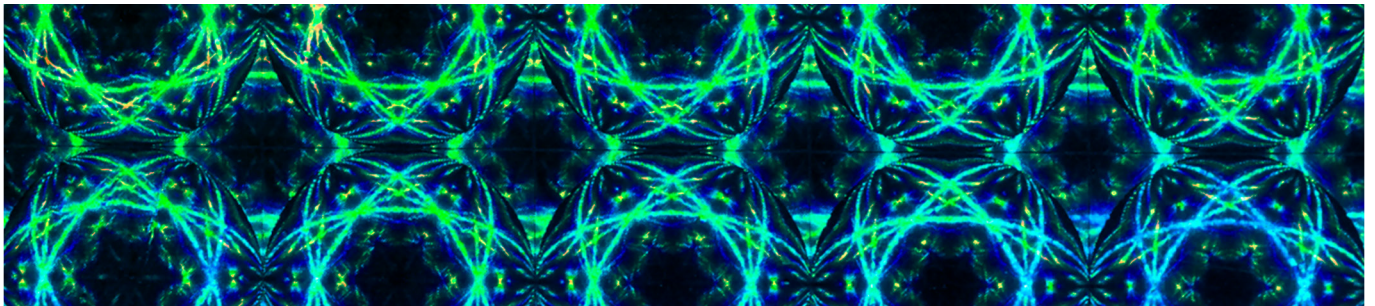


 Coleção
Material Didático
SÉRIE EaD

Física

Introdução à Física Quântica

Francisco Edson da Silva
Neemias Alves de Lima



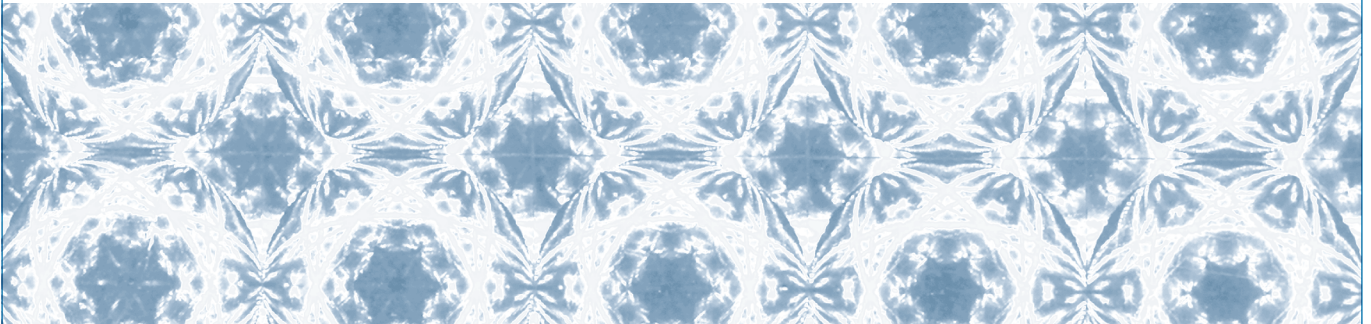
Introdução à Física Quântica

Francisco Edson da Silva
Neemias Alves de Lima

Física

Introdução à Física Quântica

2ª Edição




SEDISUFRRN

Natal – RN, 2014

Governo Federal

Presidenta da República

Dilma Vana Rousseff

Vice-Presidente da República

Michel Miguel Elias Temer Lulia

Ministro da Educação

Henrique Paim

Universidade Federal do Rio Grande do Norte – UFRN

Reitora

Ângela Maria Paiva Cruz

Vice-Reitora

Maria de Fátima Freire Melo Ximenes

Secretaria de Educação a Distância (SEDIS)

Secretária de Educação a Distância

Maria Carmem Freire Diógenes Rêgo

Secretária Adjunta de Educação a Distância

Ione Rodrigues Diniz Moraes

FICHA TÉCNICA

COORDENAÇÃO DE PRODUÇÃO DE MATERIAIS DIDÁTICOS

Marcos Aurélio Felipe

COORDENAÇÃO DE REVISÃO

Maria da Penha Casado Alves

COORDENAÇÃO DE DESIGN GRÁFICO

Ivana Lima

GESTÃO DO PROCESSO DE REVISÃO

Rosilene Alves de Paiva

GESTÃO DO PROCESSO DE DESIGN GRÁFICO

Dickson de Oliveira Tavares

PROJETO GRÁFICO

Ivana Lima

REVISÃO DE MATERIAIS

Ailson Alexandre Câmara de Medeiros

Andreia Maria Braz da Silva

Camila Maria Gomes

Cristiane Severo da Silva

Cristinara Ferreira dos Santos

Edneide da Silva Marques

Emanuelle Pereira de Lima Diniz

Eugenio Tavares Borges

Fabiola Barreto Gonçalves

Julianny de Lima Dantas Simião

Margareth Pereira Dias

Orlando Brandão Meza Ucella

Priscilla Xavier de Macedo

Rosilene Alves de Paiva

Verônica Pinheiro da Silva

EDITORIAÇÃO DE MATERIAIS

Alessandro de Oliveira Paula

Amanda de Lima Cabral

Amanda Duarte

Anderson Gomes do Nascimento

Carolina Aires Mayer

Carolina Costa de Oliveira

Dickson de Oliveira Tavares

Heloisa Fernandes Ferreira Nunes

José Agripino de Oliveira Neto

Leticia Torres

Luciana Melo de Lacerda

Maurício da Silva Oliveira Junior

Revisão de estrutura e linguagem

Eugenio Tavares Borges

Janio Gustavo Barbosa

Jeremias Alves de Araújo

Kaline Sampaio de Araújo

Luciane Almeida Mascarenhas de Andrade

Thalyta Mabel Nobre Barbosa

Revisão de língua portuguesa

Cristinara Ferreira dos Santos

Emanuelle Pereira de Lima Diniz

Janaina Tomaz Capistrano

Revisão de normas da ABNT

Verônica Pinheiro da Silva

Diagramação

Bruno de Souza Melo

Dimetrius de Carvalho Ferreira

Ivana Lima

Johann Jean Evangelista de Melo

Criação e edição de imagens

Adauto Harley

Anderson Gomes do Nascimento

Carolina Costa de Oliveira

Dickson de Oliveira Tavares

Leonardo dos Santos Feitoza

Roberto Luiz Batista de Lima

Rommel Figueiredo

Revisão tipográfica

Leticia Torres

Nouraide Queiroz

IMAGENS UTILIZADAS

Banco de Imagens Sedis - UFRN

Fotografias - Adauto Harley

Free Images- www.freeimages.com

Flickr.com - www.flickr.com

Catalogação da publicação na fonte. Elaborada por Edineide da Silva Marques CRB-15/488.

Silva, Francisco Edson da.

Introdução à Física Quântica [recurso eletrônico] / Francisco Edson da Silva e Neemias Alves de Lima. – 1. ed. – Natal: SEDIS-UFRN, 2024.

32988 KB; 1 PDF

ISBN 978-65-5569-422-2

1. Física. 2. Física Quântica. 3. Radiação. I. Lima, Neemias Alves de. II. Título.

CDU 530.145
S586i

Sumário

Apresentação Institucional	6
Aula 1 O átomo e a Física	7
Aula 2 A radiação térmica e a quantificação da energia	27
Aula 3 O efeito fotoelétrico e o efeito Compton	41
Aula 4 Os espectros atômicos e o modelo de Bohr	64
Aula 5 Propriedades ondulatórias das partículas	80
Aula 6 O Princípio da Correspondência e o Princípio da Incerteza	96
Aula 7 Observando o efeito fotoelétrico	113
Aula 8 A equação de Schrödinger	132
Aula 9 O átomo de hidrogênio	151
Aula 10 Átomos com muitos elétrons	163
Aula 11 Moléculas e espectroscopia molecular	177

Apresentação institucional

A Secretaria de Educação a Distância – SEDIS da Universidade Federal do Rio Grande do Norte – UFRN, desde 2005, vem atuando como fomentadora, no âmbito local, das Políticas Nacionais de Educação a Distância em parceria com a Secretaria de Educação a Distância – SEED, o Ministério da Educação – MEC e a Universidade Aberta do Brasil – UAB/CAPES. Duas linhas de atuação têm caracterizado o esforço em EaD desta instituição: a primeira está voltada para a Formação Continuada de Professores do Ensino Básico, sendo implementados cursos de licenciatura e pós-graduação *lato e stricto sensu*; a segunda volta-se para a Formação de Gestores Públicos, através da oferta de bacharelados e especializações em Administração Pública e Administração Pública Municipal.

Para dar suporte à oferta dos cursos de EaD, a SEDIS tem disponibilizado um conjunto de meios didáticos e pedagógicos, dentre os quais se destacam os materiais impressos que são elaborados por disciplinas, utilizando linguagem e projeto gráfico para atender às necessidades de um aluno que aprende a distância. O conteúdo é elaborado por profissionais qualificados e que têm experiência relevante na área, com o apoio de uma equipe multidisciplinar. O material impresso é a referência primária para o aluno, sendo indicadas outras mídias, como videoaulas, livros, textos, filmes, videoconferências, materiais digitais e interativos e webconferências, que possibilitam ampliar os conteúdos e a interação entre os sujeitos do processo de aprendizagem.

