mesmo que a corrente varie significativamente.
- **Efeito de Zener:** há junções p-n em que o campo eléctrico na região de deplecção é suficientemente intenso para provocar a transição de electrões da banda de valência para a banda de condução. (O efeito é uma demonstração prática do efeito quântico *de túnel*.) O efeito de Zener é dominante nos díodos cuja tensão de ruptura é inferior a seis volts, e o efeito de avalanche naqueles em que a ruptura se verifica acima de seis volts.
- Os díodos **especialmente** fabricados para operar na região de ruptura, independentemente do efeito usado, são designados de **díodos de zener**. Nos díodos de zener baseados no efeito de avalanche, a zona de transição é mais gradual do que nos díodos empregando o efeito de Zener.

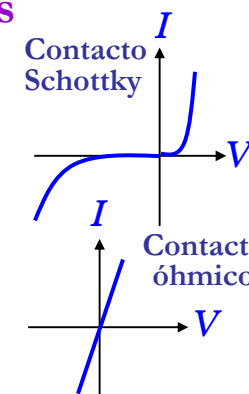
Díodo de efeito de túnel

Numa junção p-n, ver página da homojunções semicondutoras, com concentração de aceitadores e dadores muito elevada ($N_A, N_D \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$), a espessura da zona de deplecção é da ordem de $\sim 10 \text{ nm}$. Neste caso, outro mecanismo de condução entra em jogo: o **efeito de túnel**. Os electrões têm, agora, elevada probabilidade de transitar directamente da **banda de condução do lado n** para a **banda de valência do lado p**. Nos díodos túnel a corrente directa começa por crescer com a tensão, até atingir **um máximo local**, decrescendo em seguida até atingir **um mínimo local**, a partir do qual aumenta exponencialmente e de forma idêntica à da junção p-n moderadamente dopada; **a corrente inversa aumenta linearmente com a tensão**.



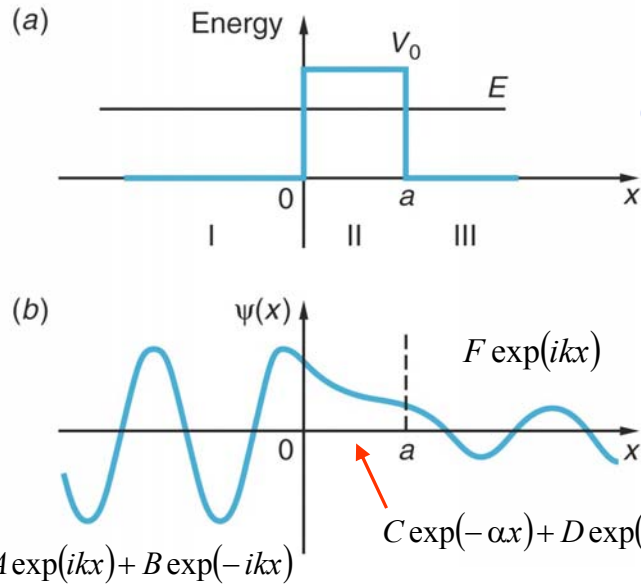
Junções metal-semicondutor: barreiras de Schottky e contactos óhmicos

Em geral, o contacto entre um metal e um semicondutor não é óhmico, exibindo um comportamento semelhante ao de uma junção p-n (ver figura ao lado). Neste caso o contacto designa-se por contacto ou barreira de **Schottky** e o dispositivo baseado neste efeito designa-se por **díodo de schottky**. A queda de tensão, em condução, nestes díodos é cerca de metade da de uma junção p-n. Estes dispositivos são muito mais rápidos do que o díodo rectificador porque no processo de condução só intervêm os portadores maioritários (não há lugar à recombinação dos portadores minoritários).



Para a junção p-n ter aplicação prática, é necessário fazer a sua ligação com um circuito exterior, i.e., obter duas junções metal-semicondutor (uma no lado n e outra no lado p). Estas junções não devem alterar ou mascarar as propriedades do dispositivo SC em apreço. Por outras palavras, o contacto (junção) metal-semicondutor deve ter uma característica **corrente-tensão linear**, i.e., o contacto deve ser **óhmico**. Claro que o metal a usar depende do material SC de que é feito o dispositivo.

Exemplos de efeito de túnel em barreira de potencial

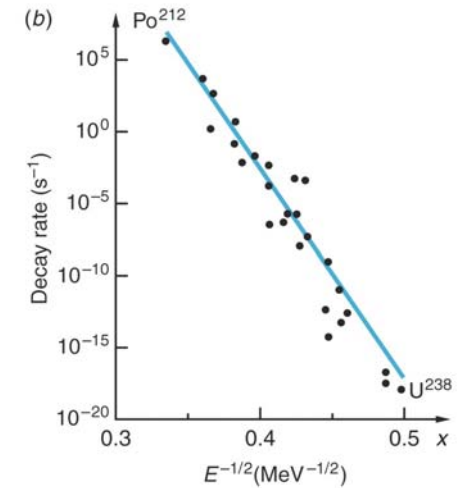
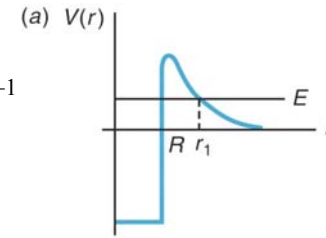


Coefficientes de transmissão

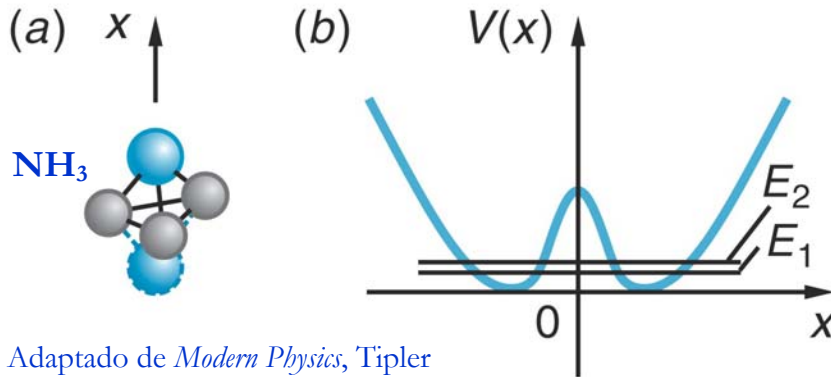
$$T(E) = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{\sinh^2 \alpha a}{4 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right)} \right]^{-1}$$

Se $\alpha a \gg 1$: $T(E) \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) \exp(-2\alpha a)$

Decaimento alfa

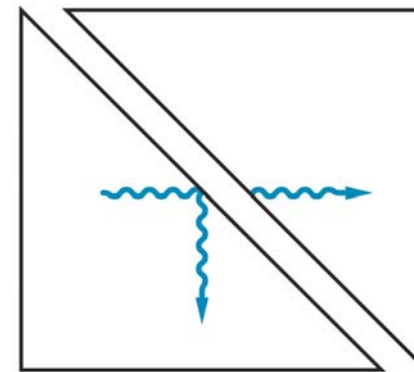


Relógio atômico de NH_3



Adaptado de *Modern Physics*, Tipler

Barreira óptica



Exemplos clássicos dos *efeitos de túnel*: efeito de Fabry-Perot (óptica), reflexão frustrada (óptica), acopladores direccionais em óptica integrada (óptica); ondas evanescentes.

Microscópico de varrimento baseado no efeito de túnel

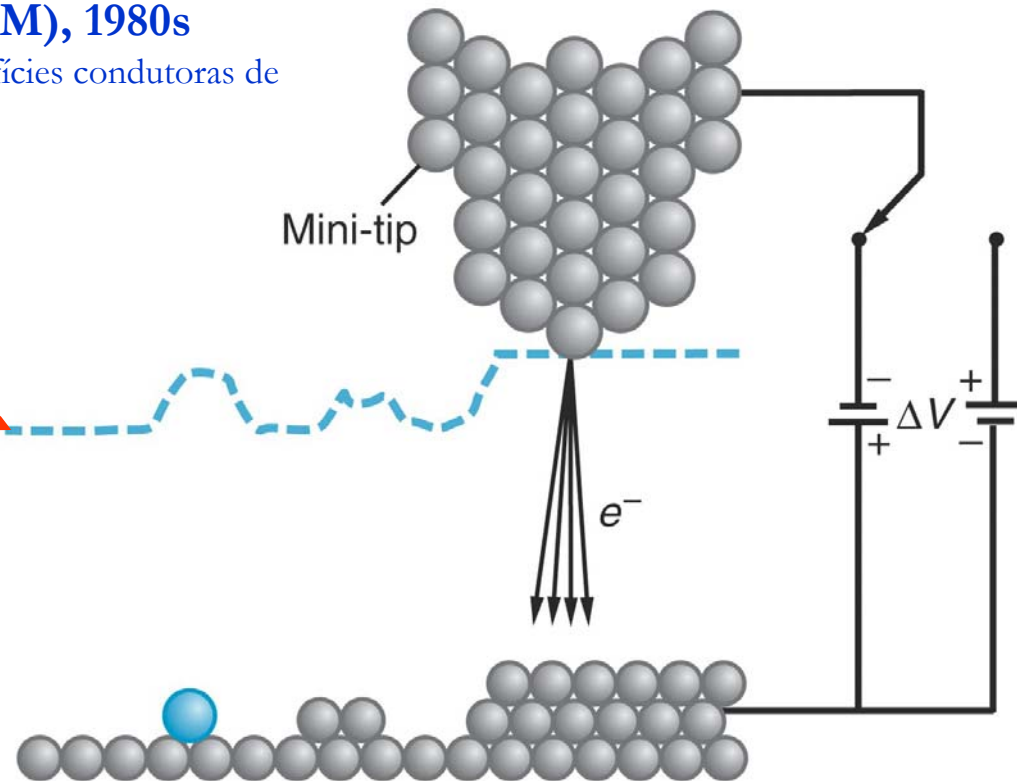
Scanning Tunneling Microscope (STM), 1980s

Este microscópio permite a caracterização de superfícies condutoras de electricidade.

Perfil do percurso da ponta de prova

Ver também “Atomic Force Microscope”, AFM

O AFM é semelhante ao STM. Contudo, o AFM permite a caracterização de superfícies não condutoras.



Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

A corrente de túnel é extremamente sensível à largura da barreira. Uma variação de 0,5 nm na largura da barreira pode provocar uma alteração na intensidade de corrente de um factor de 10 000. À medida que a ponta de prova percorre a amostra, a corrente de túnel é mantida constante usando um sistema de re-alimentação negativa baseado em piezoeléctricos que asseguram que a largura da barreira não varia. Assim, a superfície da amostra pode ser *mapeada* através do movimento vertical da ponta de prova.

Resolução: da ordem do tamanho do átomo.

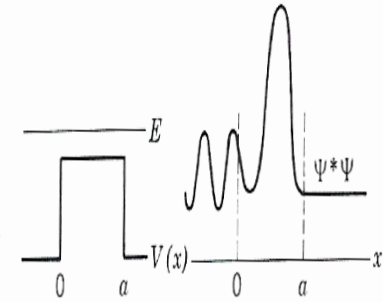
Piezoelectricidade ou piezelectricidade: electricidade desenvolvida em certos cristais quando se exercem pressões sobre as suas faces (de piez- + electricidade); piez(o)- elem. de formação de palavras que exprime a ideia de fazer pressão, comprimir, apertar (do gr. piézein, «fazer pressão»).

“Resumo”

RIASSUNTO

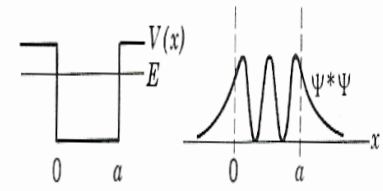
Name of System	Physical Example	Potential and Total Energies	Probability Density	Significant Feature
Zero potential	Proton in beam from cyclotron		$\Psi^*\Psi$	Results used for other systems
Step potential (energy below top)	Conduction electron near surface of metal		$\Psi^*\Psi$	Penetration of excluded region
Step potential (energy above top)	Neutron trying to escape nucleus		$\Psi^*\Psi$	Partial reflection at potential discontinuity
Barrier potential (energy below top)	α particle trying to escape Coloumb barrier		$\Psi^*\Psi$	Tunneling

Barrier potential (energy above top) Electron scattering from negatively ionized atom



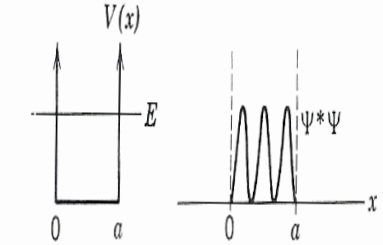
No reflection at certain energies

Finite square well potential Neutron bound in nucleus



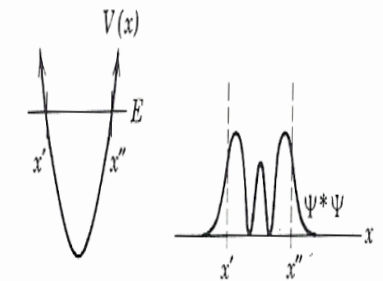
Energy quantization

Infinite square well potential Molecule strictly confined to box



Approximation to finite square well

Simple harmonic oscillator potential Atom of vibrating diatomic molecule

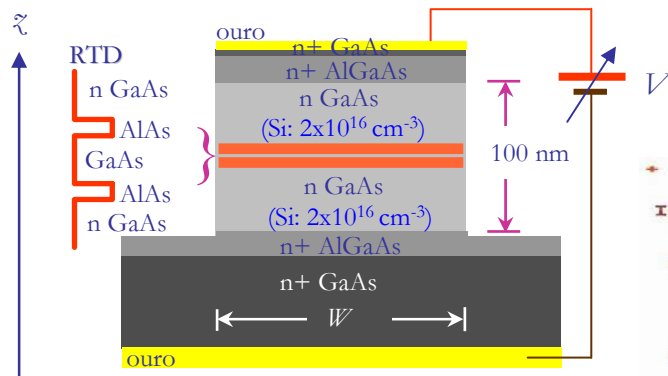


Zero-point energy

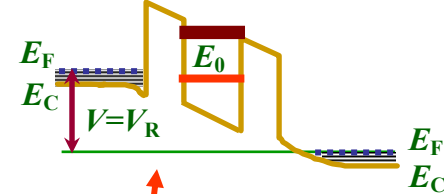
Microelectrónica *versus* Nanoelectrónica

- O uso de barreiras para controlar o fluxo de carga (electrões e/ou lacunas) de um contacto metálico para outro é a base de funcionamento dos transístores. Contudo, a *miniaturização* dos dispositivos de estado sólido não pode continuar para sempre. Isto é, mais ou tarde ou mais cedo (em uma ou duas décadas) as barreiras essenciais ao funcionamento dos transístores serão demasiado finas o que não permitirá controlar o fluxo de corrente. Os efeitos quânticos far-se-ão sentir, e os fluxos de electrões/lacunas serão dominados pelo efeito de túnel através das barreiras. Assim, haverá fluxos de corrente entre os diferentes terminais do transístor quando este deveria estar em corte (fluxos de corrente entre os seus terminais iguais a zero). Isto é uma consequência da dualidade onda partícula dos electrões.
- A nível quântico, a natureza ondulatória dos electrões permite o fluxo de electrões através de barreiras criando a corrente. Alguns dos efeitos quânticos tornam-se evidentes quando as dimensões das estruturas são inferiores ao micrómetro. Contudo, o efeito de túnel através de barreiras será determinante e dominante quando as dimensões críticas das estruturas se aproximam do comprimento de onda dos electrões no material, da ordem de 10 nm.
- Engenhosos dispositivos serão usados para explorar os efeitos quânticos em estruturas mesoscópicas permitindo o controle de fluxos de corrente eléctrica ou fluxos de energia térmica. Alguns destes dispositivos operarão por controle de apenas um único electrão, o que requer que o movimento do electrão seja constringido em duas (poço quântico), uma (fio quântico) ou zero (ponto quântico) dimensões.
- Nestes dispositivos, pequenas tensões «aquecem» os electrões rapidamente, induzindo comportamentos não-lineares complexos; o estudo destes electrões «quentes», à medida que «termalizam», é central ao desenvolvimento destes dispositivos. Dois destes dispositivos são o diodo de efeito de túnel ressonante (“Resonant tunneling diode, RTD”) e o transístor de efeito de túnel ressonante (“Resonant tunneling transistor, RTT”). Estes dois dispositivos «criam» novos mecanismos de comutação que requerem o controle do efeito quântico. O RTD consiste num emissor e num colector separados por duas barreiras com um poço quântico entre elas. O poço quântico tem largura entre 5 nm e 10 nm, sendo a espessura das barreiras da mesma ordem de grandeza ou inferior. O efeito de túnel ressonante através das duas barreiras ocorre quando a energia dos electrões incidentes no emissor coincide (“match”) a energia dos níveis desocupados no poço quântico.

