Difração de elétrons por uma fenda

Uma introdução à formulação de Feynman da mecânica quântica

A C Tort[1]

[1]Departmento de Física Teórica
Instituto Física – Universidade Federal do Rio de Janeiro

29 de Março de 2012

Roteiro

A Formulação de Feynman da MQ

A ação clássica:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t)\, dt$$

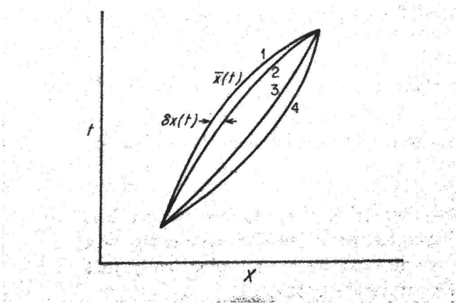
onde

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x, t)$$

é a lagrangiana do sistema clássico.

A equação de movimento clássica segue da condição:

$$\delta S = 0$$



que leva à:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

Exemplo: O.H.S.

$$L(x,\dot{x},t) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{\kappa}{2}x^2$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \qquad \frac{\partial L}{\partial x} = -\kappa x$$

Segue que:

$$\frac{d}{dt}\,(m\dot{x}) + \kappa x = 0 \;\rightarrow\; m\ddot{x} + \kappa x = 0$$

Sabendo a solução da equação de movimento podemos calcular a ação clássica. Para a partícula livre $\dot{x} =$ constante, logo:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2\,dt = \frac{m}{2}\dot{x}^2 \int_{t_a}^{t_b} dt = \frac{m}{2}\dot{x}^2\,(t_b - t_a)$$

Como:

$$\dot{x} = \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}$$

segue que:

$$S = \frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}$$

Richard Feynman, seguindo uma sugestão de P. A. M. Dirac (1902-1984), propôe uma formulação integral para a MQ:

Figura: R. Feynman (1918-1988).

A formulação de integral de caminho!

A formulação de Feynman:

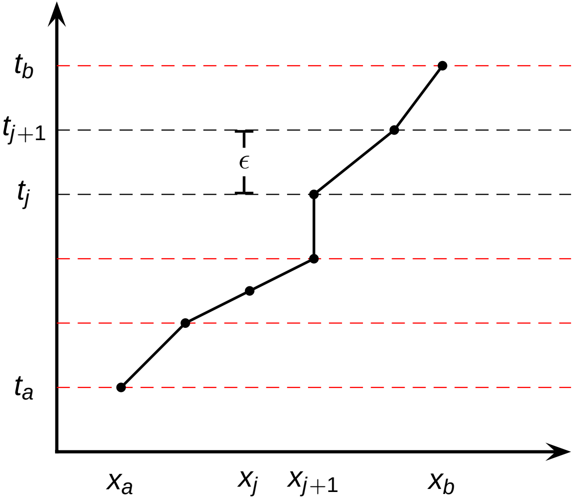
A amplitude quanto-mecânica de propagação de (x_a, t_a) até (x_b, t_b):

$$K(b,a) = \sum_{\text{todos os caminhos de a até b}} \phi[x(t)]$$

onde

$$\phi[x(t)] = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right)$$

O propagador da partícula livre



$$K(b,a) \sim \lim_{\varepsilon\to 0} \int\int ..\int \exp\left\{ \left[\frac{im}{2i\hbar\varepsilon} \sum_{j=1}^{N} \left(x_j - x_{j-1}\right)^2 \right] \right\} dx_1..dx_{N-1}$$

Para transformar "$\sim$"em "$=$", multiplicar a expressão acima por:

$$\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-N/2}$$

para trabalhar com a medida de integração correta.

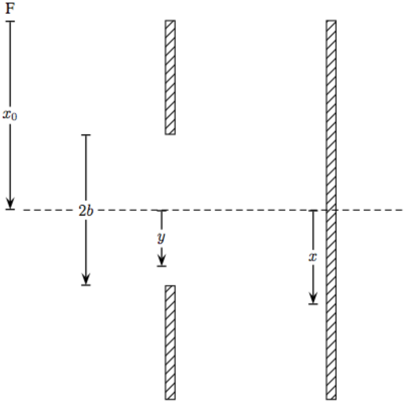
Usando o resultado:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[a(x_1 - x)^2 + b(x_2 - x)^2\right] dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp\left[\frac{ab}{a+b}(x_2 - x_1)^2\right]$$