Assim, a UFRN por meio da SEDIS integra-se ao grupo de instituições que assumiram o desafio de contribuir com a formação desse “capital” humano e incorporou a EaD como modalidade capaz de superar as barreiras espaciais e políticas que tornaram cada vez mais seletivo o acesso à graduação e à pós-graduação no Brasil. No Rio Grande do Norte, a UFRN está presente em polos presenciais de apoio localizados nas mais diferentes regiões, ofertando cursos de graduação, aperfeiçoamento, especialização e mestrado, interiorizando e tornando o Ensino Superior uma realidade que contribui para diminuir as diferenças regionais e transformar o conhecimento em uma possibilidade concreta para o desenvolvimento local.

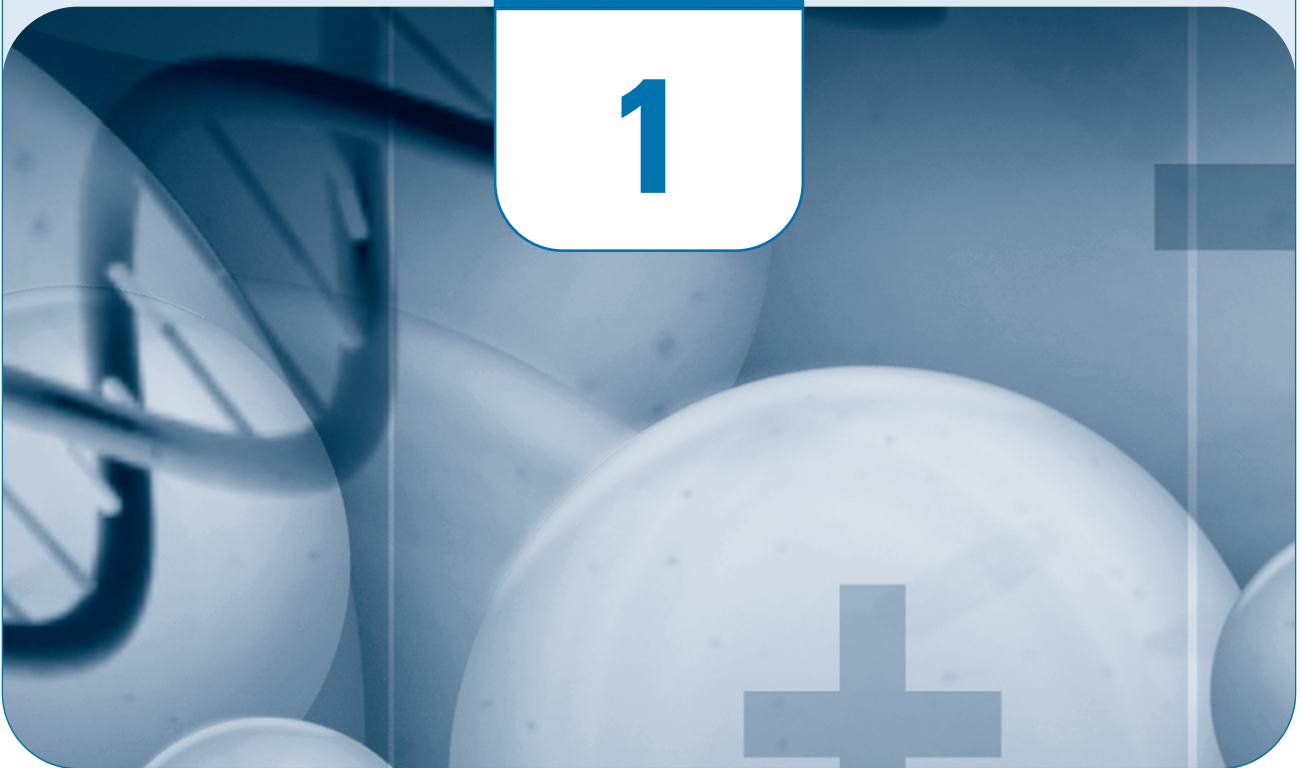
Nesse sentido, este material que você recebe é resultado de um investimento intelectual e econômico assumido por diversas instituições que se comprometeram com a Educação e com a reversão da seletividade do espaço quanto ao acesso e ao consumo do saber E REFLETE O COMPROMISSO DA SEDIS/UFRN COM A EDUCAÇÃO A DISTÂNCIA como modalidade estratégica para a melhoria dos indicadores educacionais no RN e no Brasil.

Secretaria de Educação a Distância
SEDIS/UFRN

O átomo e a Física

Aula

1



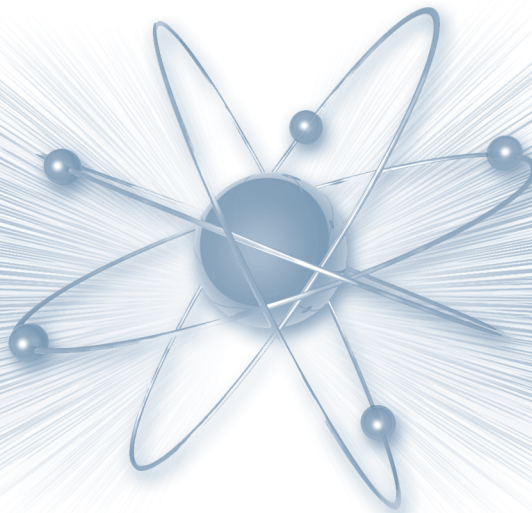
Apresentação

O objetivo desta disciplina é apresentar, em um nível introdutório, a Física Quântica, onde falaremos sobre a descoberta da estrutura atômica, da quantização da carga elétrica, da dualidade onda-partícula e, enfim, apresentaremos a equação de Schrödinger e discutiremos como ela nos leva a entender a estrutura atômica de uma maneira mais completa. Apresentaremos também alguns exemplos de aplicações da Física Quântica em tecnologias contemporâneas.

Nesta aula, resgataremos a descoberta da estrutura atômica da matéria e mostraremos que a existência e a estabilidade do átomo não podem ser entendidas no contexto da Física Clássica.

Objetivos

- 1 Entender o desenvolvimento do conceito de átomo e de sua descoberta.
- 2 Compreender as experiências que levaram às descobertas do elétron e da quantização da carga elétrica.
- 3 Entender as experiências que levaram às descobertas do núcleo atômico e seus constituintes: o próton e o nêutron.
- 4 Perceber que a Física Clássica (mecânica de Newton e o eletromagnetismo) não pode explicar a estrutura da matéria e dos átomos.



Introdução

A Física surgiu e desenvolveu-se a partir da inteligência e da intuição do ser humano ao observar o mundo que o cerca. Essa combinação de inteligência e intuição permitiu, até o final do Século XIX, a criação e a consolidação das diversas áreas da Física Clássica.

Já nesta época, a mecânica clássica, a termodinâmica, o eletromagnetismo e a ótica encontravam-se suficientemente desenvolvidas para dar conta da explicação de quase todos os fenômenos observados e conhecidos. Pensava-se que havia muito pouco para ser descoberto e que tudo que se referia aos fenômenos naturais era ou seria explicado num futuro próximo com base na Física Clássica e nas ideias e conceitos que já haviam sido estudados e desenvolvidos. Uma frase que representa bem o pensamento científico desta época é atribuída a Lorde Kelvin: “A Física é uma ciência completa e acabada [...]”

Antes de percebermos o quão equivocada essa frase estava, é importante ressaltar que percebemos o mundo e a natureza ao nosso redor com nossos sentidos e que é a partir desta percepção que tentamos compreender e explicar a natureza e seus fenômenos.

A Física Clássica foi toda desenvolvida a partir da percepção da natureza e de seus fenômenos por nossos sentidos. Apesar de explicar quase todos os fenômenos que percebemos, não há nenhuma razão lógica para que acreditemos que ela é válida além dos limites de nossa percepção. Na maioria dos casos, ela falha na descrição dos fenômenos que percebemos ou observamos apenas indiretamente.

Os estudos de alguns desses fenômenos observados até o final do Século XIX e não explicados pela Física Clássica deram origem à teoria da relatividade restrita (que será estudada na disciplina Introdução à Relatividade) e à Física Quântica, (que é o objeto de estudo de nossa disciplina). Entre estes fenômenos carentes de explicação no âmbito da Física Clássica no final do século XIX e início do XX e cujos estudos deram origem à Física Quântica podemos citar: a estrutura dos átomos, os espectros da radiação térmica, o efeito fotoelétrico e o efeito Compton. Cada um destes fenômenos será estudado e explicado nas primeiras aulas de nossa disciplina.

Como podemos perceber, ao final do Século XIX ainda havia muito da Física a ser descoberto e desenvolvido.

Devemos lembrar sempre que a Física é uma ciência em desenvolvimento, não só no início do século XX, mas também hoje. A Física pode explicar e prever diversos fenômenos, mas ainda há diversas questões em aberto e os desenvolvimentos necessários para respondê-las podem acrescentar muito ao nosso limitado conhecimento da Natureza e do universo.

Algumas dessas questões que permanecem em aberto na Física contemporânea são: por que a expansão do Universo é acelerada? Por que ainda não conseguimos detectar ondas gravitacionais? Como as interações fundamentais (eletromagnética, nuclear fraca, nuclear forte e gravitacional) podem ser unidas em um único formalismo? O que faz a supercondutividade

ser obtida a temperaturas tão diferentes em diferentes materiais? Como descrever o comportamento de um fluido turbulento?

Para algumas dessas e de outras questões há propostas de resposta. Entretanto, não sabemos quais desenvolvimentos teóricos e experimentais serão necessários até obtermos respostas coerentes a qualquer uma delas.