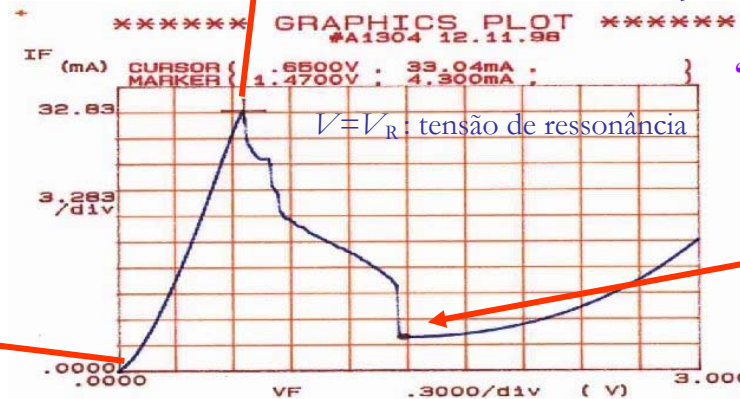
“Resonant tunneling diode, RTD”



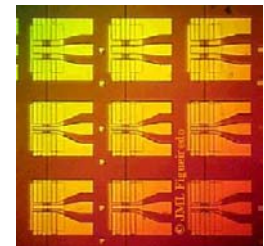
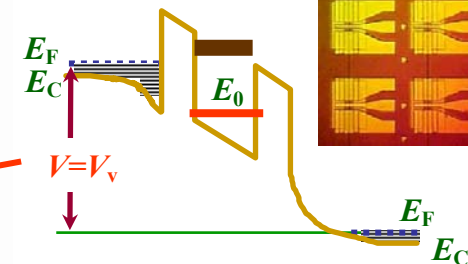
Na ressonância



No caso representado, quando E_0 se encontra entre o mínimo da banda de condução e o nível de Fermi, a probabilidade dos electrões atravessarem a barreira é próxima de 1, dando origem à corrente. Quando E_0 é inferior à mínima da BC, a condução não ocorre através dos níveis de energia, sendo o fluxo de corrente reduzido. A condução residual ocorre por outros mecanismos.



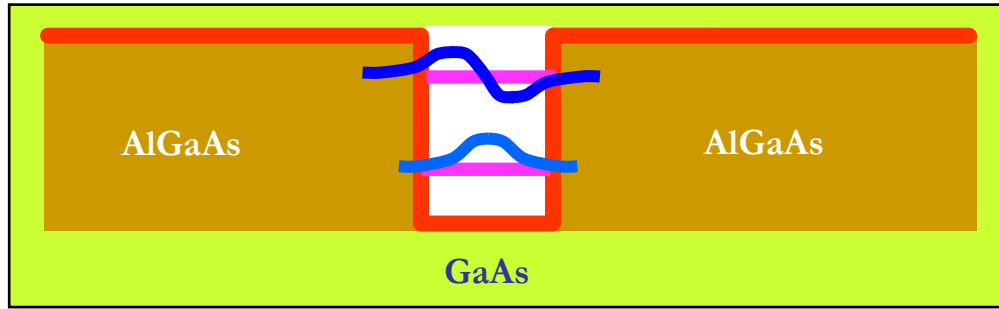
“Fora” da ressonância



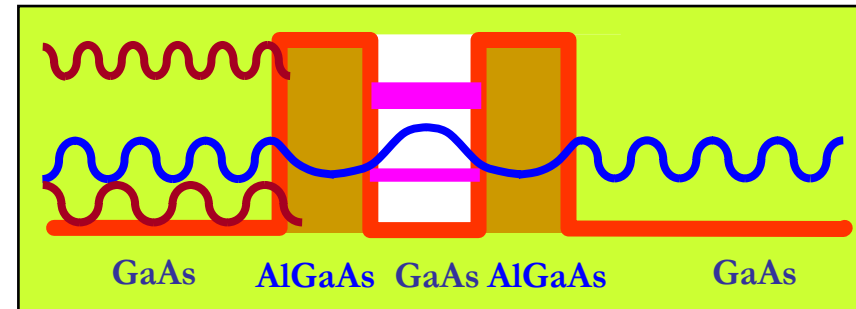
Poço quântico de dupla barreira de potencial

No que se segue consideram-se apenas os portadores na banda de condução

Poço quântico simples

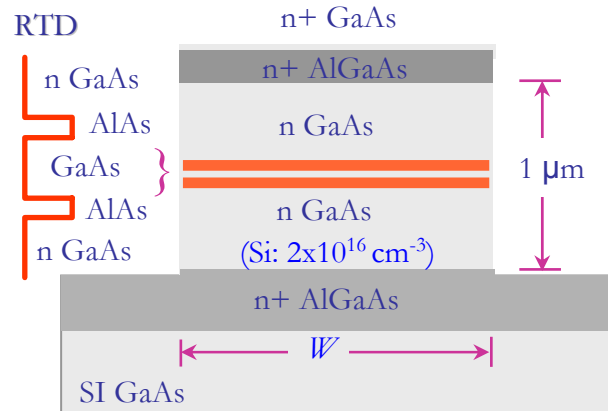


Poço quântico de dupla barreira de potencial



Guia de onda óptico com um RTD

RTD: "Resonant Tunnelling Diode"



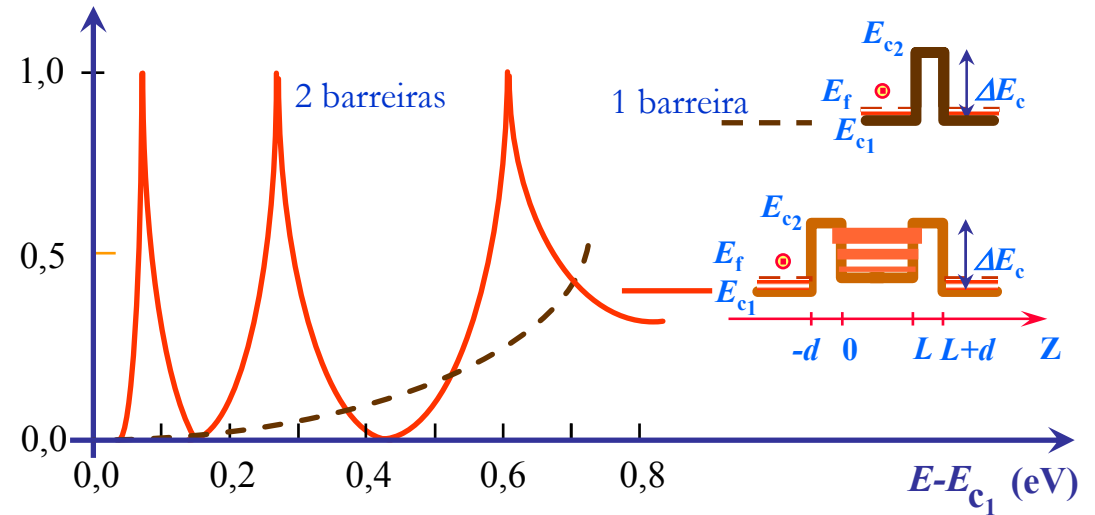
Os níveis de energia ressonantes são dados pela expressão:

$$\frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{2E - U_0} = \tan(\beta L) \tanh(k_b d)$$

Numa primeira aproximação: $E_n \approx \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_p L^2} \right] n^2$

A largura em termos de energia do nível é dada por: $\Delta E_n \approx E_n \exp\left[-2d\sqrt{\frac{2m_b(U_0 - E_n)}{\hbar^2}}\right]$

Probabilidade transmissão do electrão



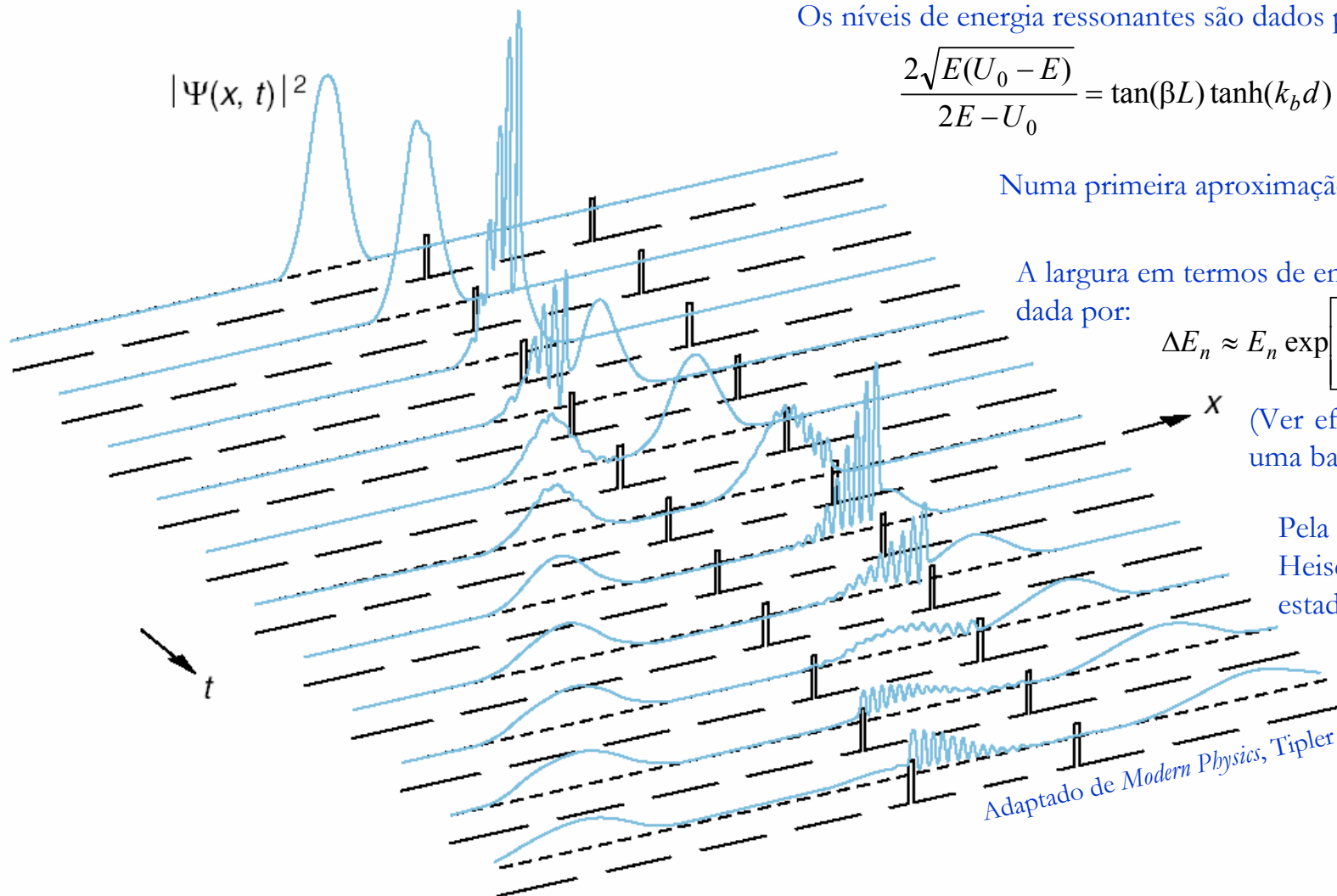
($d=1,4 \text{ nm}$, $L=7,0 \text{ nm}$, $U_0=\Delta E_c=1,0 \text{ eV}$)

Para mais detalhes ver:

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/PHD-JMLF.pdf>,
3º capítulo.

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

Evolução da função de onda num poço quântico de dupla barreira de potencial



Os níveis de energia ressonantes são dados pela expressão:

$$\frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{2E - U_0} = \tan(\beta L) \tanh(k_b d)$$

Numa primeira aproximação: $E_n \approx \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_p L^2} \right] n^2$

A largura em termos de energia dos níveis é dada por:

$$\Delta E_n \approx E_n \exp \left[-2d \sqrt{\frac{2m_b(U_0 - E_n)}{\hbar^2}} \right]$$

(Ver efeito de túnel através de uma barreira de potencial.)

Pela relação de incerteza de Heisenberg, o tempo de vida do estado n é estimado por:

$$\tau_n \approx \frac{\hbar}{\Delta E_n}$$

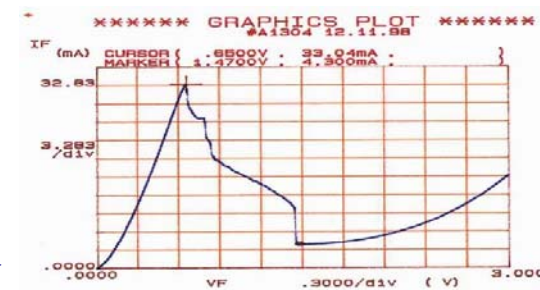
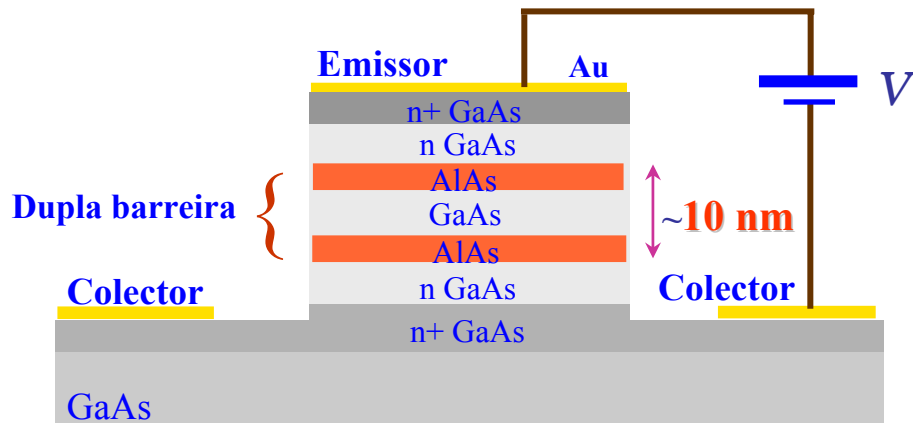
Adaptado de *Modern Physics*, Tipler

Ter presente que se a energia do electrão incidente for igual à energia de um dos estados permitidos do poço quântico, não há onda reflectida: efeito de túnel ressonante. Exemplos clássicos dos *efeitos de túnel*: efeito de Fabry-Perot (óptica), reflexão frustrada (óptica), acopladores direccionais em óptica integrada (óptica); ondas evanescentes.