é possível efetuar todas as integrais!!! O resultado final é o propagador da partícula livre:

$$K(b,a) = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}\right]$$

Difração de fenda única



$$\psi(x, T+\tau) = \int_{-b}^{+b} K(x_0 + x, T+\tau; x_0 + y, T)\, K(x_0 + y, T; 0, 0)\, dy$$

Da origem ($x_a = 0, t_a = 0$) até um ponto da fenda ($x_b = x_0 + y, t_b = T$):

$$K(x_0 + y, T; 0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_0 + y - 0)^2}{(T - 0)}\right]$$

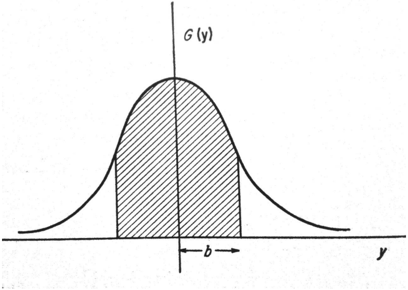
De um ponto da fenda ($x_a = x_0 + y, t_a = T$) até um ponto no anteparo ($x_b = x_0 + x, t_b = T + \tau$):

$$K(x_0 + y, T; 0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar \tau}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_0 + x - x_0 - y)^2}{(T + \tau - T)}\right]$$

Para uma fenda retangular é muito difícil efetuar o cálculo!!

A fenda gaussiana:

$$G(y) = \exp\left(-\frac{y^2}{2b^2}\right)$$



$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K\left(x_0 + x, T + \tau; x_0 + y, T\right) G(y) K\left(x_0 + y, T; 0, 0\right) dy$$

(em $t = T + \tau$).

A integral que deve ser calculada é:

$$\psi(x) = \frac{m}{2\pi i\hbar\sqrt{\tau T}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ \frac{im}{2\hbar}\left[\frac{(x-y)^2}{\tau} + \frac{(x_0+y)^2}{T} \right] - \frac{y^2}{2b^2} \right\} dy$$

Para efetuar a integral usamos o resultado:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(Au^2 + Bu\right)\, du = \sqrt{\frac{\pi}{-A}} \exp\left(-\frac{B^2}{4A}\right)$$

O resultado é:

$$\psi(x, T+\tau) = F(\tau, T)\exp\left(i\phi\right)\exp\left[\frac{\left({m^2}/{2\hbar^2\tau^2}\right)(x - v_0\tau)^2}{(m/\hbar)\left(\frac{i}{\tau}+\frac{i}{T}\right)-\frac{1}{b^2}}\right]$$

onde:

$$F(\tau, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\sqrt{\frac{1}{T+\tau+\frac{i\hbar}{b^2 m}\tau T}}$$

$$\phi = \frac{m}{2\hbar}\left(\frac{x^2}{\tau}+v_0^2\,T\right)$$

A densidade de probabilidade no anteparo é dada por:

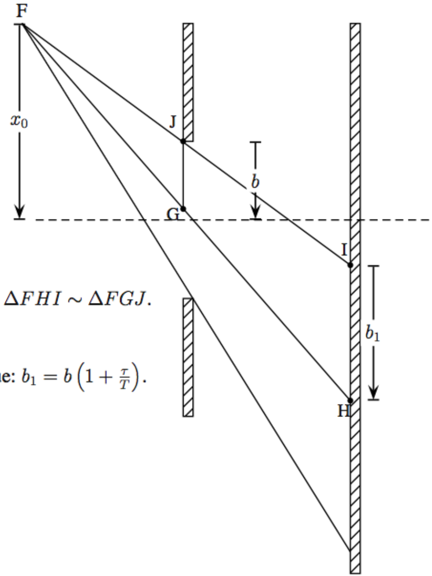
$$P(x) = \psi\psi^* = \frac{m}{2\pi\hbar}\,\frac{b}{T}\,\frac{1}{\Delta x}\,\exp\left[-\frac{(x - v_0\tau)^2}{(\Delta x)^2}\right]$$

com:

$$(\Delta x)^2 = b^2\left(1 + \frac{\tau}{T}\right)^2 + \frac{\hbar^2\tau^2}{b^2m^2} = b_1^2 + \frac{\hbar^2\tau^2}{b^2m^2}$$

O primeiro termo nos dá a dispersão clássica, e o segundo a correção quântica.