Assim, podemos ratificar que a Física é uma ciência em desenvolvimento e longe de estar **completa**. Essa verdade se aplicava à Física do final do Século XIX e também se aplica à Física de nossos dias.



Completa

Uma lista mais completa de problemas em aberto na Física pode ser vista na página de internet: http://pt.wikipedia.org/wiki/Problemas_em_aberto_da_Fisica. Acesso em: 22 jun. 2009.

A descoberta do átomo



“Todas as coisas são feitas de átomos - minúsculas partículas que se movem próximas umas das outras em movimento perpétuo, atraindo-se mutuamente quando estão separadas de uma pequena distância, mas repelindo-se mutuamente quando comprimidas umas contra as outras”.
Richard P. Feynman (1918-1988).

A matéria é feita de átomos. O ar que respiramos, as células dos seres vivos, pingos de chuva, grãos de areia, frutas e legumes, barras de ouro, fios de cobre, rochas, etc., todos são exemplos de materiais cujos últimos constituintes que retêm propriedades individuais são os átomos. As propriedades dos átomos são bastante notáveis. Não é fácil separar os átomos de um material sólido como uma pedra, por exemplo, seja sugando-os ou comprimindo-os conjuntamente.

A descoberta dos átomos e a mensuração de suas propriedades pavimentaram o caminho para nossa presente compreensão do Universo. A ideia de a matéria ser composta de átomos é o conceito isolado mais importante de toda a ciência. A composição atômica da matéria explica fenômenos aparentemente diversos como: por que o céu é visto azul?; por que uma rocha é sentida dura?; por que uma rosa exala fragrância?; por que um violino ressoa melodioso?; por que um limão tem gosto azedo?.

Vimos na disciplina Movimento e Mecânica Clássica, que uma partícula em uma trajetória circular está sujeita a uma aceleração centrípeta. Já no eletromagnetismo, vimos que uma carga elétrica acelerada em um campo elétrico irradia e perde energia. Portanto, um elétron orbitando um núcleo positivo está sujeito ao campo elétrico deste e, por estar acelerado, deveria irradiar e perder energia e, conseqüentemente, o raio de sua órbita iria diminuindo e o elétron cairia no núcleo atômico. Assim, o átomo, de acordo com a Física Clássica, é um sistema instável.

Antes de entendermos a estabilidade dos átomos, as ideias e os conceitos introduzidos para explicá-la (tópicos que serão estudados em nossas próximas aulas), vamos resgatar as ideias e os experimentos que conduziram à descoberta dos átomos, de sua estrutura e de seus constituintes. Assim, nesta primeira aula, vamos entender a construção histórica desse modelo atômico que é fundamentado em resultados experimentais.

Há cerca de 2400 anos, o filósofo grego pré-socrático Anaxágoras (500–428 a.C.) teve a grande ideia de que a matéria era composta de minúsculas sementes invisíveis, a que chamou *spermata*. Poucos anos depois, esse conceito foi expandido por Demócrito (460-370 a.C.) e Epicurus (341-270 a.C.). Demócrito acreditava que toda matéria era formada de vários elementos indivisíveis e imperecíveis aos quais chamou de *atoma* (singular: *atomon*) ou **unidades indivisíveis**, de onde surgiu a palavra ocidental **átomo**. A ideia permaneceu estéril, entretanto, por causa de sua natureza puramente filosófica, até o Século XVII, quando foi reavivada pelo britânico Robert Boyle (1626-1691) no contexto de estudos sobre o estado gasoso da matéria.



Atividade 2

A que você atribui o fato de a natureza atômica da matéria permanecer como uma ideia puramente filosófica desde a Grécia Antiga até o Século XVII?

No Século XVIII, o matemático holandês Daniel Bernoulli (1700-1782) propôs uma teoria sobre a natureza dos gases e explicou a pressão como sendo devido ao bombardeamento de “corpúsculos”, que constituíam um gás, nos objetos imersos no gás.

Entre 1808 e 1810, o químico britânico John Dalton (1766-1844), baseando-se nos trabalhos experimentais de diversos cientistas e nas primeiras ideias sobre a combinação química postulou a primeira teoria atômica.

A teoria atômica de Dalton dizia que:

- a)** a matéria se compõe de partículas muito pequenas para serem vistas, chamadas átomos;
- b)** os átomos de um elemento são idênticos em todas as suas propriedades, incluindo o peso;
- c)** diferentes elementos são feitos a partir de diferentes átomos;
- d)** os compostos químicos se formam da combinação de átomos de dois ou mais elementos em um **átomo composto**;
- e)** os átomos não podem ser divididos e conservam suas características durante as reações químicas;
- f)** em qualquer reação química, os átomos se combinam em proporções numéricas simples.

Essa teoria explicava várias leis da Química e, segundo ela, o átomo era considerado indivisível. No entanto, vários experimentos evidenciaram que o átomo era feito de partículas ainda menores (que foram chamadas de **partículas subatômicas**) e que tinha uma estrutura complexa.

Átomo: estrutura e constituintes

Nesta seção, vamos estudar e entender os experimentos que descobriram a existência das partículas subatômicas e começar a desvendar a estrutura do átomo.

A descoberta do elétron

A primeira partícula subatômica descoberta foi o **elétron**. Sua descoberta, feita a partir do estudo de descargas de alta voltagem em gases, é uma das mais importantes descobertas da Física Moderna.

Esse estudo remonta ao cientista Michael Faraday (1791-1867) em 1830. Ele observou que a condução de eletricidade através de um gás produzia raios luminosos no interior do tubo de seu recipiente e verificou que ao se reduzir a densidade do gás, o fenômeno ficava mais intenso ao invés de diminuir. Esses raios luminosos foram chamados de **raios catódicos**, pois saíam do cátodo (placa negativamente carregada) e iam para o ânodo (placa positivamente carregada).

Nos anos que se seguiram, diversos cientistas contribuíram para o estudo das propriedades e natureza dos raios catódicos e para identificá-los.

Logo surgiu um intenso debate sobre a verdadeira natureza dos raios catódicos. Cientistas alemães, liderados por Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894), defendiam que as evidências indicavam que os raios eram ondas ao invés de partículas. Por outro lado, a ideia prevalecente, na Inglaterra, era que eles consistiam de partículas elétricas carregadas. O mais proeminente defensor desse ponto de vista era Joseph John Thomson (Figura 1).

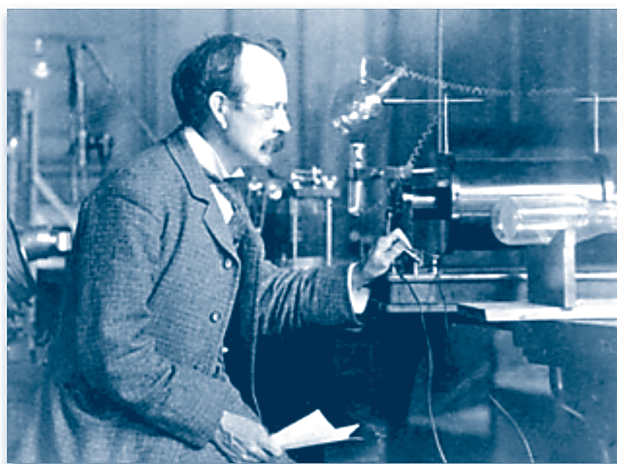


Figura 1 – Joseph John Thomson (1856-1940).

A dualidade partícula-onda dos elétrons se tornaria um fundamento da mecânica quântica (como veremos mais adiante no decorrer desta disciplina), onde os elétrons se comportariam como onda ou partícula, dependendo do procedimento usado para detectá-lo.

O termo “elétron” foi introduzido em 1891 pelo irlandês George Johnstone Stoney (1826-1911) e o argumento experimental que definiu em favor do ponto de vista da natureza “corpúscular” dos raios catódicos foi apresentado pelo francês Jean Baptiste Perrin (1870-1943) em 1895, quando capturou cargas negativas ao incidir raios catódicos em um eletroscópio. Mas a “descoberta” do elétron é usualmente atribuída a J. J. Thomson em 1897.

A Figura 2 ilustra o esquema do aparato usado por Thomson em seu famoso experimento. Nesse experimento, quando uma voltagem V suficientemente alta é aplicada entre os eletrodos A (ânodo) e C (cátodo), mostrados na Figura 2, o cátodo emite um feixe bem definido de partículas eletrificadas de massa m e carga $-e$. Essas partículas (que chamaremos de agora em diante de elétrons) passam pelo orifício em A e saem em A' com uma velocidade de módulo v_0 na direção horizontal. Na ausência de outra interação, suas trajetórias retilíneas as fazem incidir em 1.

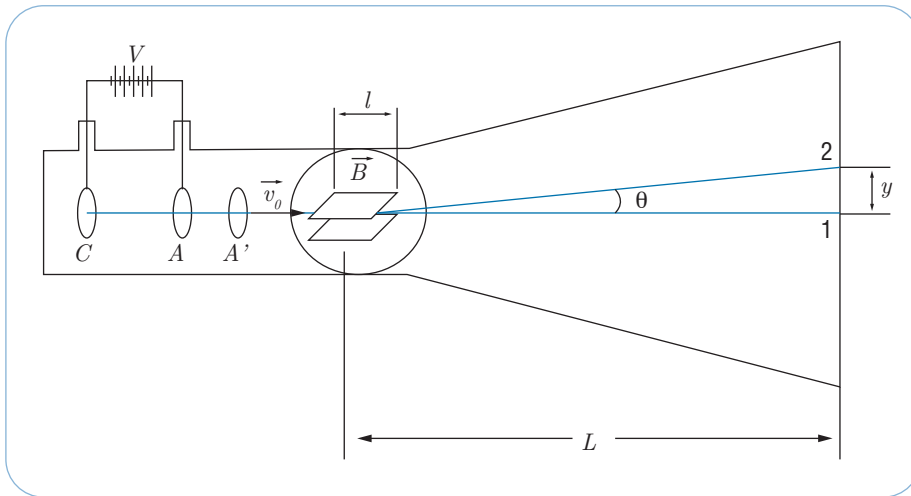


Figura 2 – Esquema do experimento de Thomson.