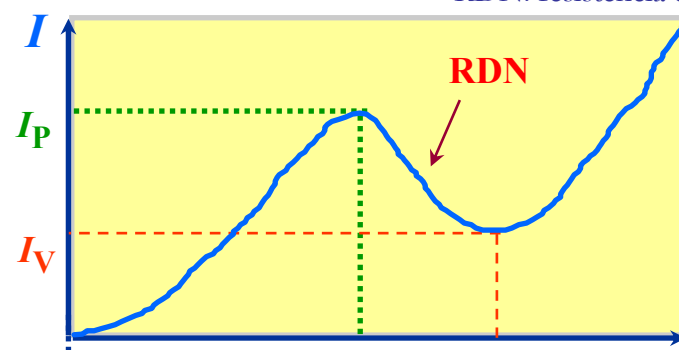
Para mais detalhes ver: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/PHD-JMLF.pdf>, 3º capítulo.

Díodo de efeito de túnel ressonante

RTD: “Resonant Tunnelling Diode”

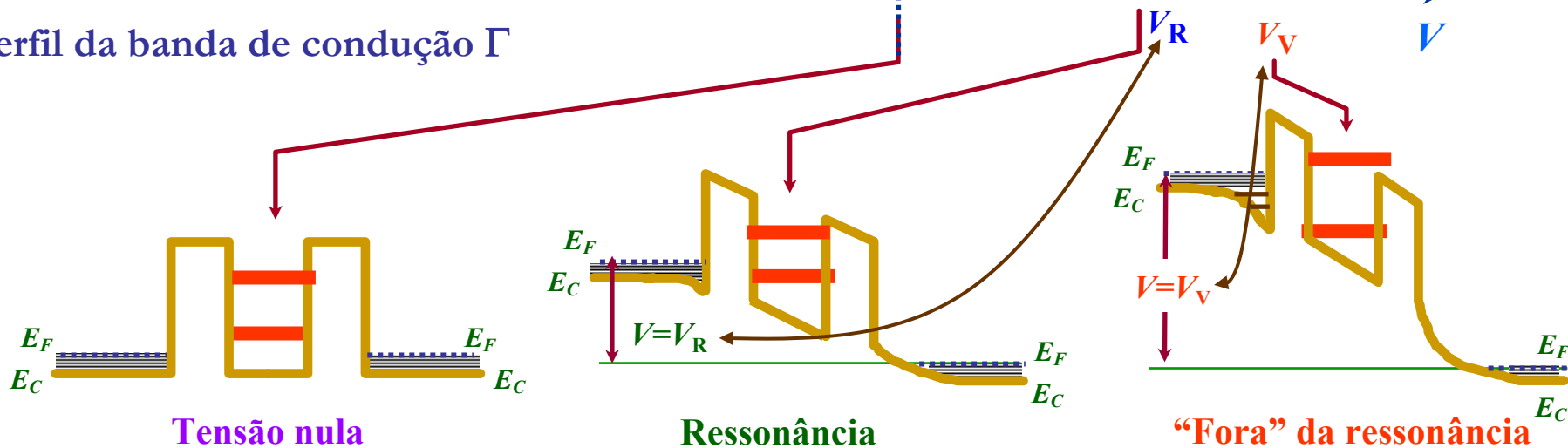


Característica I-V



RDN: resistência diferencial negativa

Perfil da banda de condução Γ



$V = V_R$: tensão de ressonância

RDN: resistência diferencial negativa

Mecanismos de transporte de carga num RTD de dupla barreira

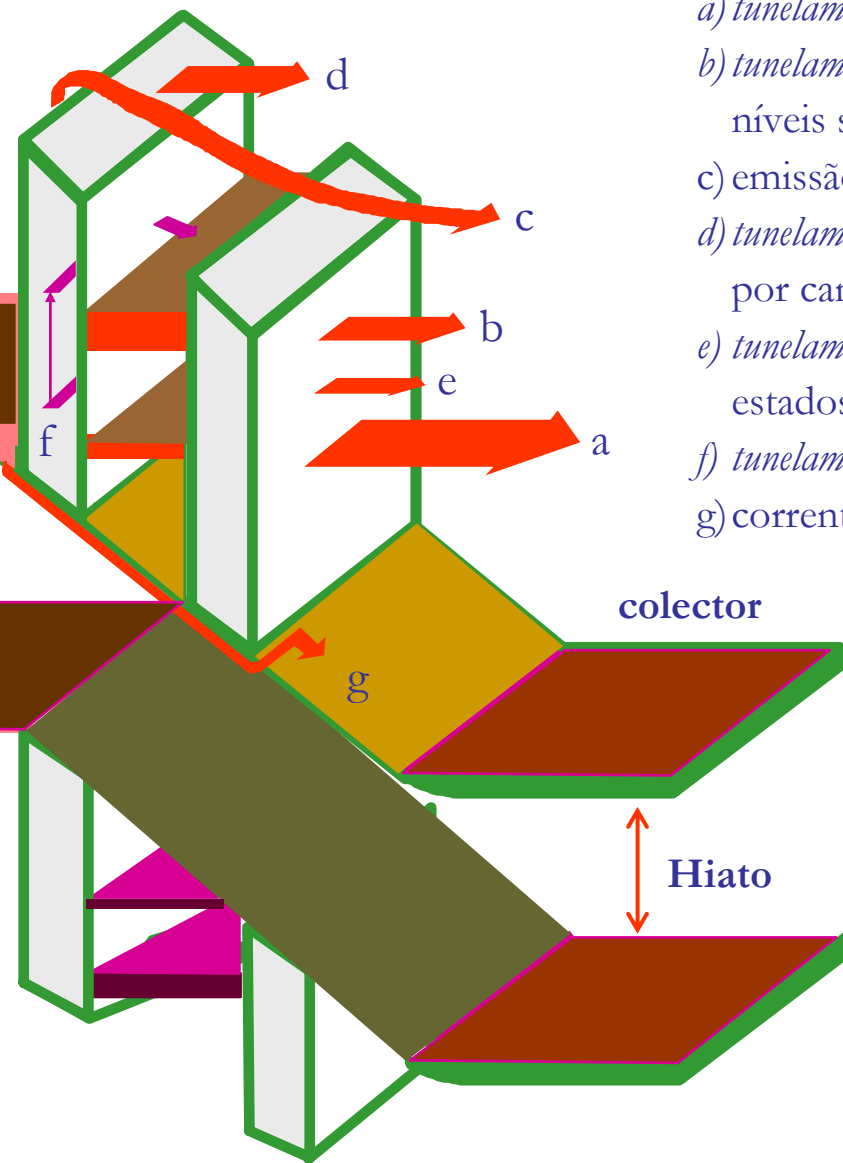
RTD: “Resonant Tunnelling Diode”

Espectro energético dos electrões

Banda de condução



emissor



colector

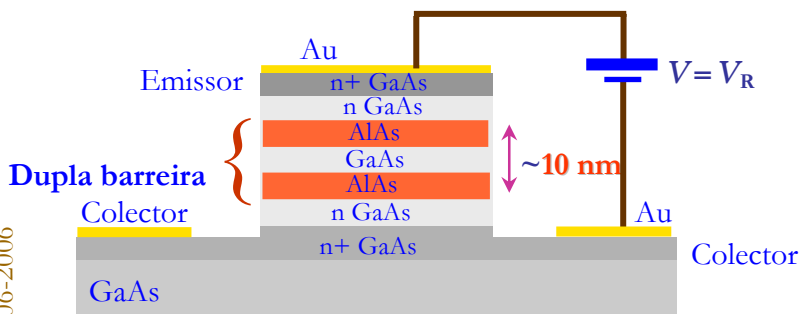
Banda de condução

Hiato

Banda de valência

- a) tunelamento ressonante;
- b) tunelamento através de níveis superiores;
- c) emissão termiônica;
- d) tunelamento “assistido” por campo eléctrico;
- e) tunelamento através de estados evanescentes;
- f) tunelamento inelástico;
- g) correntes de fuga.

Este esquema representa/aplica-se a estruturas unipolares: estruturas onde a corrente é devida apenas a um tipo de portador de carga – neste caso electrões (a dopagem é do tipo n).



$V = V_R$: tensão de ressonância

Para mais detalhes ver: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/PHD-JMLF.pdf>, 3º capítulo.

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

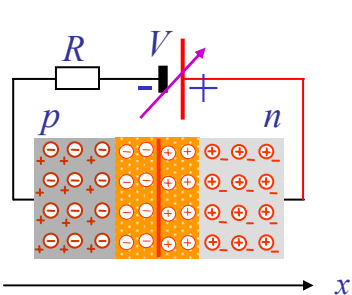
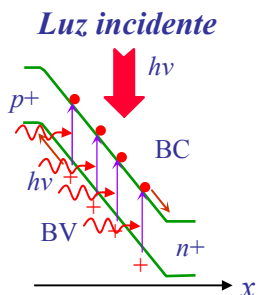
Exemplos de dispositivos baseados em poços quânticos

Foto-díodo

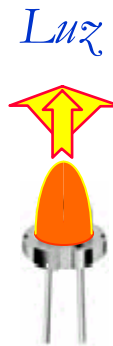
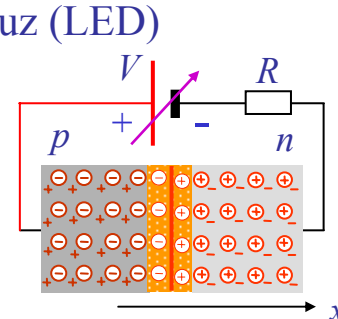
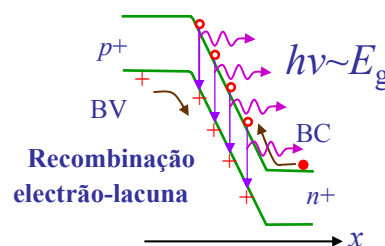
BV: banda de valência

BC: banda de Condução

Formação de pares electrão-lacuna

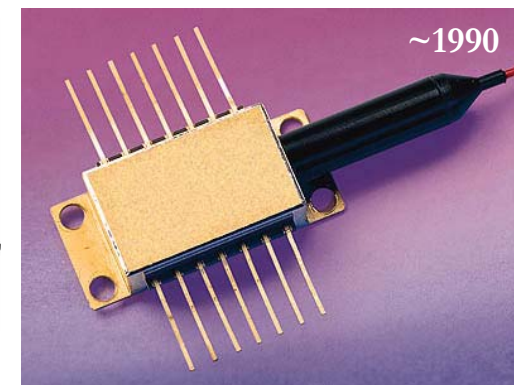
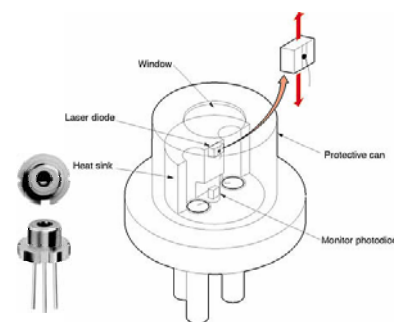
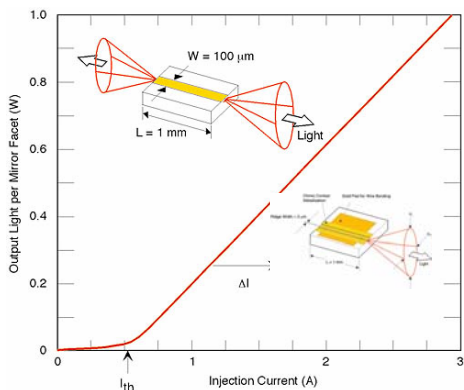
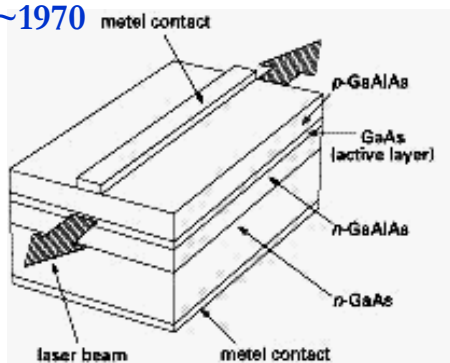


Díodo Emissor de Luz (LED)



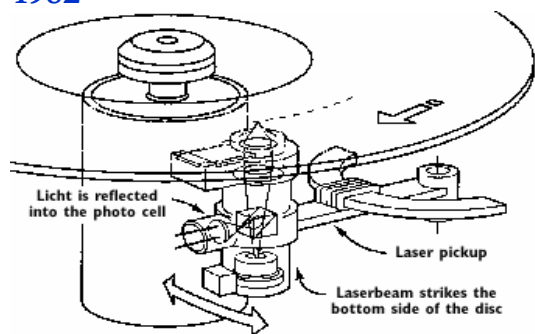
Díodo Laser

~1970

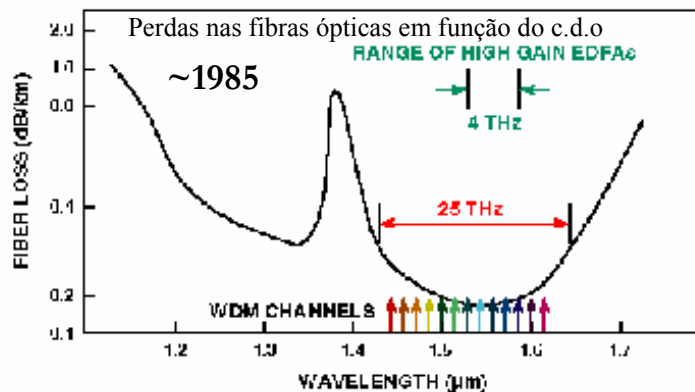


Aplicações em Optoelectrónica

Díodos Laser para leitores de CD 1982

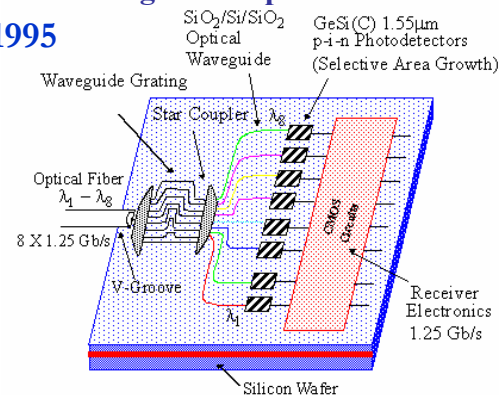


Díodos Laser para Telecomunicações por fibra Óptica



Circuitos Integrados Optoelectrónicos

~1995



Electroluminescência, absorção, emissão espontânea e emissão Estimulada

- A concentração de portadores também pode ser alterada, fazendo incidir no material radiação electromagnética e/ou variando a temperatura do material. A radiação incidente altera a condutividade eléctrica do material, pois os fótons absorvidos geram pares electrão-lacuna. O processo inverso, **recombinação radiativa**, em que electrão e lacuna se *aniquilam*, dando origem a um fóton, tem como efeito a diminuição do número de portadores de carga livres. Contudo, nem todas as recombinações electrão-lacuna são radiativas, isto é, dão origem à emissão de luz. As **recombinações não-radiativas** traduzem-se, por exemplo, numa variação da temperatura do cristal devido à geração/aniquilação de modos de vibração da rede cristalina (**fonões**).
- O **fonão** corresponde ao *quantum* de energia térmica da rede cristalina. As alterações da condutividade podem ser *monitoradas* através de eléctrodos ligados à amostra, detectando a variação da resistência do material: ambos os fenómenos de recombinação podem ser empregues em dispositivos electrónicos ou optoelectrónicos, como, por exemplo, detectores ópticos ou térmicos.
- Designa-se genericamente por **luminescência** a emissão de luz por um corpo, motivada por qualquer causa que não seja a elevação de temperatura. Há várias *formas* de luminescência, dependendo da fonte de excitação: electroluminescência, fotoluminescência, luminescência catódica, fluorescência, fosforescência. **Electroluminescência: emissão de luz por certas substâncias quando sob a acção de um campo eléctrico.**

Processos de Absorção, de Emissão Espontânea e de Emissão Estimulada em Semicondutores



Emissão espontânea: fenómeno de recombinação radiativa com características aleatórias, i.e., a direcção e a fase dos fótons gerados é incoerente (**díodos emissores de luz, “Light Emitting Diodes”, LEDs**).