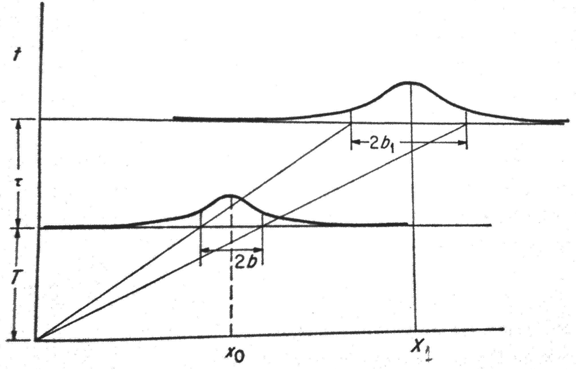
Interpretação física do primeiro termo:



$\Delta FHI \sim \Delta FGJ.$

Segue que: $b_1 = b\left(1 + \frac{\tau}{T}\right).$

$$b_1 = b\left(1 + \frac{\tau}{T}\right)$$



A interpretação física do segundo termo: princípio da incerteza

$$b\,m\,\delta v_0 \approx \hbar, \quad \rightarrow \quad \delta v_0 \approx \frac{\hbar}{bm}$$

$$(\Delta x)^2 = b_1^2 + (\delta v_0\,\tau)^2$$

A probabilidade de que a partícula passe pela fenda é:

$$P(\text{qualquer } x) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x)\,dx$$

Contas feitas obtemos:

$$P(\text{qualquer } x) = \frac{m}{2\pi\hbar T}\,b\,\sqrt{\pi}$$

Fenda retangular: difração de Fraunhofer.

$L =$ distância fenda-anteparo; $\lambda =$ comp. de onda do elétron:

$$N_F = \frac{2b}{L}\frac{b}{\lambda} = 0.01 \text{ (número de Fresnel)}$$

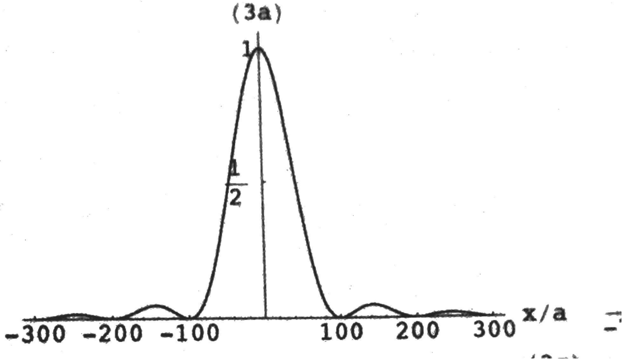


Figura: Resultado para fenda retangular: difração de Fraunhofer.

Fenda retangular: difração de Fresnel.

$$N_F = \frac{2b}{L}\frac{b}{\lambda} = 0.5$$

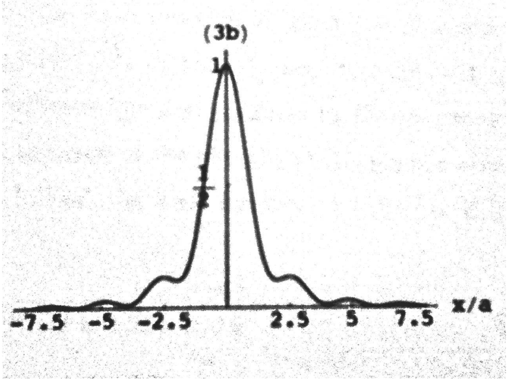


Figura: Resultado para fenda retangular: difração de Fresnel.

Fenda retangular: difração de Fresnel.

$$N_F = \frac{2b}{L}\frac{b}{\lambda} = 100$$

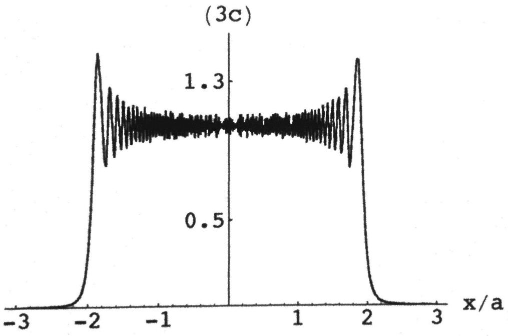


Figura: Resultado para fenda retangular: difração de Fresnel.

Bibliografia:

- R. P. Feynman & A. R. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill: New York) 1965.
- D. H. Kobe: *The Ahranov-Bohn Efffect Revisited* Ann. Phys. **3** 381-410 (1979).
- M. Beau: *Feynman Path Integral approach to electron diffraction for one nad two slits: analytical results* arXiv; 1110.2346v2 [quant-ph] 18 Dec 2011.