Se só o campo elétrico produzido pelas placas carregadas atua sobre as partículas na região entre as placas, então, enquanto nesta região, os elétrons ficam sujeitos a uma força elétrica que os desvia para cima e os faz alcançar a tela no ponto 2. A intensidade dessa força elétrica é:

$$F_e = eE. \quad \text{Eq. (1)}$$

Se os elétrons estão sujeitos somente à força elétrica, eles sofrerão uma aceleração vertical para cima, cuja intensidade pode ser obtida combinando-se a Equação 1 com a segunda lei de Newton:

$$F = ma. \quad \text{Eq. (2)}$$

Assim, temos que:

$$a = \frac{e}{m}E. \quad \text{Eq. (3)}$$

A velocidade horizontal dos elétrons não é alterada pelo campo elétrico. Assim, o tempo de percurso dos elétrons na região das placas vale:

$$t = \frac{l}{v_0}, \quad \text{Eq. (4)}$$

onde l é o comprimento das placas.

A velocidade vertical, v_y , dos elétrons ao deixar a região de campo elétrico, dessa forma, vale:

$$v_y = at = \frac{e}{m}E \frac{l}{v_0}. \quad \text{Eq. (5)}$$

Para pequenas deflexões sofridas pelos elétrons em sua trajetória, ou seja, para $\theta < 10^\circ$, podemos determinar a deflexão angular do feixe de elétrons como:

$$\theta \cong \frac{y}{L}, \quad \text{Eq. (6)}$$

onde y é a distância entre os pontos 1 e 2 no anteparo e L é a distância entre o centro da região de campo elétrico e o anteparo (veja a Figura 2). Ainda para pequenas deflexões, temos que a deflexão angular pode ser escrita como:

$$\theta \cong \text{tg } \theta = \frac{v_y}{v_0}. \quad \text{Eq. (7)}$$

Substituindo a Equação 5 na Equação 7, obtemos que:

$$\theta \cong \frac{e}{m} E \frac{l}{v_0^2}. \quad \text{Eq. (8)}$$

Igualando as deflexões angulares, θ , obtidas nas Equações 6 e 8, podemos escrever a razão carga/massa do elétron como:

$$\frac{e}{m} = \frac{y}{lLE} v_0^2. \quad \text{Eq. (9)}$$

Para poder medir a razão e/m , Thomson precisava conhecer a velocidade inicial dos elétrons. Para isso, ele fez uma medida separada na qual, com o uso de um eletroímã, aplicou na região circular da Figura 2 um campo magnético perpendicular às direções do feixe de elétrons e do campo elétrico. Como os elétrons em movimento interagem com o campo elétrico e com o campo magnético, de acordo com a força de Lorentz, temos:

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v}_0 \times \vec{B}). \quad \text{Eq. (10)}$$

Thomson ajustou o campo magnético de modo a anular o desvio do feixe, condição que é satisfeita se a força de Lorentz sobre os elétrons é nula. Assim:

$$E = v_0 B \Rightarrow v_0 = \frac{E}{B}. \quad \text{Eq. (11)}$$

Usando esse procedimento e as duas medidas independentes, Thomson obteve para a razão carga/massa do elétron o valor $1,2 \times 10^{11} \text{ C/kg}$, que difere cerca de 30% do valor obtido nos experimentos mais recentes:

$$\frac{e}{m} = 1,7588 \times 10^{11} \text{ C/kg}. \quad \text{Eq. (12)}$$



Atividade 3

Determine a intensidade do campo elétrico necessária para defletir um feixe de elétrons por $1,2 \text{ cm}$, se este é emitido com velocidade de 10 cm/s e a região onde o campo elétrico atua tem um comprimento de 5 cm e a distância das placas ao anteparo é de $62,5 \text{ cm}$.

A determinação da carga do elétron

Uma vez conhecida a relação e/m para o elétron, bastava medir e para obter m ou medir m para obter e . Muitos cientistas se lançaram a esta busca, e o mesmo J. J. Thomson, em 1899, mediu indiretamente a carga do elétron, obtendo o resultado $e = 2,17 \times 10^{-19} C$. A primeira medida direta e precisa da carga do elétron foi realizada somente dez anos depois pelo estadunidense Robert Andrews Millikan (Figura 3).



Figura 3 – Robert Andrews Millikan (1868-1953).

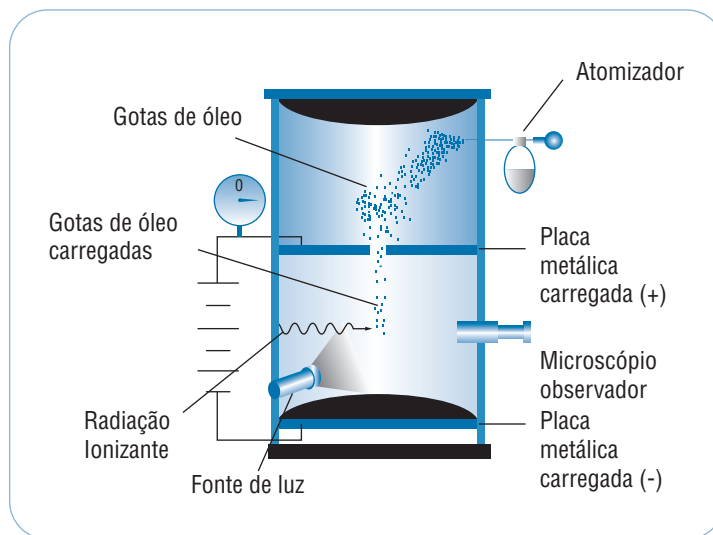


Figura 4 – Esquema do experimento de Millikan.

O experimento de Millikan é um exemplo claro de paciência científica, pois envolvia medições muito delicadas que deveriam ser repetidas muitas vezes. O experimento tratava-se de observar o movimento no ar de pequenas gotas de óleo carregadas eletricamente. As gotas eram postas em um campo elétrico, que tendia a fazê-las subir em contraposição ao campo gravitacional, que tendia a fazê-las cair. No momento em que ambas as forças eram balanceadas, isto é, $F_e = F_g$, tinha-se que:

$$qE = Mg, \quad \text{Eq. (13)}$$

onde q e M eram, respectivamente, a carga e a massa de uma gota; e E a intensidade do campo elétrico aplicado. Levando também em conta a força de arraste (a força de atrito devido ao ar) no movimento das gotas, Millikan encontrou que as cargas das gotas eram sempre múltiplas de $e = 1,591 \times 10^{-19} C$, isto é:

$$q = ne, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{Eq. (14)}$$

Esse resultado indicava que as gotas de óleo possuíam uma carga igual ao número de elétrons adicionados ou retirados das mesmas.

Uma vez que a Equação 14 é aplicável para qualquer corpo carregado, isso significa que não é qualquer valor de carga elétrica que é permitido. Corpos eletricamente carregados só



Atividade 5

Determine a intensidade do campo elétrico necessário para equilibrar a força gravitacional de uma gota de óleo que tenha uma massa igual a 1 miligrama e da qual tenham sido arrancados 1000 elétrons.

O estabelecimento do elétron como constituinte do átomo e o fato de os átomos serem eletricamente neutros implicam que os átomos possuem alguma “coisa” com carga elétrica positiva.

O modelo atômico de Kelvin-Thomson

Em 1902, o britânico William Thomson Kelvin (o Lord Kelvin da temperatura absoluta, 1824-1907) propôs que o átomo era uma esfera constituída de uma “substância” com carga positiva uniforme dentro da qual se encontravam imersos os elétrons, de tal forma que o átomo, como um todo, era eletricamente neutro. A esfera de carga positiva tinha um raio da ordem de $10^{-10} m$, o que se sabia já naquela época ser o tamanho dos átomos. Lord Kelvin estudou sobre em que condições esse modelo atômico era eletricamente estável, variando o número de elétrons de um a seis.

Em 1904, J. J. Thomson redescobriu o modelo e, em 1907, sem citar seu compatriota Lord Kelvin, propôs que os elétrons se encontram em um anel girando em torno do centro do átomo. Como elétrons acelerados em um movimento circular perdem energia na forma de radiação eletromagnética, após um longo tempo alcançariam uma velocidade limite, produzindo assim uma desestabilização no átomo, o que levaria a sua destruição. Segundo Thomson, isso explicaria o decaimento radioativo dos elementos, já que uma forma do átomo voltar a ser estável seria perder um elétron.