Emissão estimulada: fenómeno de recombinação radiativa induzido pela densidade de potência luminosa de c.d.o. $\lambda \sim hc/E_g$ existente num dado ponto do cristal, num processo em que cada fóton incidente dá origem a um segundo fóton, sem que o primeiro seja absorvido ou as suas propriedades alteradas, resultando em **amplificação da radiação incidente (lasers, díodos lasers, amplificadores ópticos)**.

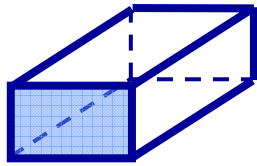
Num laser, a radiação *excitadora* e a radiação produzida por emissão estimulada têm:

- a mesma energia (i.e., o mesmo comprimento de onda);
- a mesma direcção de propagação;
- a mesma fase;
- e a mesma polarização (os campos eléctricos dos dois fótons oscilam no mesmo plano).

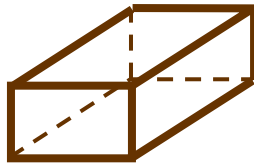
Porque a radiação *excitadora* e a estimulada têm as mesmas características, a radiação produzida diz-se **coerente**.

Múltiplos “poços” de potencial (“Multiple Quantum Wells”, MQWs)

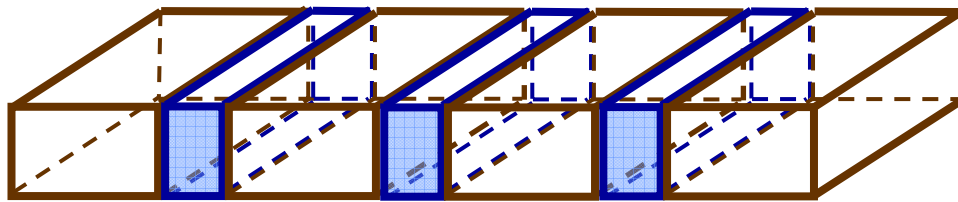
Semicondutor A



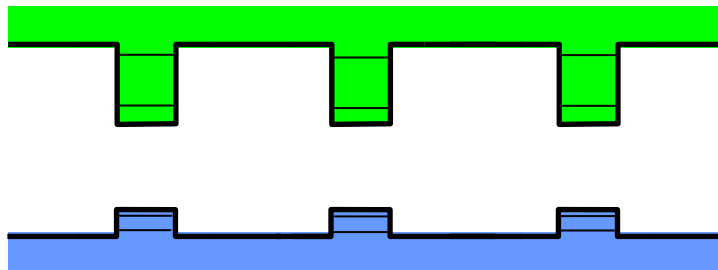
Semicondutor B



Heteroestrutura semicondutora de MQW

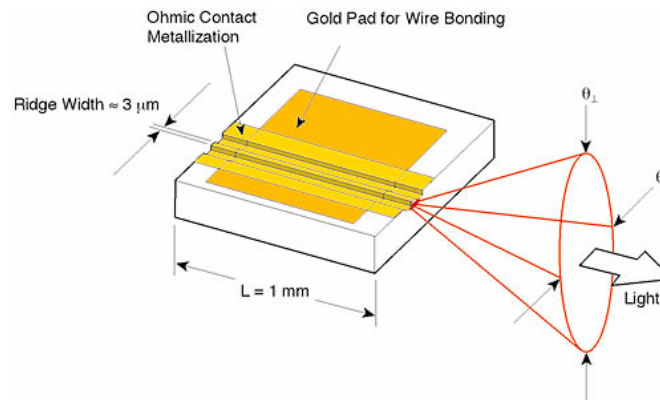


Perfil das bandas em estruturas com múltiplos poços quânticos

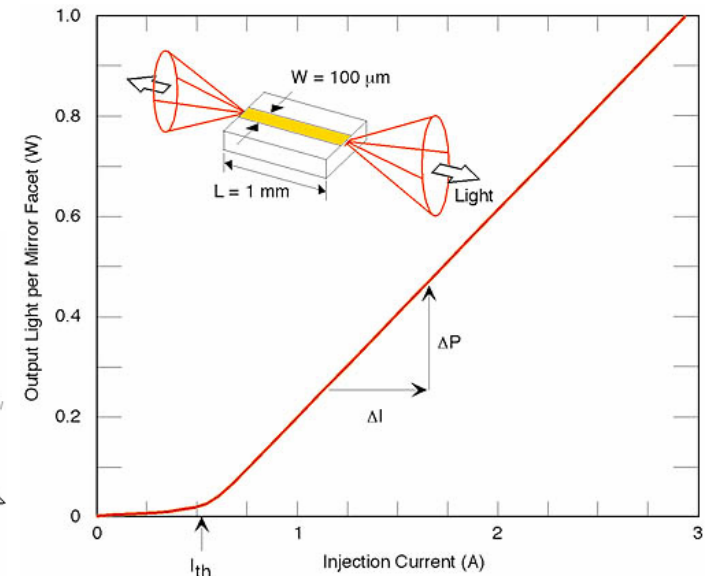
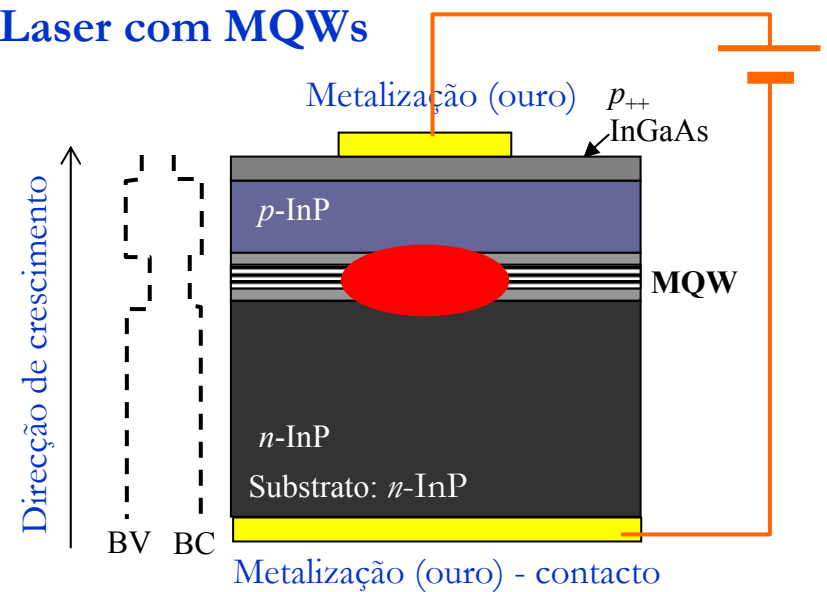


Estrutura “crescida” átomo a átomo usando, por exemplo, a técnica MBE (Molecular Beam Epitaxy).

Esta estrutura é o bloco essencial de muitos dispositivos optoelectrónicos (lasers, moduladores, detectores, etc).



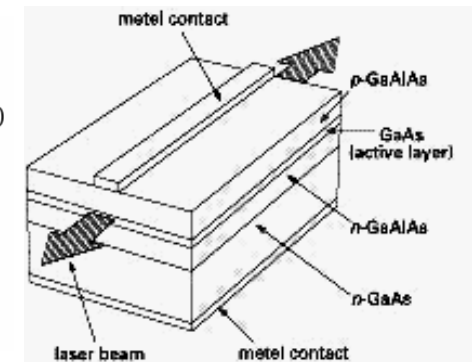
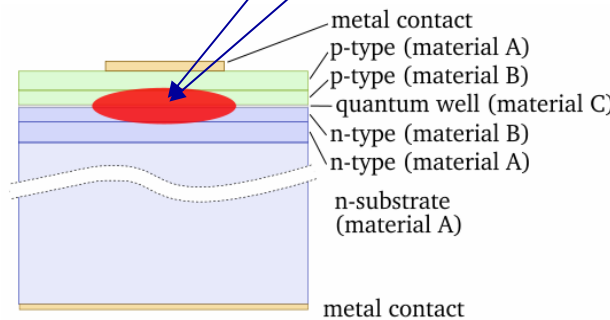
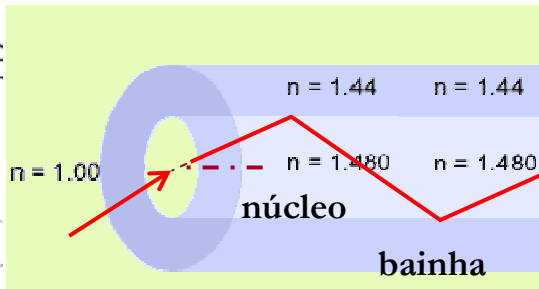
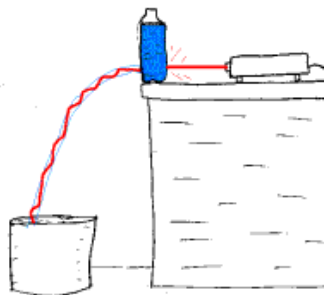
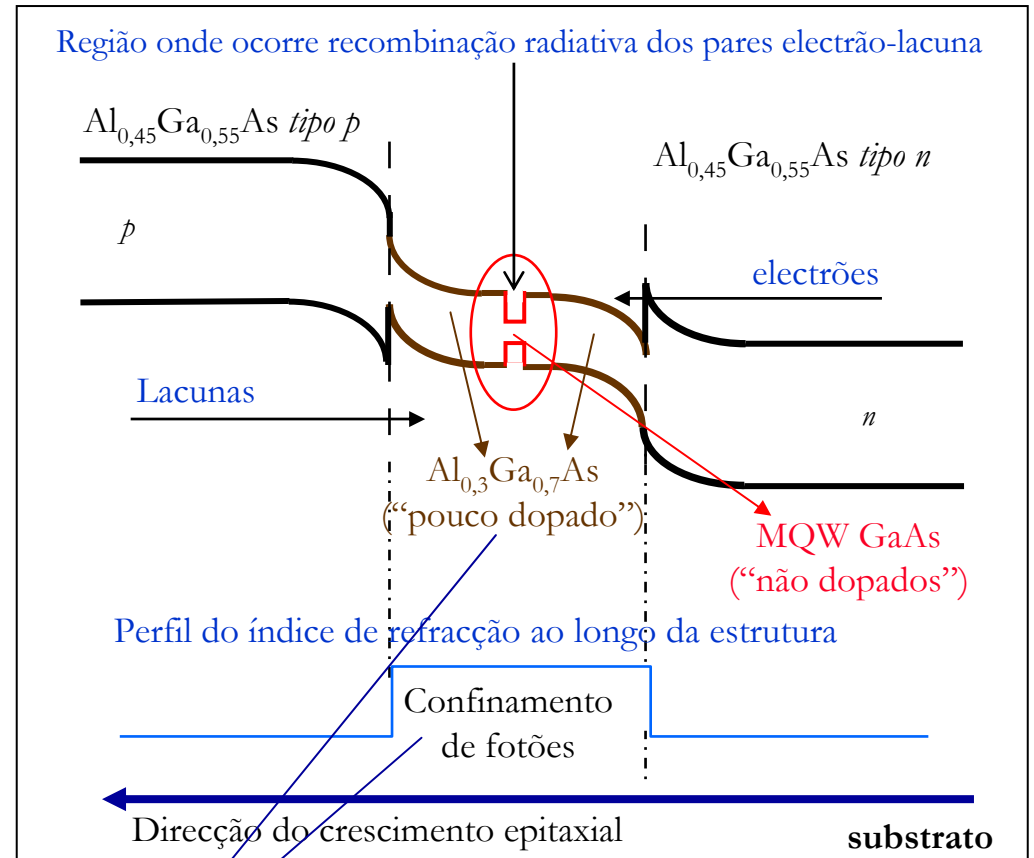
Laser com MQWs



Estrutura básica de um laser polarizado

- Heterojunção $p-n$:
 - Confinamento de portadores (poço quântico) e confinamento óptico através do perfil de índice de refração - guia de onda óptico)
- Re-alimentação (rever laser de hélio-néon):
 - *Espelhos* - Faces transversais do cristal clivadas
 - Reflexão total interna

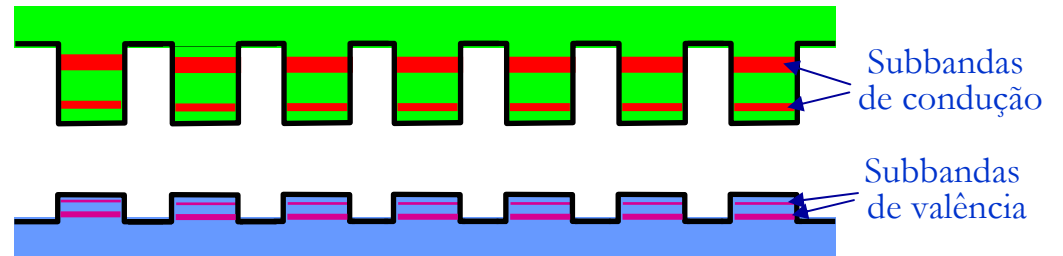
Nota: em geral, o índice de refração de um semiconductor, para um dado comprimento de onda, diminui com o aumento do hiato da banda proibida. A radiação electromagnética tem tendência a propagar-se nas regiões de maior índice de refração – ver, por exemplo, o funcionamento de uma fibra óptica. (por exemplo: *Óptica*, E. Hecht; F.C. Gulbenkian).



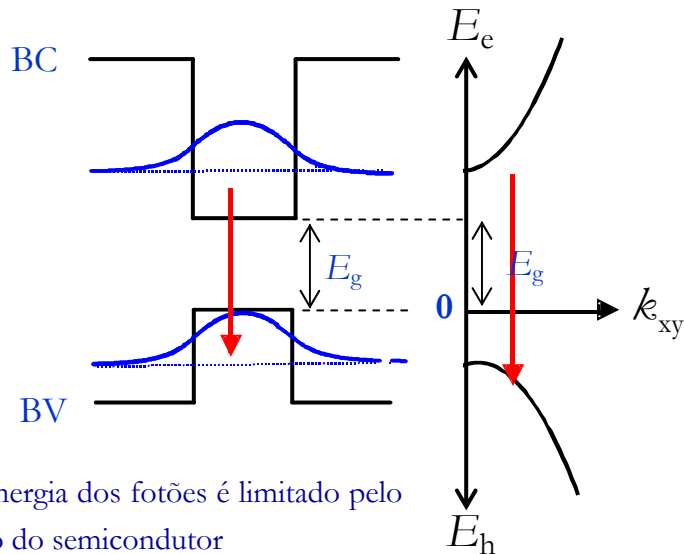
Transições inter-bandas e inter-subbandas

A operação dos dispositivos semicondutores, em que é baseada muita da tecnologia moderna, envolve tipicamente alguma forma de resposta das propriedades materiais a uma perturbação externa, que são, geralmente, campo estáticos ou campos electromagnéticos. O desempenho dos dispositivos, contendo homo-junções, hetero-junções, barreiras de potencial, poços quânticos, “super-redes” (“superlattice”), contactos metal-semicondutor, etc., depende da forma das bandas de energia, da concentração de portadores, da dopagem, dos mecanismos de transporte de corrente eléctrica, bem como os portadores de carga respondem a estes estímulos externos. No que se segue os fenómenos físicos em que se baseiam os dispositivos electrónicos e optoelectrónicos, a interacção da radiação com a matéria e algumas das respectivas aplicações são analisados como exemplos de aplicação.