No entanto, ainda que girasse um grande número de elétrons em um anel, tal sistema não seria estável. Para corrigir esse problema, Thomson, na expectativa de que esse modelo explicasse a natureza da valência química, propôs que vários anéis (com certo número de elétrons em cada anel) girassem um dentro do outro. Realizou, então, cálculos para átomos de até noventa elétrons (os quais ocupavam seis anéis concêntricos). Alguns deles ficariam estabilizados com a perda de um elétron e outros com a aceitação de um elétron. Thomson introduziu, então, os conceitos de doador e aceitador de elétrons. Tentou, desesperadamente, obter uma correlação entre os elementos existentes e os obtidos por seu modelo para assim explicar a periodicidade das propriedades químicas, mas falhou. Como veremos, ele tinha alguma razão, mas seu modelo não era correto, como logo se verificou pelos resultados do experimento de Rutherford.

A descoberta do núcleo e o modelo atômico de Rutherford

Em 1908, Ernest Rutherford (Figura 5) e Johannes Hans Wilhelm Geiger (1882-1945) determinaram a carga e a massa das partículas α , que são emitidas por algumas substâncias radioativas, percebendo que se tratavam de núcleos do átomo de hélio.



Figura 5 – Ernest Rutherford (1871-1937).

Sabendo-se que a massa de uma partícula α era da ordem de 7300 vezes a do elétron, esperava-se, então, que os elétrons de um material não deveriam provocar nenhum desvio apreciável na direção de um feixe dessas partículas, de modo que a interação das partículas α com os demais constituintes do átomo daria alguma informação sobre a estrutura atômica.

De acordo com o modelo de Kelvin-Thomson, uma vez que a carga positiva se encontrava distribuída por todo o átomo, apenas pequenas deflexões, devido às colisões múltiplas, eram esperadas. O ângulo médio de espalhamento seria da ordem de trinta vezes o provocado por um único átomo, o que era muito menor que um grau. Devido a isso, seria impossível que uma partícula α se desviasse de um ângulo grande.

Em 1909, por sugestão de Rutherford, Geiger e o neozelandês Ernest Marsden (1889-1970) reportaram os resultados do “bombardeio” com partículas α de alta velocidade em uma lâmina delgada de ouro de $0,00004\text{ cm}$ de espessura, medindo os desvios produzidos por sua passagem através do material. Mediram, inclusive, a probabilidade de “rebote” do projétil, colocando o detector entre a fonte e a lâmina de ouro. O resultado foi positivo. Algumas partículas α tinham ângulos de espalhamento maiores que 90° ! O modelo de Kelvin-Thomson não podia explicar esse fenômeno, ou seja, o átomo não era da forma que eles haviam desenhado.

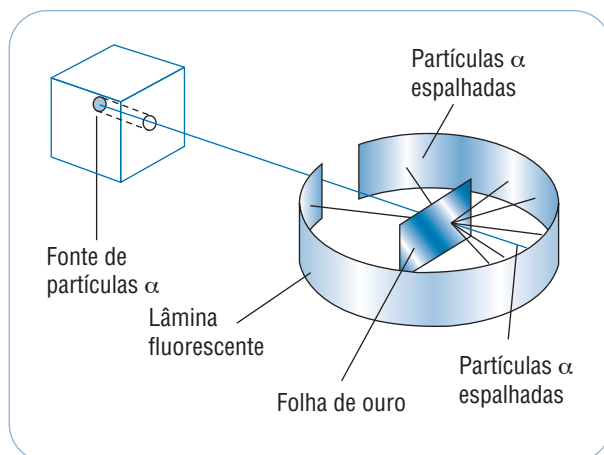


Figura 6 – O experimento de espalhamento de partículas α de Rutherford.

Rutherford, em 1911, propôs, então, um novo modelo atômico, no qual a carga positiva do átomo (Ze) estava localizada em um ponto, o centro do átomo. Ali se encontraria a maior parte da massa do átomo. Assim nasceu o conceito de núcleo atômico. Ao redor desse núcleo, Rutherford supôs que se encontrariam os elétrons.

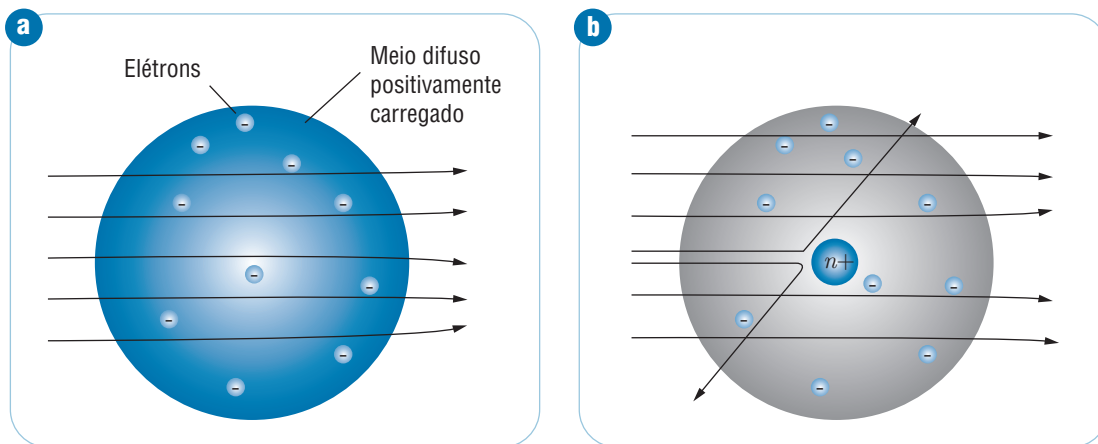


Figura 7 – Resultado esperado pelos modelos atômicos de (a) Thomson e (b) Rutherford.

A existência de um núcleo massivo e com alta carga elétrica tornava possível que uma partícula α tivesse eventualmente grandes ângulos de espalhamento quando se aproximasse o suficiente do núcleo. Bastava uma “colisão” frontal para explicar o fenômeno.

De acordo com o seu modelo, Rutherford estimou que para o ouro, Z seria aproximadamente 100 (o valor real é 79) e propôs a realização de experimentos adicionais. Em 1913, Geiger e Marsden publicaram que o modelo de Rutherford descrevia adequadamente o espalhamento das partículas α por lâminas metálicas de ouro, prata, cobre e alumínio.

Há de se notar que Rutherford não se ocupou em seu modelo em descrever os elétrons. No entanto, uma coisa era certa, ao situar o núcleo no centro, um átomo com um elétron deveria ter este ao seu redor girando. Caso contrário, o elétron colapsaria com o núcleo positivo. Mas, como já citamos, uma carga elétrica acelerada (aceleração centrípeta) emite radiação eletromagnética, e isso levaria o elétron a ir diminuindo seu raio até terminar caindo sobre o núcleo de qualquer jeito!

Entre os anos de 1911 e 1913, os cientistas não encontraram uma solução para essa falha do modelo atômico de Rutherford. Foi necessário introduzir considerações quânticas para superar o obstáculo, como será visto em uma próxima aula.

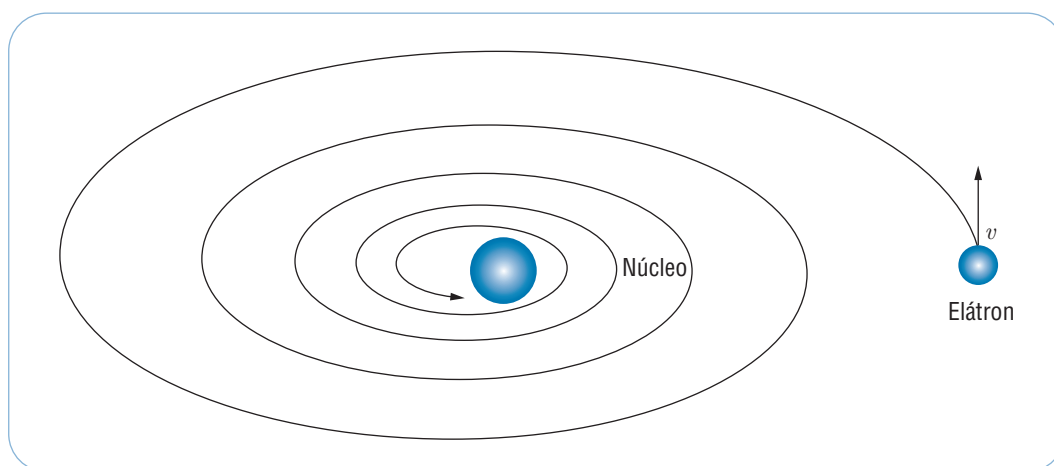


Figura 8 – No modelo planetário do átomo na Física Clássica, o elétron perde energia emitindo radiação eletromagnética e cai dentro do núcleo.



Atividade 6

O núcleo de um átomo de hidrogênio é um próton, que possui um raio de aproximadamente $1 \times 10^{-15} \text{ m}$. O elétron do átomo de hidrogênio normalmente está a uma distância de $5,3 \times 10^{-11} \text{ m}$ do núcleo. Você está construindo um modelo em escala do átomo de hidrogênio e o núcleo é representado por uma laranja de $2,0 \text{ cm}$ de raio. A quantos quilômetros de distância deve ser colocado o elétron?

As descobertas do próton e do nêutron e a estabilidade do núcleo atômico

O tubo de Crookes, usado por diversos pesquisadores, inclusive Thomson, para observar e estudar os raios catódicos (elétrons) foi essencial na descoberta de outra partícula subatômica: o **próton**.

Em 1886, Eugen Goldstein (1850-1931), utilizando um cátodo perfurado em ampolas semelhantes à de Crookes, observou um foco luminoso surgir atrás do cátodo, vindo da direção do ânodo. Ele denominou esse fluxo de **raios anódicos** ou **raios canais** em contraposição aos raios catódicos (elétrons).