“Super-rede” de poços quânticos (“super-lattices”)

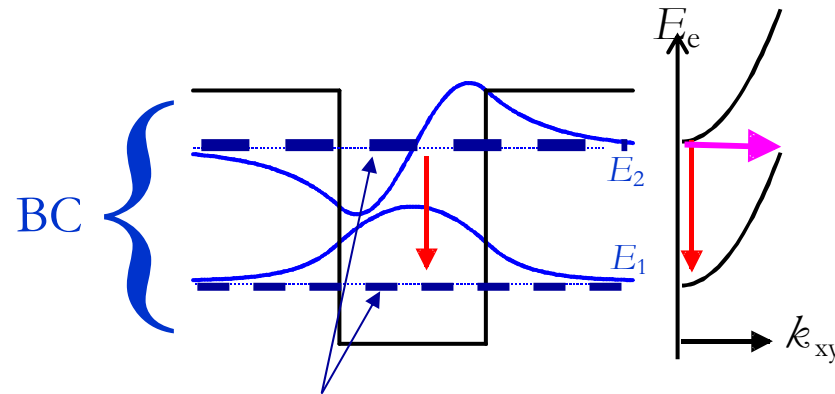


Inter-bandas



- A energia dos fótons é limitado pelo hiato do semicondutor
- Tempos de vida da ordem de ns
- Aplicações: lasers semicondutores *mais comuns.*

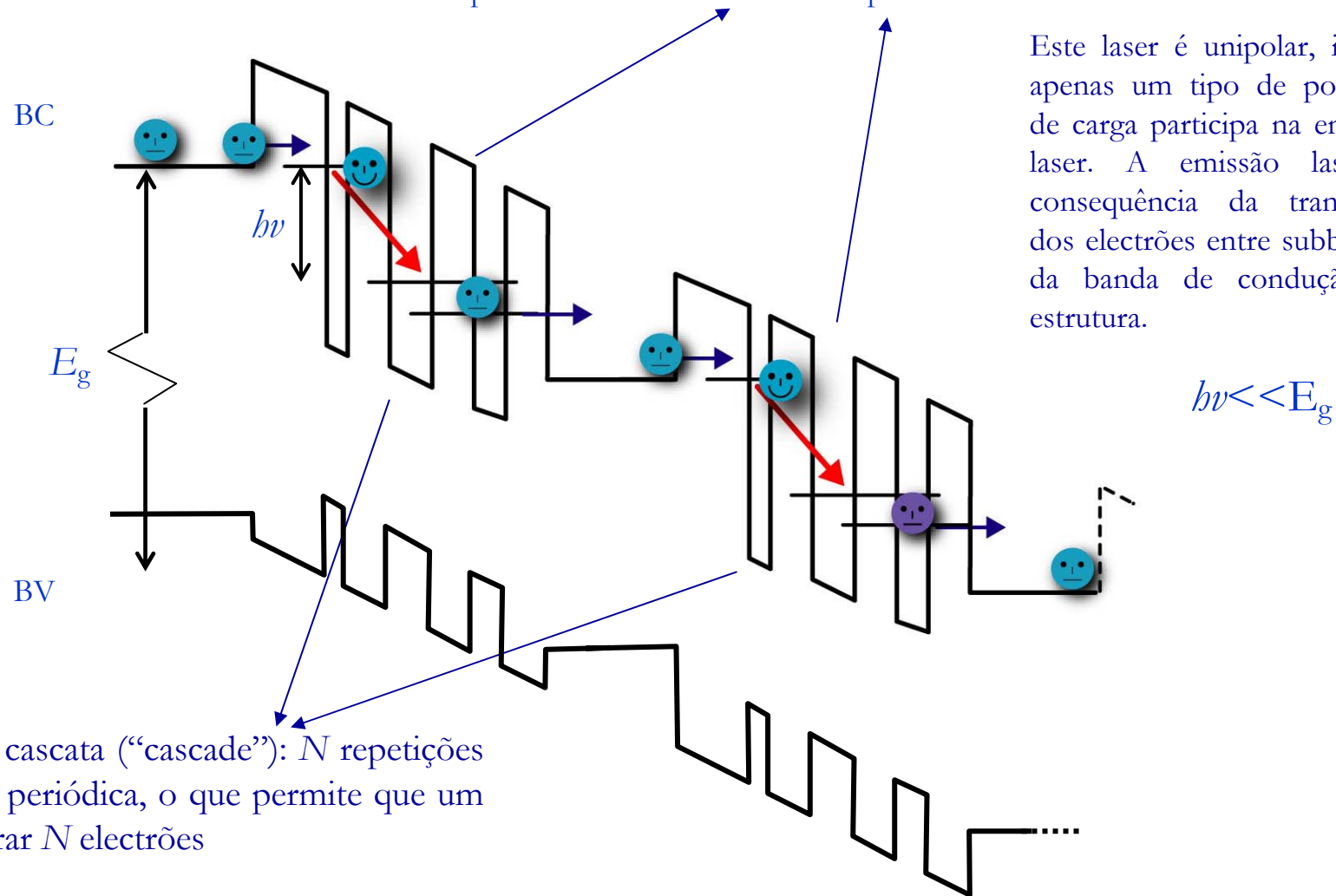
Inter-subbanda



- Flexibilidade na “escolha” da função de onda e dos níveis de energia
- Tempos de vida curtos (~1 ps)
- Aplicações: lasers para o infravermelho médio (4 μm a 20 μm).

Laser unipolar: Quantum Cascade Laser (QCL)

- Neste tipo de laser a emissão radiativa resulta de transições entre níveis pertencentes à banda de condução.
- Com esta estrutura de múltiplos poços quânticos é possível fabricar lasers com comprimentos de onda de emissão entre $\sim 4 \mu\text{m}$ e $\sim 20 \mu\text{m}$ (ter presente que a energia da emissão laser $h\nu$ é muito menor que E_g).
- O comprimento de onda de emissão é determinado pelas dimensões das camadas e pela altura das barreiras.



“Transições” em cascata (“cascade”): N repetições de uma estrutura periódica, o que permite que um electrão possa gerar N electrões

Oscilador harmónico quântico

Na Mecânica Newtoniana, um oscilador harmónico corresponde a uma partícula com massa m sob influencia de uma força conservativa com uma componentes do tipo $F=-Cx$, onde x represente o afastamento da partícula da sua posição de equilíbrio $x=0$. A energia potencial correspondente é $U=1/2Cx^2$. Quando a partícula é afastada da posição de equilíbrio, fica sujeita a um movimento sinusoidal com frequência angular $\omega=\sqrt{C/m}$. A análise do oscilador harmónico segundo a mecânica quântica permite compreender as vibrações em moléculas, a teoria quântica da capacidade calorífica dos sólidos, as vibrações atómicas nos sólidos cristalinos, e muitas outras situações. Antes de entrarmos em detalhes, procuremos prever os níveis de energia de um oscilador harmónico. Tendo em conta que a energia de um fóton de ω é $E=\hbar\omega$.

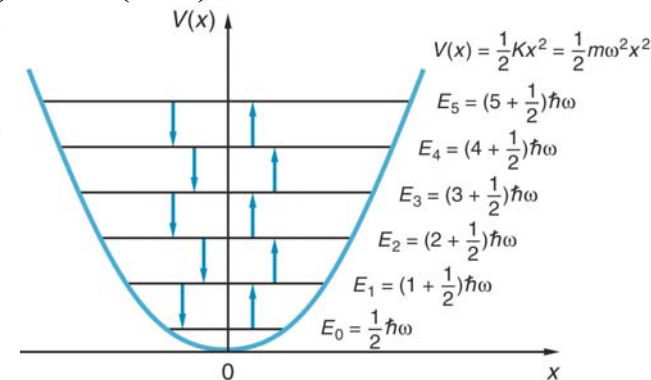
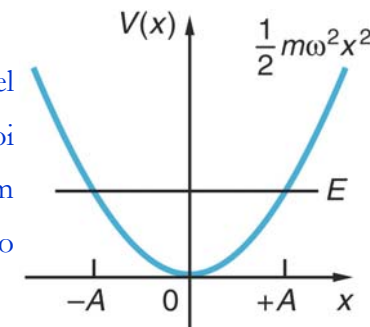
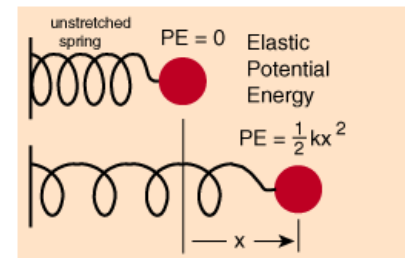
Uma vez que o oscilador harmónico tem uma frequência angular ω , pelo menos na Mecânica Newtoniana, é razoável esperar que os níveis de energia do oscilador harmónico segundo a Mecânica Quântica serão múltiplos de $\hbar\omega=\hbar\sqrt{C/m}$. Foi esta hipótese que levou Planck à derivação da lei de radiação do corpo negro. De facto, a energia dos estados permitidos num oscilador harmónico é um múltiplo semi-inteiro de $\hbar\omega$. Vamos considerar a equação de Schrödinger numa dimensão. No caso do oscilador harmónicos substitui-se U por $U=1/2Cx^2$, obtendo-se:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}Cx^2\psi(x) = E\psi(x).$$

As soluções desta equação são as funções de onda para os estados fisicamente possíveis do sistema. Esta equação pode ser resolvida numericamente, embora tenha solução analítica exacta. As soluções são bem conhecidas, e designam-se funções de Hermite. Cada função de Hermite corresponde ao produto de uma gaussiana por um polinómio de x . O estado correspondente à menor energia (estado fundamental) descrito por $\Psi_0(x)=B\exp[-m\omega x^2/2\hbar]$ (se tem dúvidas, determine a segunda derivada e substitua na equação de Schrödinger para o oscilador harmónico). A energia correspondente é $E_0=1/2\hbar\omega=1/2\hbar\sqrt{C/m}$. Uma análise adicional da equação de Schrödinger para o oscilador harmónico mostra que esta pode ser escrita como:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{1}{2}Cx^2 - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{C}{m}} \right] \psi(x).$$

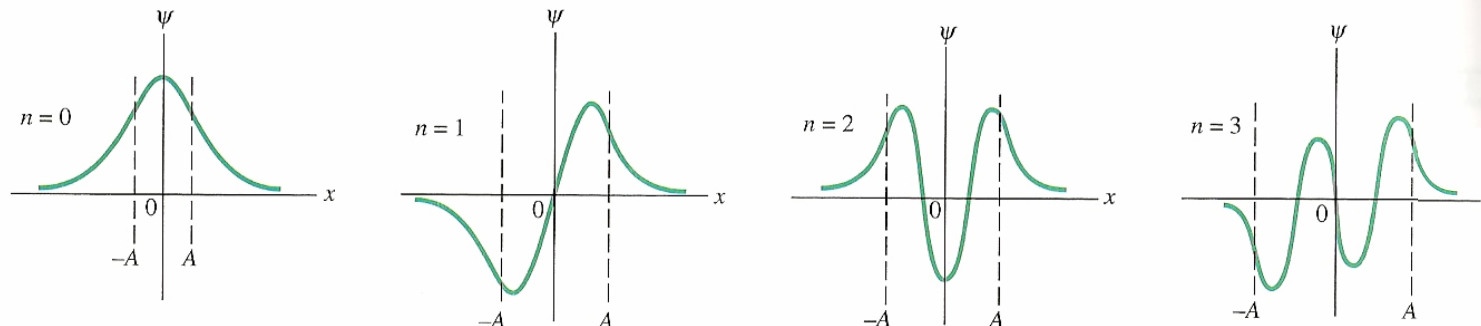
Os valores próprios da energia são dados por : $E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{C}{m}} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$, com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

- A grandeza n corresponde ao número quântico que identifica o estado e o nível de energia. Níveis de energia adjacentes estão separados pela quantidade $\hbar\omega=\hbar\omega$, como Planck assumiu.
- Há uma infinidade de níveis de energia (ter presente que se trata de um poço de potencial infinito – à medida que $|x|$ cresce, $U(x)$ aumenta, não estando limitado.)
- As equação de onda dos 1º e 2º estados excitados são $\psi_1(x)=D\sqrt{(m\omega/\hbar)}x\exp[-m\omega x^2/2\hbar]$ e $\psi_2(x)=F(1-2m\omega x^2/\hbar)\exp[-m\omega x^2/2\hbar]$, respectivamente.
- No oscilador harmónico só podem ocorrer transições em que $\Delta n=\pm 1$, i.e., os fótons/fonões emitidos/absorvidos só podem ter energia $E=\hbar\omega$.



Funções de onda do oscilador harmónico quântico (OHQ)

As funções de onda dos primeiros três estados permitidos do oscilador harmónico. A amplitude A do oscilador newtoniano com a mesma energia total é também indicada para cada estado: $\frac{1}{2}CA^2 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. Ter em atenção que o mesmo símbolo algébrico representa quantidades físicas diferentes.

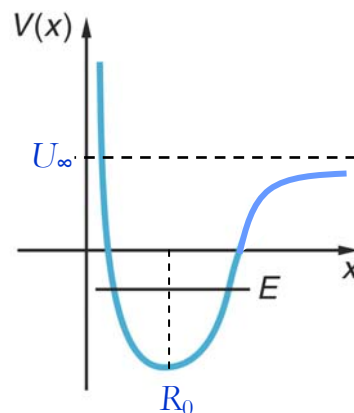


Na figura ao lado são representadas as distribuições de probabilidade $|\Psi|^2$ para vários estados. Cada gráfico também mostra a distribuição de probabilidade determinada segundo o modelo newtoniano, no qual a probabilidade de encontrar a partícula em torno de um dado ponto escolhido aleatoriamente é inversamente proporcional à velocidade da partícula nesse ponto. De acordo com a descrição da mecânica clássica, a energia mínima do oscilador harmónico é zero, correspondendo a uma partícula em repouso na posição de equilíbrio.

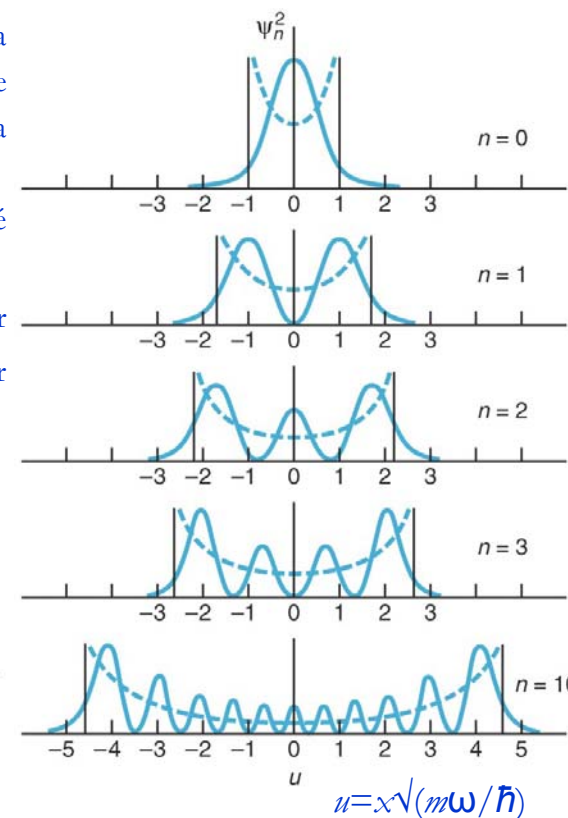
Uma propriedade das funções de onda soluções da equação de Schrödinger para o oscilador harmónico é traduzida matematicamente como: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x \psi_m dx = 0$, a menos que $n = m \pm 1$. Esta propriedade que coloca uma condição às transições que podem ocorrer entre estados permitidos designa-se **regra de selecção**. O oscilador só pode emitir ou absorver fótons com energia $\hbar\omega$, i.e., n só pode aumentar ou diminuir de uma unidade (ver figura da página anterior).

Na descrição quântica, o valor mínimo da energia é $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Não existe uma solução da equação de Schrödinger satisfazendo as condições fronteira do sistema que resulte em $E=0$. De facto um tal estado não pode existir, de forma semelhante ao que acontece com os poços quânticos estudados atrás. Porquê?

A Figura ao lado mostra um poço de potencial típico representativo das forças inter-atómicas numa molécula. Em torno da separação atómica de equilíbrio, o potencial de interação pode ser considerado aproximadamente como parabólico, isto é, as vibrações podem ser consideradas harmónicas, com a energia dada por $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

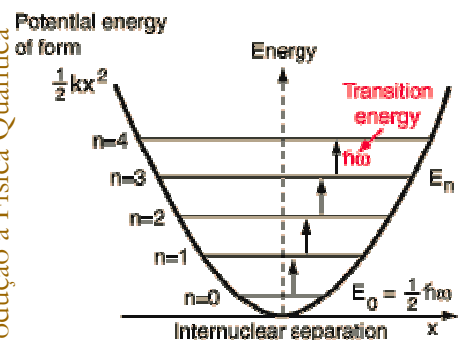


- A função de onda de cada estado penetra um pouco na região proibida classicamente ($|x| > A$).
- O número de máximos e de mínimos finitos para cada função é $n+1$, mais 1 que o número quântico.

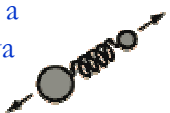


Oscilador harmónico quântico e a energia do ponto zero

IFQR 2005-2006: Introdução à Física Quântica



Considera-se a massa efectiva da molécula

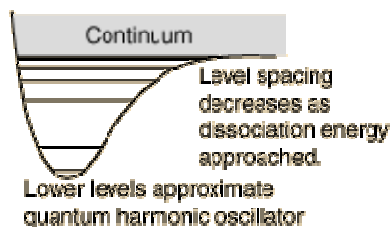


$x=0$ represents the equilibrium separation between the nuclei.

A frequência correspondente à menor energia vibracional de transição de moléculas diatómicas pode ser obtida pela diferença de energia entre níveis adjacentes do OHQ, e assim determinar a constante de força para pequenas oscilações:

- HF: $\nu=87,2$ THz, $C=970$ N/m;
- HCl: $\nu=86,6$ THz, $C=480$ N/m;
- HBr: $\nu=76,8$ THz, $C=410$ N/m;
- CO: $\nu=64,2$ THz, $C=1860$ N/m;
- NO: $\nu=56,3$ THz, $C=1530$ N/m.

Energy eigenvalues may be discrete or continuous.



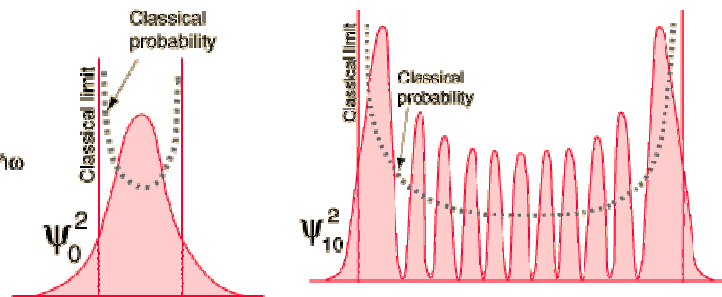
As soluções da equação de Schrödinger para o oscilador harmónico são da forma:

$$\Psi_n(y) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}$$

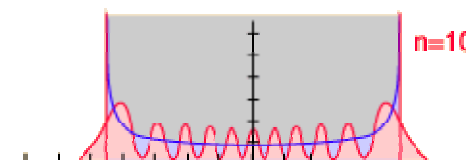
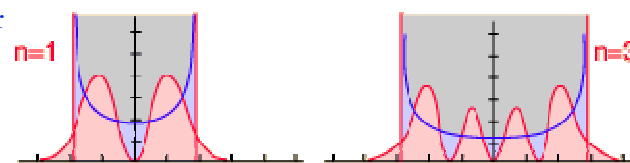
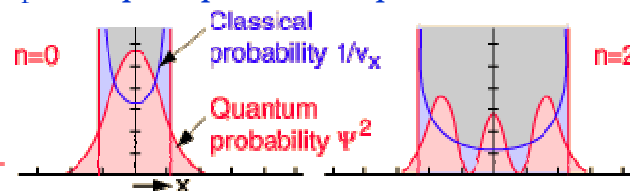
$$y = \sqrt{\alpha} x \quad \text{where} \quad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

Polinómios de Hermite $H_n(y)$

n	$H_n(y)$	E_n
0	1	$\frac{1}{2} \hbar \omega$
1	$2y$	$\frac{3}{2} \hbar \omega$
2	$4y^2 - 2$	$\frac{5}{2} \hbar \omega$
3	$8y^3 - 12y$	$\frac{7}{2} \hbar \omega$
4	$16y^4 - 48y^2 + 12$	$\frac{9}{2} \hbar \omega$
5	$32y^5 - 160y^3 + 120y$	$\frac{11}{2} \hbar \omega$



À medida que n aumenta, o resultado da Mecânica Quântica tende para o resultado clássico, como prevê o **princípio da correspondência**.



O princípio de incerteza de Heisenberg impõe um mínimo de energia, diferente de zero, para o OHQ: $E = \frac{1}{2} \hbar \omega$. Para se verificar que assim é, considera-se Δx e Δp , as incertezas na posição e no momento da partícula, respectivamente. Assim, a energia do OHQ deve ser pelo menos $E = (\Delta p)^2 / 2m + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2$, assumindo o limite inferior da relação do princípio de incerteza: $\Delta x \Delta p = \frac{1}{2} \hbar$. Tendo em conta o exposto verifica-se que o mínimo de energia é $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$.

Este resultado é de extrema importância em muito sistemas físicos: mesmo no zero absoluto a energia de vibração dos componentes de um dado sistema (como, por exemplo, átomos num sólido cristalino ou em moléculas poliatómicas). A menor energia do sistema (energia do ponto zero) é suficiente para impedir, por exemplo, que o hélio-4 passe ao estado sólido à pressão a atmosférica, não interessa quão próxima de zero kelvin é a sua temperatura.

IFQR 2005-2006 DF-FCT-ULAG

José Figueiredo

06-06-2006

30-05-2006

Operadores criação e aniquilação

- Um modo do campo electromagnético *livre* é análogo ao oscilador harmónico, cujo Hamiltoniano é dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \text{ com } [\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$$

- Podem-se definir dois novos operadores, o operador aniquilação e o operador criação como:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) \text{ e } \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right), \text{ com } [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1,$$

- Pode-se escrever o Hamiltoniano dos sistema como:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \hat{a}^+ \hat{a} \right)$$

- Conhecida a função de onda de um dado estado com número quântico n do oscilador harmónico quântico, pode-se obter as funções de onda dos estados $n-1$ e $n+1$, fazendo actuar na função de onda Ψ_n os operadores destruição \hat{a} e criação \hat{a}^+ respectivamente:

$$\hat{a}^+ \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1},$$

$$\hat{a} \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}, \text{ com a condição } \hat{a} \Psi_0 = 0$$

- Os operadores destruição \hat{a} e criação \hat{a}^+ correspondem à aniquilação de um quantum de energia e à criação de um quantum de energia, respectivamente:

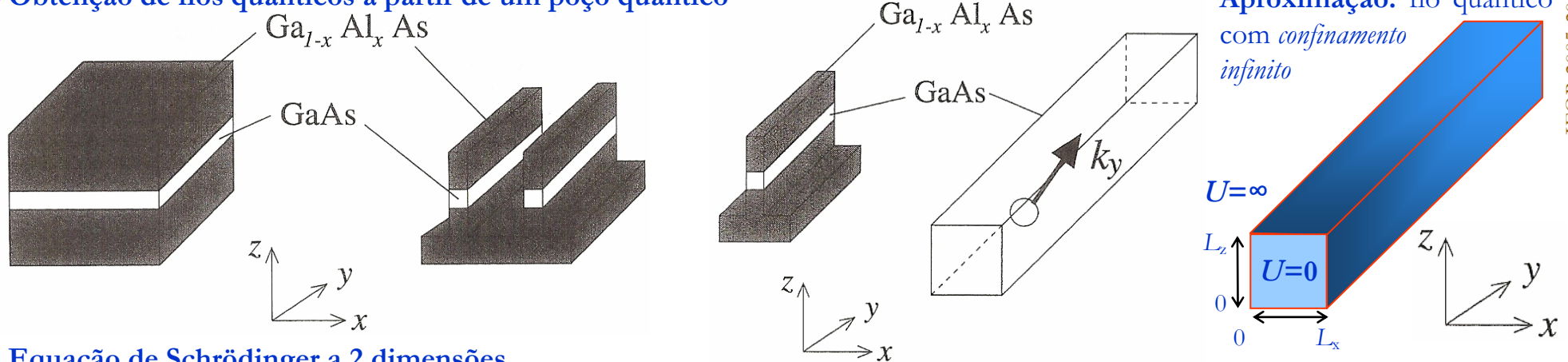
$$\hat{H}(\hat{a}^+ \Psi_n) = (E + \hbar\omega)(\hat{a}^+ \Psi_n),$$

- $$\hat{H}(\hat{a} \Psi_n) = (E - \hbar\omega)(\hat{a} \Psi_n)$$

Equações de Schrödinger 2D: fios quânticos

- Já vimos as consequências da redução da dimensionalidade numa estrutura em consequência do confinamento dos electrões (ou lacunas) numa fina camada semicondutora: a alteração radical do seu comportamento. Este princípio pode ser usado para reduzir ainda mais a dimensionalidade da vizinhança dos portadores de carga do poço quântico de bidimensional para uma o fio quântico unidimensional, e deste para o fio quântico (zero-dimensional). Aqui, o termo dimensionalidade refere-se ao número de graus de liberdade do momento dos portadores de carga na estrutura. Num fio quântico, os portadores de carga estão confinados em duas dimensões, ao invés do que acontece no poço quântico onde ocorre apenas confinamento numa direcção.
- Se D representar o número de graus de liberdade e C o número de direcções de confinamento tem-se $D+C=3$.

Obtenção de fios quânticos a partir de um poço quântico



Equação de Schrödinger a 2 dimensões

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad \text{ou} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Fazendo $U(x, y, z) = U(y) + U(x, z)$, e $\psi(x, y, z) = \psi(y)\psi(x, z)$, obtêm-se duas equações separadas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + U(y)\psi(y) = E_y \psi(y) \quad \text{e} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, z)}{\partial z^2} \right] + U(x, z)\psi(x, z) = E_{xz} \psi(x, z)$$

- Como o potencial segundo y é nulo, $U(y)=0$, a primeira equação é satisfeita por soluções do tipo onda plana $\exp(ik_y y)$, obtendo-se a relação de dispersão padrão $E_y = (\hbar k_y)^2 / 2m$. A 2ª equação corresponde à equação de Schrödinger para um potencial *confinante* a 2 D.

- Numa primeira aproximação considera-se um fio quântico com *confinamento infinito* (ver figura da direita): as soluções são do tipo:

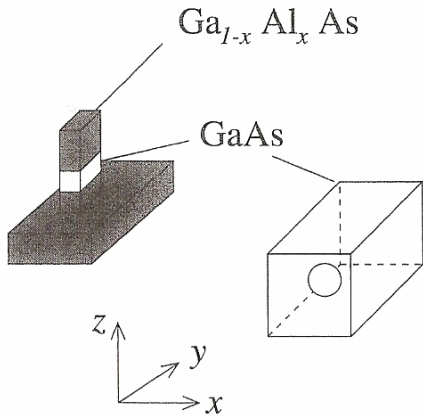
$$\psi(x, z) = \psi(x)\psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{\pi n_x x}{L_x}\right) \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L_z}\right), \quad \text{cuja energia de confinamento é: } E_{xz} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x} + \frac{n_z^2}{L_z} \right)$$

- Se o fio tivesse secção circular dever-se-ia usar coordenadas polares (de forma semelhante ao cálculo dos modos de propagação numa fibra óptica).

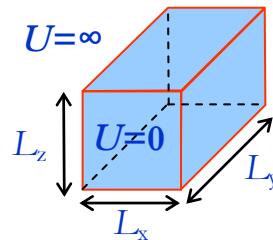
Equações de Schrödinger 3D: pontos quânticos

- No ponto (ou caixa) quântico, os portadores de carga estão confinados nas três dimensões espaciais, reduzindo a zero o número de graus de liberdade do momento.