Em 1897, o físico alemão Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864-1928) estudou a deflexão dos raios anódicos em campos elétricos e magnéticos e, examinando a direção dessa deflexão, concluiu que tais “raios” eram partículas carregadas positivamente com relações massa/carga (m/e) milhares de vezes maiores do que a dos raios catódicos ou, equivalentemente, relações carga/massa (e/m) milhares de vezes menor.

Wien observou ainda que os raios canais apresentavam diferentes relações massa/carga, enquanto que os raios catódicos tinham sempre o mesmo valor para tal relação. Portanto, concluiu-se que os raios canais eram átomos ou moléculas do gás dentro do tubo, que se tornavam positivos quando tinham seus elétrons arrancados pelos raios catódicos que viajavam do cátodo para o ânodo no tubo de Crookes.

A massa dos raios anódicos variava de acordo com o gás no tubo. Assim, quando o gás era o hidrogênio, os raios canais produzidos tinham a menor relação massa/carga, ou seja, eram íons positivos de menor carga e massa. Assim, o núcleo de hidrogênio foi considerado a parte elementar dos raios canais, um “elétron positivo” com massa quase duas mil vezes a do elétron. Em 1920, Rutherford propôs o nome de **próton** (que significa “primeiro”, em grego) ao núcleo do hidrogênio (${}_1H^1$).

Rutherford também propôs que os núcleos atômicos eram formados por núcleos de hidrogênio e elétrons, de modo que o núcleo de hélio ou partícula *alfa*, por exemplo, seria formado por quatro prótons e dois elétrons, já que sua carga elétrica total é duas vezes a carga do núcleo de hidrogênio e sua massa é pouco maior que a massa de quatro núcleos deste mesmo elemento. Ele chamou esta partícula, um estado ligado formado por um próton e um elétron, de **nêutron**, mas a sua existência era apenas especulativa.

A descoberta do nêutron aconteceu somente em 1932 com o físico inglês James Chadwick (1891-1974), que utilizando o princípio da conservação do momento linear determinou sua existência. Chadwick estava estudando emissões radioativas e as propriedades de uma radiação que muitos acreditavam que fosse a radiação *gama*, pois era muito penetrante e não tinha carga elétrica (não era defletida por campos elétricos ou magnéticos).

Essa radiação neutra e desconhecida era produzida, por exemplo, quando uma placa de berílio era bombardeada com partículas *alfa* e podia ser medida e estudada em uma câmara de ionização (veja Esquema 1 da Figura 9). Observou-se que ao se colocar uma placa de parafina ou outro material rico em hidrogênio entre o disco de berílio e a câmara de radiação (veja Esquema 2 da Figura 9) eram produzidos prótons muito energéticos.

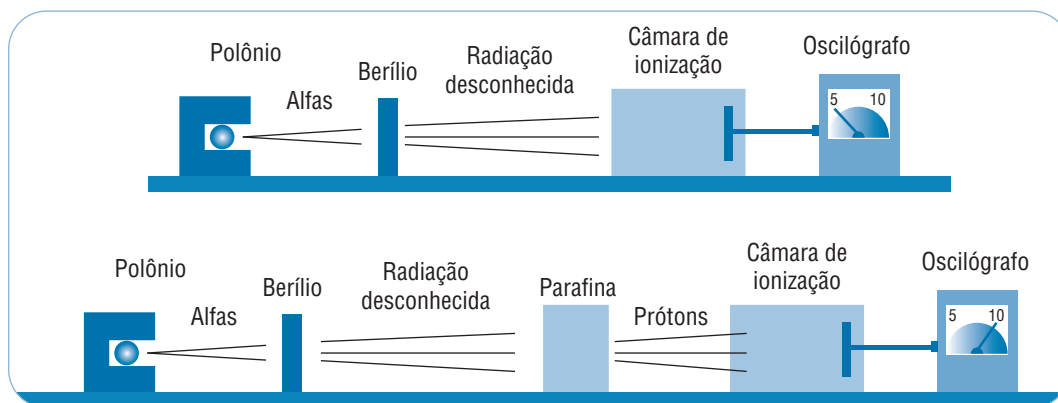


Figura 9 – Esquemas dos experimentos de Chadwick.

Chadwick calculou a energia total da radiação desconhecida para produzir as emissões de prótons observadas e obteve um valor muito maior que o das energias observadas para emissões de radiação *gamma*. Assim, ele determinou que a radiação desconhecida era composta por partículas sem carga elétrica e com massa pouco maior que a massa do próton. Era o nêutron que, junto com o próton, constitui os núcleos atômicos. Outros cientistas já tinham se deparado com os nêutrons, mas não interpretaram acertadamente seus experimentos e não os perceberam.

Temos ainda que lembrar que a hipótese de Rutherford, segundo a qual o nêutron era uma partícula composta, mistura de próton com elétron, foi descartada rapidamente. O físico alemão Werner Karl Heisenberg (1901-1976) mostrou, ainda em 1932, que o nêutron era uma partícula inteira com o mesmo *status* do próton.

O nêutron passou a ser uma excelente ferramenta de pesquisa dos físicos para explorar a estrutura do núcleo atômico, pois não tendo carga elétrica, não estão sujeitos à repulsão coulombiana.

O núcleo atômico sugerido por Rutherford, mesmo considerando os nêutrons como partículas e não como estados ligados próton-elétron, era instável de acordo com os conceitos da Física Clássica, pois a repulsão coulombiana entre os prótons formadores do núcleo é muito maior que a atração gravitacional entre todos os constituintes do núcleo (prótons e nêutrons).

Em seus trabalhos de apresentação da descoberta do nêutron, Chadwick não especulou sobre o papel dessa partícula subatômica no núcleo atômico. Esse papel foi atribuído, ainda em 1932, por Werner Karl Heisenberg, Dimitrij Iwanenko (1904-1994) e Ettore Majorana (1906-1938), ao apresentarem a hipótese de que os prótons e os nêutrons, enquanto partículas constituintes do núcleo atômico, comportavam-se como partículas únicas que interagem por intermédio de uma força atrativa capaz de superar a repulsão coulombiana entre os prótons. Em 1941, Christian Möller (1904-1980) cunhou o termo *nucleon* para designar prótons e nêutrons como constituintes do núcleo atômico.

A força atrativa entre os *nucleons* no núcleo atômico foi identificada, em 1935, como uma nova interação fundamental da natureza, a **força nuclear forte**, pelo japonês Hideki Yukawa (1907-1981).

Mais detalhes sobre a força nuclear forte, as outras interações fundamentais e as partículas elementares serão vistos na disciplina Conceitos de Física Nuclear e de Partículas.

Resumo

A Física Clássica explica os principais fenômenos naturais observados em nosso cotidiano, mas não pode explicar os fenômenos relacionados aos objetos se movendo em grandes velocidades nem os fenômenos relacionados às escalas atômicas e subatômicas. Em nossas aulas vamos estudar os fenômenos que levaram ao desenvolvimento da Física Quântica, começando pela estrutura atômica da matéria e constituição dos átomos. Toda a matéria usual é composta de átomos. Os estudos e desenvolvimentos que levaram à descoberta da estrutura atômica da matéria foram essenciais ao desenvolvimento da Física Quântica, pois a Física Clássica não pode explicar nenhum dos aspectos da estrutura atômica da matéria. As principais descobertas que levaram ao desenvolvimento da teoria atômica da matéria foram: a descoberta do elétron e as medidas de sua razão carga/massa; a descoberta da quantização da carga; a descoberta do núcleo atômico; e as descobertas do próton e do nêutron. Essas descobertas evidenciaram a necessidade de conceitos e de desenvolvimentos além da Física Clássica para explicar os diversos fenômenos relacionados às escalas atômicas e subatômicas.

Autoavaliação

- 1 Por que dizemos que os átomos são os **constituintes fundamentais** e não os **constituintes elementares** da matéria?
- 2 Por que nos experimentos de J. J. Thomson, que determinaram a razão carga/massa do elétron, foi preciso utilizar um campo magnético, se a deflexão do feixe é medida com o feixe sujeito apenas ao campo elétrico?
- 3 Explique por que no modelo atômico de Kelvin-Thomson o ângulo máximo de deflexão das partículas α no experimento de Rutherford deveria ser da ordem de um grau.
- 4 Por que o modelo de átomo com núcleo atômico explica o rebote das partículas α no experimento de Rutherford?
- 5 Explique o que acontece, segundo a Física Clássica, a um elétron inicialmente em uma órbita circular em torno de um núcleo positivamente carregado.
- 6 Se os prótons e nêutrons de um núcleo de hélio estivessem sujeitos apenas às interações gravitacional e elétrica, o que aconteceria a esse núcleo? Justifique sua resposta.

Referências

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. **Física Moderna**: origens clássicas e fundamentos quânticos. Rio de Janeiro: Editora Campus, 2006.

CRUZ-GARRITZ, Diana; CHAMIZO, Jose A.; GARRITZ, Andoni. **Estructura atômica**: um enfoque químico. Wilmington, Delaware: Editora Addison-Wesley Iberoamericana, 1991.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos e partículas. São Paulo: Editora Campus, 1979.

WALLACE, P. R. **Physics**: imagination and reality. [s.l.]: Editora World Scientific, 1991.

A radiação térmica e a quantização da energia

Aula

2



Apresentação

Nesta aula, apresentaremos o fenômeno de radiação térmica, introduziremos o modelo de corpo negro e o papel deste modelo na evolução histórica dos fatos que culminaram com a descoberta da quantização da energia por Max Planck e também analisaremos os princípios básicos sobre os quais foi formulado o postulado de Planck.