Obtenção de pontos quânticos a partir de um fio quântico



Aproximação:
ponto quântico com
confinamento infinito



- Pontos quânticos cubóides, também designados caixas quânticas, pode ser considerados como uma simples generalização dos fios quânticos, nos quais ocorre também confinamento adicional segundo a direção y . Este confinamento adicional elimina o último grau de liberdade do momento da partícula, *localizando* a partícula em todas as direções. Como consequência, os níveis de energia permitidos não podem continuar a referir-se como subbandas, sendo agora designados como subníveis.
- Considere-se um potencial infinito separando o interior da caixa quântica do exterior (ver figura). A equação de Schrödinger no interior é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(x, y, z) = E_{xyz} \psi(x, y, z). \text{ Fazendo } \psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z), \text{ obtêm-se três equações separadas:}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E_x \psi(x) : E_x = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{2m L_x^2}; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(y) = E_y \psi(y) : E_y = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_y^2}{2m L_y^2}; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = E_z \psi(z) : E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_z^2}{2m L_z^2}; \quad E_{xyz} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

- O confinamento nas três direções dá origem a três números quânticos que permitem identificar cada estado.
- Pontos quânticos esféricos com confinamento infinito, e considerando apenas soluções com simetria esférica (estados tipo orbital “s”)**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + U(r) \psi(r) = E_r \psi(r) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \psi(r) + U(r) \psi(r) = E_r \psi(r)$$

Equação de Schrödinger a 3 dimensões

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Para problemas com simetria esférica (caso do átomo de H)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta, \phi) + U(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

Caixas quânticas (QD) de CdSe e de InP; nanopartículas de ouro

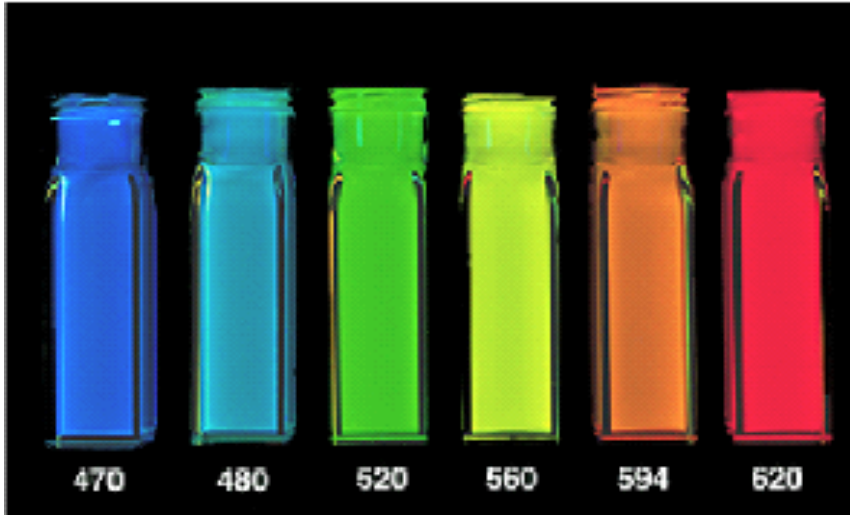
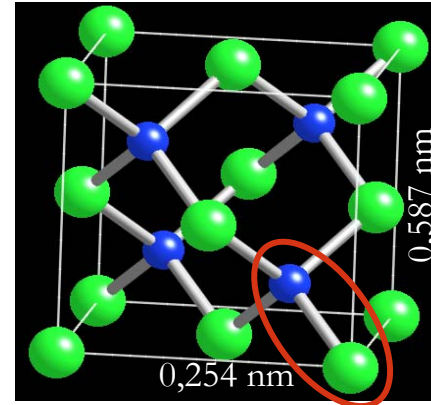
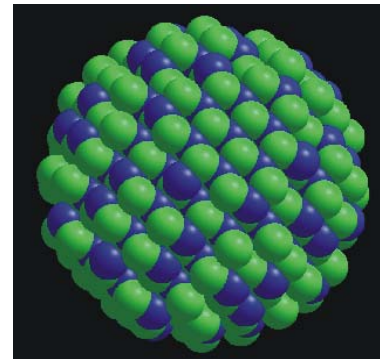


Foto: F. Fraenkel, MIT Grupo de M. Bawendi, MIT

Célula Unitária de InP



Existem 4 “moléculas” de InP por cubo: 5×10^{22} átomos/cm³ = 50 átomos/nm³.



← 3 nm →

Quantas “moléculas” de InP existem neste QD?

Ver aplicações em medicina de diferentes dispositivos quânticos em: <http://www.cancer.gov/cancertopics/understandingcancer/nanodevices>

Será o ouro sempre “amarelado”?

Gold Building Blocks

Atoms: colorless, 1 Å

Gold clusters: orange, nonmetallic, <1 nm

Gold nanoparticles: 3-30 nm, red, metallic, “transparent”

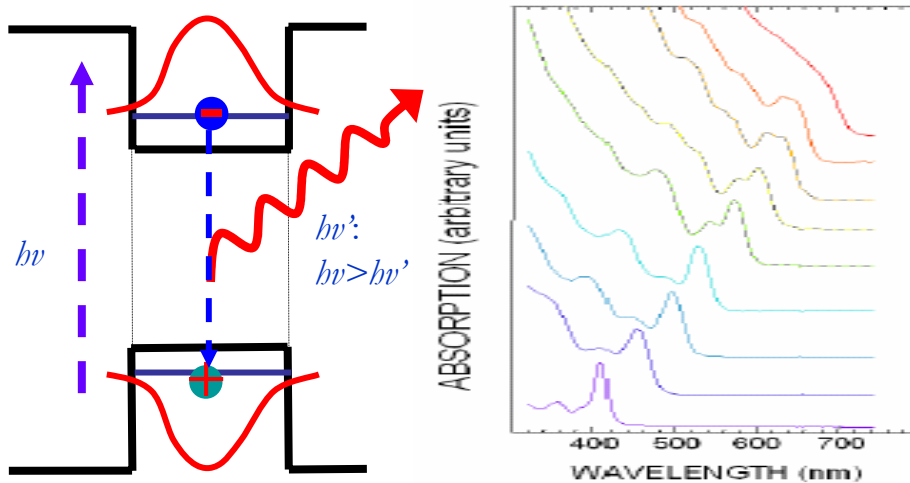
Gold particles: 30-500 nm metallic, turbid, crimson to blue

Bulk gold film



Figure 1. Gold building blocks, from the atomic to the mesoscopic, and their changing colors.

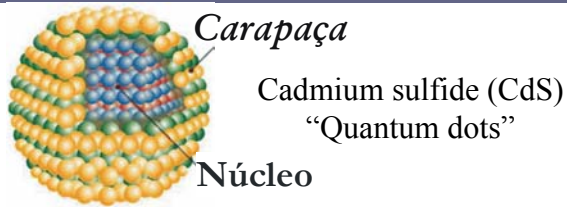
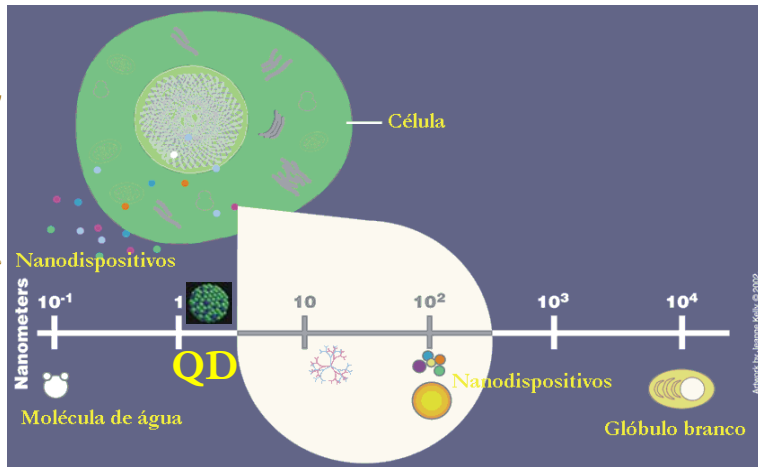
A cor do ouro depende do tamanho das partículas de ouro.



$$E_{xyz} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e^*} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right] + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_h^*} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

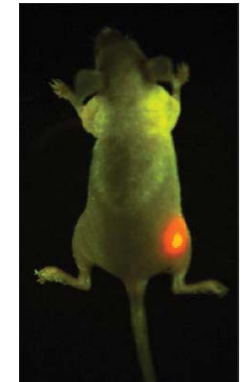
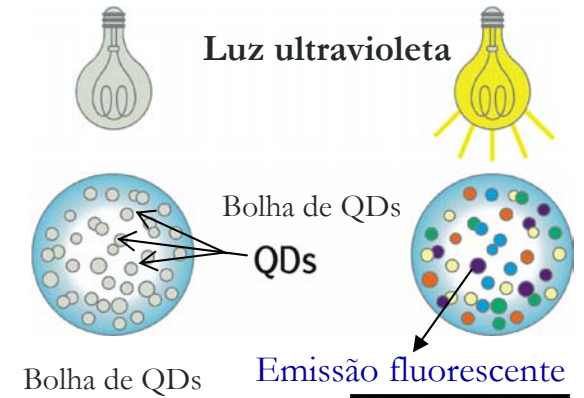
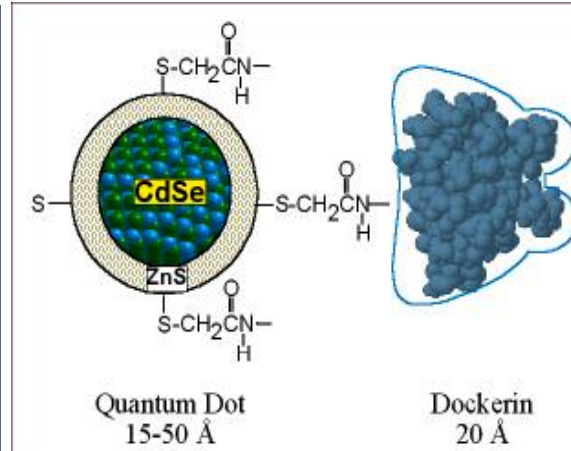
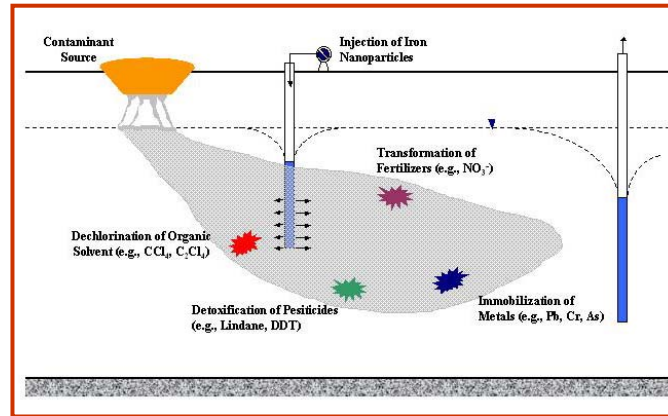
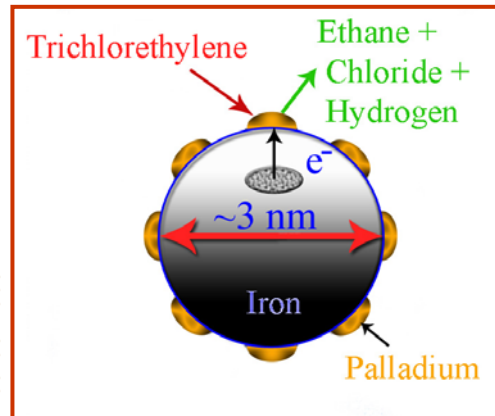
Aplicações de pontos quânticos (“quantum dots”, QD)

IFQR 2005-2006: Introdução à Física Quântica



- Alterando o tamanho, a forma, e a composição dos QDs, as propriedades espectroscópicas dos QDs alteram-se de forma dramática.

Nanopartícula de ferro como *despoluente* de água

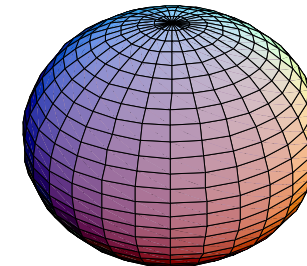


Bull's-eye. Red quantum dots injected into a live mouse mark the location of a tumor.

Ver aplicações em medicina dos diferentes nanodispositivos em:
<http://www.cancer.gov/cancertopics/understandingcancer/nanodevices>

É tudo uma questão de superfície:

Compare a área de uma esfera de ferro com 1 kg de massa com a área total do número de esferas de ferro de raio 1 nm cuja massa total perfaz 1 kg de Fe. (380 000 m².)



$$V = \frac{4\pi}{3} R^3$$

$$S = 4\pi R^2$$

$$\frac{S}{V} = \frac{3}{R}$$

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ensino.htm>

06-06-2006

30-05-2006

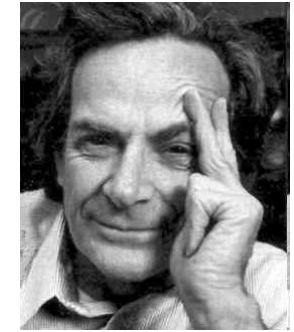
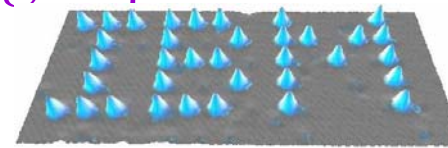
IFQR 2005-2006 DF-FCT-ULAG

José Figueiredo

Nanotecnologia: “a tecnologia quântica”

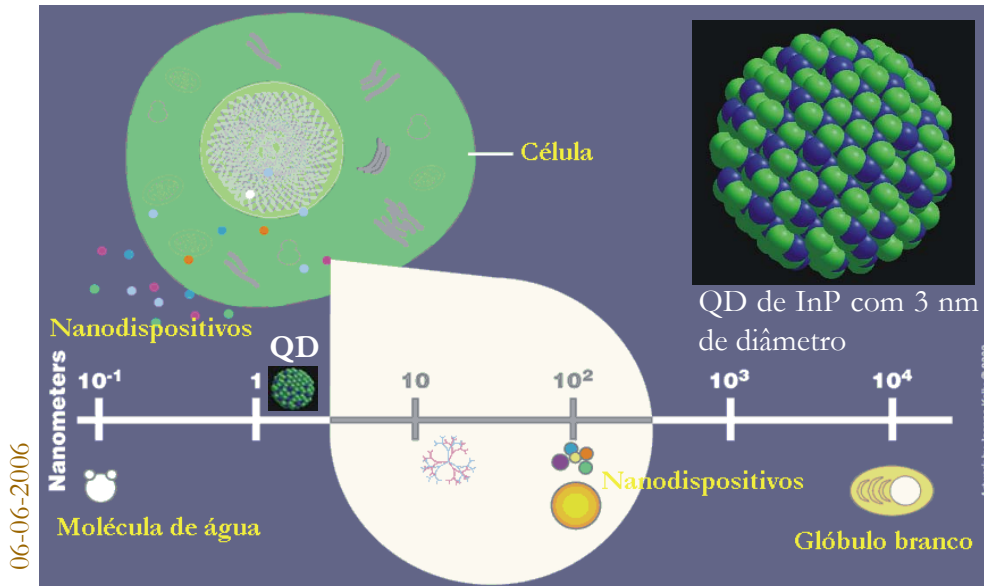
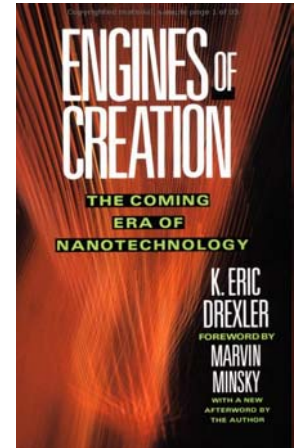
IFQR 2005-2006: Introdução à Física Quântica

There's Plenty of Room at the Bottom,
Richard P. Feynman, 29-12-1959



IFQR 2005-2006 DF-FCT-ULAG

- O termo **nanotecnologia** refere-se à capacidade de construir dispositivos funcionais baseados no agrupamento controlado de nanoestruturas (átomos, moléculas, etc.). A **engenharia de bandas** permite implementar nanoestruturas e nanocristais em que o arranjo espacial dos diferentes constituintes é usado para confinar electrões, lacunas, excitações, polarões, plasmões, etc., obtendo-se estruturas com novas propriedades mecânicas, ópticas, electrónicas ou magnéticas. A região activa destas heteroestruturas situa-se próxima de uma heterojunção ou envolve camadas atómicas/moleculares de diferentes materiais, ou volumes individualizados com poucos blocos constituintes (da ordem de 10 a 1000 camadas atómicas ou moleculares, e/ou dimensões entre 1 nm e 100 nm). Várias estruturas semicondutoras III-V e II-VI têm sido propostas e investigadas em face do elevado potencial tecnológico.
- As propriedades mecânicas, ópticas, eléctricas, magnéticas, etc., destas estruturas são determinadas pela composição e/ou pela distribuição espacial dos diferentes constituintes. Estruturas baseadas em poços quânticos e/ou pontos quânticos estão na base de vários dispositivos optoelectrónicos como, por exemplo, díodos laser, que tiram partido da absorção/emissão de luz em gamas de frequências diferentes das que seriam possíveis obter com apenas materiais/estruturas clássicas. Outros exemplo são os pontos quânticos (“quantum dots”, QDs) e os nanocristais. Estas nanoestruturas apresentam elevada relação superfície-volume, o que dá origem a propriedades únicas, distintas das dos átomos constituintes e da matéria comum.



- Os pontos (ou caixas) quânticos e os nanotubos de carbono têm aplicações da física fundamental à medicina. A título de exemplo, as características do espectro de emissão dos QDs (cor e intensidade da luz emitida) dependem da composição e do seu tamanho, embora os respectivos espectros de absorção sejam pouco dependentes desses parâmetros. Assim, é possível excitar um conjunto de QDs diferentes usando radiação de energia substancialmente superior à maior energia da emissão fluorescente do conjunto de QDs – ver figura à direita -, o que é uma vantagem em relação aos materiais orgânicos fluorescentes normalmente usados em biologia, bioquímica e biotecnologia.
- O que se segue compreende o estudo das características de diferentes sistemas de baixa dimensionalidade como, por exemplo, poços quânticos, fios quânticos e/ou pontos quânticos, constituintes de dispositivos funcionais com novos e inovadores desempenhos, desde a electrónica à bio-medicina.

José Figueiredo

The Scale of Things – Nanometers and More

Things Natural

Ant
 ~ 5 mm

Dust mite
 $200 \mu\text{m}$

Human hair
 $\sim 60-120 \mu\text{m}$ wide

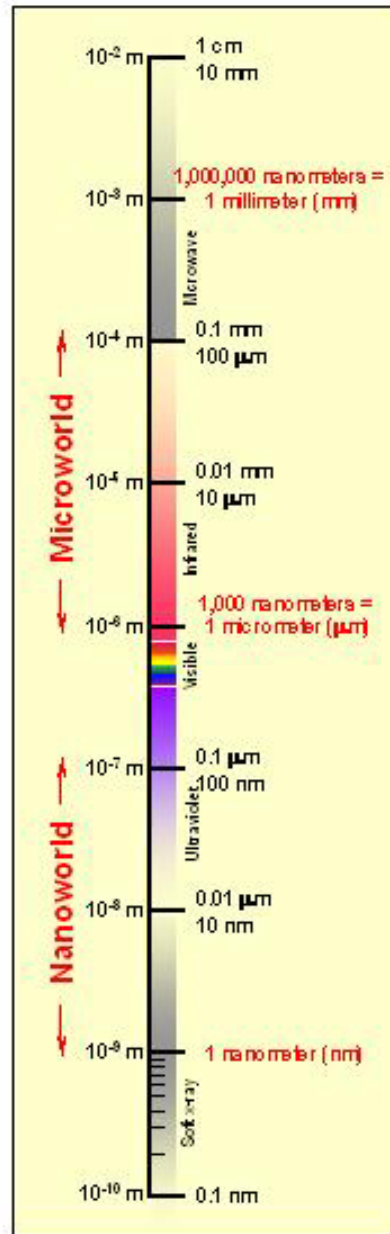
Fly ash
 $\sim 10-20 \mu\text{m}$

Red blood cells with white cell
 $\sim 2-5 \mu\text{m}$

DNA
 $\sim 2-12$ nm diameter

ATP synthase
 ~ 10 nm diameter

Atoms of silicon
 spacing \sim tenths of nm



Things Manmade

Head of a pin
 1-2 mm

Micro Electro Mechanical (MEMS) devices
 10 - 100 μm wide

Pollen grain
Red blood cells

Zone plate x-ray "lens"
 Outer ring spacing ~ 35 nm

Self-assembled, Nature-inspired structure
 Many 10s of nm

Nanotube electrode

Quantum corral of 48 iron atoms on copper surface
 positioned one at a time with an STM tip
 Conal diameter 14 nm

Carbon nanotube
 ~ 1.3 nm diameter

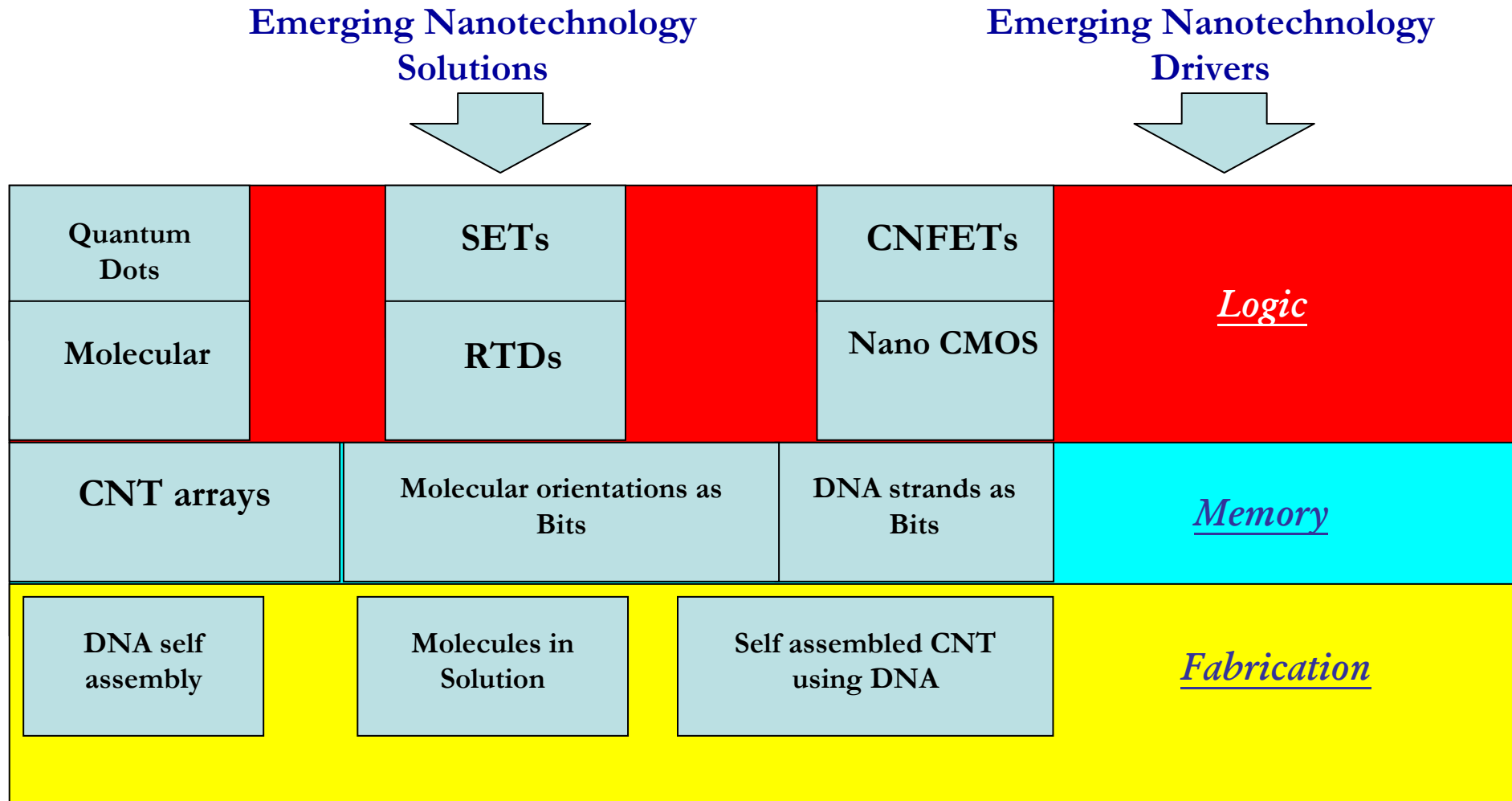
Carbon buckyball
 ~ 1 nm diameter

The Challenge

Fabricate and combine nanoscale building blocks to make useful devices, e.g., a photosynthetic reaction center with integral semiconductor storage.

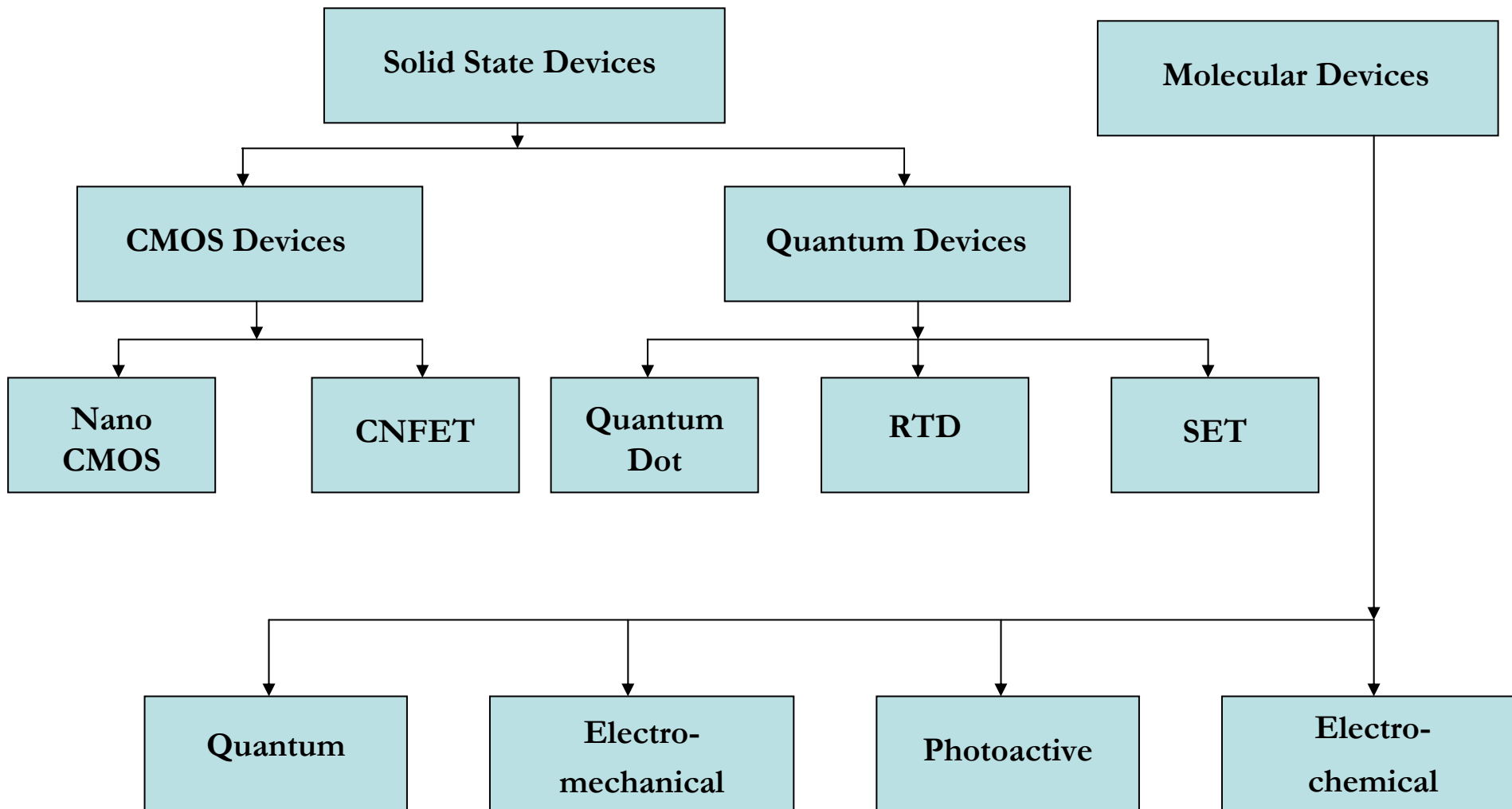
Nanoelectrónica e nanoóptica: duas tecnologias do futuro

- “Switching devices of nanometer (below 100 nm, typically 10 nm) dimensions define nanotechnology – nano-electronics and nano-optics”.



RTDs: resonant tunneling diodes; **SETs:** single electron transistors; **CNFETs:** carbon nanotube field effect transistors; **CNT:** carbon nanotube;

Nanoelectrónica: “Computing Devices”



RTDs: resonant tunneling diodes; **SETs:** single electron transistors; **CNFETs:** carbon nanotube field effect transistors; **CNT:** carbon nanotube;

Problemas (10)

1. Mostre que para uma partícula livre de massa m movendo-se numa dimensão, a função $A\cos kx + B\sin kx$ é uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo para quaisquer valores de A e B . (Ter presente que para uma partícula livre $V(x)=0$, porquê?)
2. Um electrão movendo-se num fio metálico muito fino pode considerar-se como estado confinado num poço quântico de profundidade infinita. O potencial no interior do fio é constante, aumentando bruscamente nas extremidades do fio. Considere que o comprimento do fio é 1 cm. a) determine a energia do estado fundamental do electrão no fio; b) Se a energia do electrão for igual à energia média das moléculas num gás à $T=300$ K, cerca de 0,03 eV, qual será o número quântico do estado deste electrão? [$E_1=3,80 \times 10^{-15}$ eV; $n \sim 2,81 \times 10^6$]
3. a) Determine a probabilidade de encontrar um electrão, no estado fundamental do exemplo anterior, algures na região $0 < x < L/4$. b) Qual seria a probabilidade de encontrar o mesmo electrão numa região estreita de largura $\Delta x = 0,01L$ centrada em $x = 5L/8$? c) Represente graficamente a densidade de probabilidade em função de x , indicando a probabilidade de encontrar a partícula no caso das duas alíneas anteriores.
4. Determine o valor expectável para o momento e para o quadrado do momento de uma partícula no estado fundamental de um poço quântico de profundidade infinita. Antes de efectuar o cálculo, que resultados espera encontrar?
5. Um feixe de electrões, cada um com energia $0,1U_0$, incide num degrau de potencial com altura 1 eV (valor da ordem de grandeza da função trabalho num metal para os electrões à superfície). Represente graficamente a probabilidade de os electrões penetrarem o degrau até à distância de 1 nm (\sim cinco diâmetros atómicos). [Comece por determinar o quadrado do coeficiente C da função $C\exp(-\alpha x)$, $|C|^2=0,4$, assumindo que $|A|^2=1$]
6. Considere um “quantum dot” formado por um núcleo de CdSe (semicondutor directo) e *carapaça* ZnS, na aproximação de confinamento infinito. Tendo presente que o hiato do CdSe é 1,7 eV (300 K), as massas efectivas dos electrões e das lacunas são, respectivamente, $0,13m_0$ e $0,45m_0$, onde m_0 é a massa do electrão em repouso, e que o ponto quântico tem 4 nm de lado, determine a energia dos fotões emitidos por transições entre os níveis fundamentais dos poços da banda de condução e da banda de valência, considerando as seguintes aproximações: a) que o ponto é tratado como uma caixa quântica unidimensional; b) o ponto quântico corresponde a uma caixa cúbica.
7. Sabendo que a probabilidade de uma partícula com $E < U_0$ atravessar uma barreira de espessura d é dada por $T \equiv |F|^2 / |A|^2 = \{1 + \sinh^2(\alpha d) / (4E/U_0 - 4E/U_0^2)\}^{-1}$, onde $\alpha = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$, mostre que se $\alpha d \gg 1$, $T \approx 16E/U_0(1 - E/U_0)\exp(-2\alpha d)$. Caracterize a barreira com $\alpha d \gg 1$?
8. Uma partícula de massa m está confinada numa caixa paralelepípedica com dimensões a , a , e $a/4$. a) Determine a solução da equação de Schrödinger para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado; b) Escreva as funções próprias da energia para os diferentes estados em função dos número quânticos dos sistema.
9. Uma partícula de massa m está confinada numa caixa rectangular bidimensional com dimensões a e b . a) Determine a solução da equação de Schrödinger para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado; b) Determine as funções próprias da energia utilizando número quânticos.