Objetivos

- 1** Tomar conhecimento de que a radiação térmica é uma forma de transporte de energia e que é constituída de nada mais e nada menos do que ondas eletromagnéticas.
- 2** Definir o que é um corpo negro e qual a importância deste modelo no desenvolvimento da teoria da radiação térmica.
- 3** Entender conceitualmente a teoria clássica de radiação térmica e a catástrofe do ultravioleta.
- 4** Entender o impacto revolucionário do postulado de Planck e como ele chegou à descoberta da quantização da energia.

A radiação térmica

Quando ligamos o ferro de passar roupa, basta poucos segundos para percebermos pelo tato o calor emitido na forma de radiação. Esse fenômeno existe mesmo que entre a fonte (ferro elétrico ligado) e o detector (pele) não exista nada, mesmo que se elimine o ar (que poderíamos supor ser o meio condutor).

Esse fenômeno não foi descoberto senão até princípios do Século XIX, quando começou a ser investigado juntamente com a invenção das caldeiras e fornos nos primórdios da revolução industrial. Sua importância é fundamental, pois constitui uma forma de transportar energia. Devemos lembrar que só existem duas formas de enviar energia de um ponto a outro do espaço: uma é enviando uma partícula e a outra é enviando uma onda.

Se desejarmos chamar a atenção de uma pessoa distante de nós, podemos lançar um objeto (partícula), gritar-lhe (ondas de som), fazer sinais (ondas luminosas) e, se possível, telefonar-lhe (ondas elétricas e magnéticas através de um cabo) ou enviar-lhe uma mensagem por rádio (ondas eletromagnéticas). Vemos, pois, que as partículas e as ondas constituem as únicas formas para comunicar-se. Devemos frisar que os meios de comunicação modernos existem por causa dos estudos iniciados mais de um século atrás sobre radiação eletromagnética.

Em 1860, Gustav Robert Kirchhoff, o mesmo das leis de Kirchhoff para circuitos elétricos, demonstrou um teorema sobre absorção e emissão de energia por objetos e propôs um desafio aos cientistas da época. A resposta a este desafio foi obtida em 1900 por Max Karl Ernst Ludwig Planck (Figura 1) e daí surgiu a **teoria quântica**.

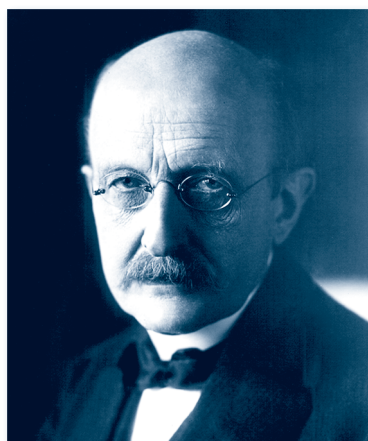


Figura 1 – Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947).

Qualquer sólido absorve certa fração $a(\lambda)$ de radiação de comprimento de onda λ que incide sobre sua superfície e reflete o restante. $a(\lambda)$ é conhecida como o coeficiente de absorção do sólido e depende de cada material.

Kirchhoff reconheceu a importância de corpos para os quais $a(\lambda) = 1$, pois neste caso toda radiação incidente seria absorvida para qualquer comprimento de onda. Um objeto com essa característica é chamado de corpo negro.

Kirchhoff estava interessado no estudo de sistemas onde os corpos estariam em equilíbrio térmico com a radiação a certa temperatura T . Tal equilíbrio implica que a radiação absorvida seja idêntica a emitida (no mesmo tempo), conservando-se o sistema à temperatura constante. Denominaremos $I(\lambda, T)$ a energia radiante emitida por unidade de área, tempo e unidade de intervalo de λ , chamada de **emitância espectral**. Logo, $I(\lambda, T) d\lambda$ corresponde a intensidades compreendidas no intervalo entre λ e $\lambda + d\lambda$, possuindo um valor grande para comprimentos de onda emitidos com maior predominância e um valor pequeno para aquelas radiações de comprimentos de onda emitidos em menor proporção. Por exemplo, a cor da resistência de um ferro elétrico é vermelho-laranja, porque, da luz visível, a maior parte da radiação é emitida nesses comprimentos de onda. Um metal se põe em vermelho vivo pela mesma razão e, quando se aumenta ainda mais a temperatura, apresenta uma cor branca, o que indica que estão sendo emitidos por igual todos os comprimentos de onda do espectro visível.

O que Kirchhoff, em 1860, postulou foi que a razão entre a emitância espectral e o coeficiente de absorção, $I(\lambda, T)/a(\lambda)$, não depende das características do corpo emissor.

Para um corpo negro, por ser $a(\lambda) = 1$, resulta que a energia emitida para uma dada temperatura dependeria só do comprimento de onda. O desafio proposto por Kirchhoff foi encontrar $I(\lambda, T)$ para um corpo negro.

Em 1879, Josef Stefan (Figura 2) sugeriu, a partir de dados obtidos experimentalmente, que a energia total irradiada por corpos quentes é proporcional a quarta potência da temperatura. Cinco anos mais tarde, Ludwig Boltzmann demonstrou que a conjectura de Stefan era certa, mas só para o corpo negro. Daí a lei de Stefan-Boltzmann para corpos negros:

$$I_{\text{total}}(T) = \int_0^{\infty} I(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4, \quad \text{Eq. (1)}$$

onde I_{total} é a intensidade total ou a energia total irradiada por unidade de área e de tempo, e σ é uma constante física fundamental chamada de constante de Stefan-Boltzmann:

$$\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}. \quad \text{Eq. (2)}$$



Figura 2 – Josef Stefan (1835-1893).

Para corpos diferentes do corpo negro, estabelece-se um fator de correção, ao qual se denomina **emissividade** ϵ ($\epsilon = 1$ para o corpo negro) e nos indica quão perto ou longe é o comportamento de um objeto, com respeito ao modelo teórico do corpo negro. Assim, temos a Tabela 1 com as emissividades de alguns materiais.

Tabela 1 – Emissividades de alguns materiais.

	$T(^{\circ}C)$	ϵ
Água	20	0,95
Alumínio	25	0,02
Pinturas coloridas	25	0,90-0,96
Asfalto	40	0,93
Pele humana	37	0,97

De acordo com isso, sempre e quando o objeto que emite energia for pequeno em comparação com sua vizinhança, pode-se calcular ΔI_{total} como a potência “líquida” de emissão do corpo menos a de sua vizinhança (que é o que o corpo absorve). Se o objeto e seus arredores possuem valores de emissividades muito próximos, podemos aproximá-los por um valor médio, e assim, teremos:

$$\Delta I_{total} = \epsilon \sigma (T_1^4 - T_2^4), \quad \text{Eq. (3)}$$

onde T_1 é a temperatura do emissor e T_2 a do receptor. Ambas as temperaturas devem estar na unidade de Kelvin.



Atividade 1

Estime a intensidade da radiação líquida emitida pelo corpo humano se este se encontra em uma sala a $25^{\circ}C$.



Atividade 2

Se a área de uma pessoa (70 kg de peso e $1,70 \text{ m}$ de altura) é aproximadamente $1,53 \text{ m}^2$, estime a energia emitida por unidade de tempo (potência).

A lei de Stefan-Boltzmann dava uma pista importante sobre a função $I(\lambda, T)$ buscada: sua integral sobre todo o espectro de comprimento de onda devia ser igual a σT^4 !

Uma das maiores dificuldades experimentais para achar a função de Kirchhoff consistiu em encontrar um corpo negro, o qual foi encontrado somente em 1895.

Numa boa aproximação, um corpo negro é uma cavidade completamente fechada exceto por uma pequena abertura, de área conhecida, através da qual a radiação pode entrar ou sair.

A radiação que entra na cavidade tem pouca chance de ser refletida para fora imediatamente, o que implica $a(\lambda) = 1$. No interior da cavidade, a radiação pode ser absorvida ou refletida repetidas vezes nas paredes. Como o corpo permanece a uma temperatura fixa, as paredes absorvem radiação na mesma rapidez que emitem radiação, ou seja, existe um equilíbrio entre a radiação e as paredes da cavidade. Assim, a radiação que sai pela abertura é uma boa amostra da radiação que se encontra no interior da cavidade (Figura 3).

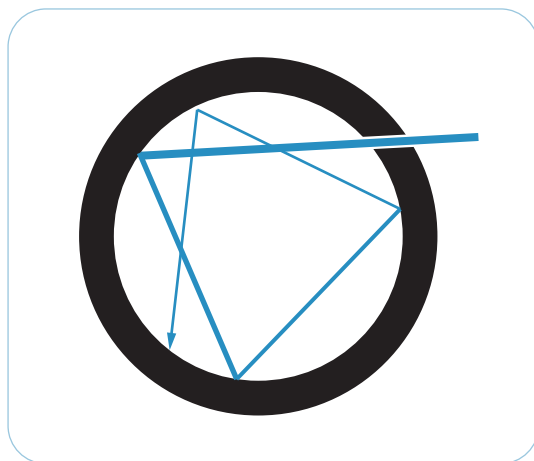


Figura 3 – Modelo de corpo negro.

A teoria clássica e a catástrofe do ultravioleta

Em 1893, Wilhelm Wien (Figura 4) encontrou que $I(\lambda, T)$ é uma função que tem um valor máximo para um comprimento de onda inversamente proporcional à temperatura:

$$\lambda_m = \frac{\alpha}{T}. \quad \text{Eq. (4)}$$

A Equação 4 é conhecida como a **lei do deslocamento de Wien**. A Figura 5 apresenta a forma experimental que toma a função $I(\lambda, T)$ a três diferentes temperaturas: 1000, 1250 e 1400 K. Note que o máximo de cada curva acontece para valores cada vez menores de λ ao aumentar T . Também observe que a área de cada curva aumenta significativamente quando se aumenta a temperatura, o que é coerente com a lei de Stefan-Boltzmann.

À medida que a temperatura aumenta, o pico da curva da emitância espectral se torna cada vez mais elevado e se desloca para comprimentos de onda menores. As linhas verticais tracejadas indicam os valores de λ_m para cada temperatura.



Figura 4 – Wilhelm Wien (1864-1928).

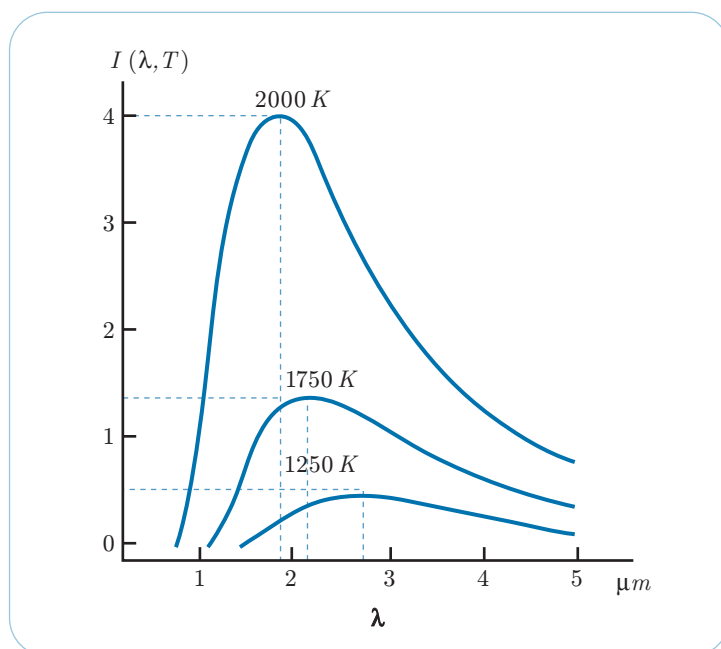


Figura 5 – Emitância espectral em função do comprimento de onda para um corpo negro a três temperaturas.

Ainda, em 1896, Wien propôs a seguinte forma para $I(\lambda, T)$:

$$I^W(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5 e^{C_2/\lambda T}}, \quad \text{Eq. (5)}$$

onde C_1 e C_2 são constantes. Sua proposta estava bastante de acordo com os resultados obtidos no mesmo ano por Friedrich Paschen (1865-1947), que analisou a distribuição de comprimentos de onda (λ entre 1 e $8\mu\text{m}$) emitida pela cavidade a temperaturas entre 390 e 1397 K. Desses experimentos, obtiveram-se as constantes C_1 e C_2 , assim como o α da lei de Wien (o valor atualmente aceito é $\alpha = 2,9 \times 10^{-3} \text{m} \cdot \text{K}$).

Quatro anos depois, em 1900, Lord Rayleigh (1842-1919) propôs uma teoria para a emissão da radiação do corpo negro. Rayleigh assumiu que as ondas eram produto das vibrações das partículas carregadas (osciladores) do corpo negro e repartiu a energia de vibração equivalentemente entre os diversos modos de vibração destes osciladores. Essa hipótese, conhecida como princípio de equipartição, havia sido usada extensamente por Boltzmann em seus estudos em termodinâmica estatística. A partir desses postulados, Rayleigh obteve:

$$I^R(\lambda, T) = \frac{bT}{\lambda^4}, \quad \text{Eq. (6)}$$

onde b é uma constante. A Equação 6 é inaceitável, pois ao diminuir λ a densidade de energia crescerá sem limite, o que não concordava com os resultados experimentais nem com a lei de Stefan-Boltzmann. Posteriormente, se denominou este comportamento singular da emitância espectral para pequenos comprimentos de onda como **catástrofe da ultravioleta**, em alusão ao fato que a luz na região de comprimentos de onda menores que a da luz visível e maiores que a dos raios-X é chamada de ultravioleta.

Dando-se conta de que algo andava mal (como veremos, o que estava mal era a Física Clássica), Rayleigh entendeu seu resultado como válido no limite de comprimentos de onda grande e introduziu uma exponencial que corrigiria a catástrofe da ultravioleta, ou seja:

$$I^R(\lambda, T) = \frac{bT}{\lambda^4 e^{d/\lambda T}}, \quad \text{Eq. (7)}$$

sendo d outra constante.

O curioso é que a fórmula de Rayleigh é parecida com a de Wien, exceto pela potência de λ no denominador e que resulta mais apropriada para representar os resultados para grandes comprimentos de onda, uma vez que não decai tão rapidamente como a de Wien que dá resultados menores que os experimentais.

Observação – Somente em 1905 Rayleigh reconheceu que do ponto de vista clássico não havia nenhum erro na Equação 6. Ele encontrou o valor de b , o qual foi corrigido em uma publicação posterior por James Hopwood Jeans, razão pela qual a expressão:

$$I^{RJ}(\lambda, T) = 2\pi \frac{ckT}{\lambda^4} \quad \text{Eq. (8)}$$

é conhecida como distribuição de Rayleigh-Jeans, apesar de que no mesmo ano foi também obtida por Albert Einstein. Essa expressão mostrou ser correta no limite de grandes comprimentos de onda, como veremos mais adiante. Nessa equação, $k = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ é a constante de Boltzmann.

Parecia que Wien havia resolvido o problema, porém três anos depois em Berlim, Otto Lummer, Ernst Pringsheim, Heinrich Rubens e Ferdinand Kurlbaum mostraram que a Equação 6 falhava para temperaturas altas. Max Planck, que mantinha um estreito contato com esses pesquisadores experimentais, em 19 de outubro de 1900, propôs uma nova equação para a densidade de energia:

$$I^P(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{C_2/\lambda T} - 1}. \quad \text{Eq. (9)}$$

Rubens e Kurlbaum mostraram que a equação de Max Planck concordava perfeitamente com os resultados experimentais.

Todas as medidas experimentais posteriores não fizeram mais que confirmar que a Equação 9 seguia perfeitamente os resultados reais. Planck havia encontrado, quarenta anos depois, a solução para o problema da radiação do corpo negro.

Veja que interessante as Equações 5 e 9 só diferem pelo fator “-1” no denominador da expressão de Planck! Veremos a seguir de onde vem este “-1” e quais as suas implicações físicas.

O postulado de Planck

O sucesso extraordinário da fórmula de Planck, Equação 9, seria suficiente para colocá-lo em um lugar permanente nos anais da Física. A genialidade de Planck foi tentar dar sentido físico a essa fórmula. Até então, apenas a fórmula de Rayleigh tinha sido obtida a partir de argumentos físicos. Desde que a descrição clássica conduzia a catástrofe do ultravioleta, Planck foi obrigado a pensar em uma abordagem não-clássica. Que suposições teóricas Planck considerou para justificar sua fórmula?

Planck sabia que a radiação dentro da cavidade estava sendo continuamente emitida e absorvida pelo material da cavidade. Naquele tempo, os físicos pensavam que os átomos do material absorviam ou emitiam radiação como osciladores harmônicos (sistema massa-mola), que estavam em equilíbrio com a radiação emitindo e absorvendo energia continuamente. Ele sabia que radiações eram ondas eletromagnéticas e que a cavidade estava cheia destas ondas.

Muitas evidências experimentais tinham consolidado a natureza ondulatória das ondas eletromagnéticas (essas evidências serão discutidas na Aula 3 – O efeito fotoelétrico e o efeito Compton). Planck não poderia ignorar essas informações e então manteve a natureza ondulatória da radiação. Mas o mecanismo oscilatório de absorção e emissão de ondas eletromagnéticas não passava de um modelo teórico. Ele, portanto, se aventurou a propor leis que governassem seu comportamento. Tentou várias alternativas e falhou, até chegar a sua fórmula para o espectro do corpo negro. Mas, para isso, em um ato de desespero, como ele confessou, sugeriu que o oscilador harmônico não podia ter qualquer energia, mas apenas múltiplos inteiros de um *quantum* de energia:

$$\varepsilon_0 = h\nu, \quad \text{Eq. (10)}$$

onde ν é a frequência natural do oscilador e h uma constante a ser determinada.

Em outras palavras, Planck quantizou as energias permitidas por um oscilador. Então, os osciladores eram estritamente de natureza não-clássica com energias $\varepsilon = nh\nu$, sendo n um inteiro. Esses osciladores estavam em equilíbrio térmico em qualquer temperatura. Portanto, Planck invocou a distribuição estatística de Boltzmann para descrevê-los. De acordo com a estatística de Boltzmann, o número de osciladores com energia ε_n varia exponencialmente como:

$$N_n = N_0 e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} = N_0 e^{-\frac{nh\nu}{kT}}, \quad \text{Eq. (11)}$$

com N_0 sendo o número total de osciladores com energia zero. Então, a energia média $\bar{\varepsilon}$ do sistema de osciladores é:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\text{Energia total}}{\text{Número total de osciladores}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} N_n \varepsilon_n}{\sum_{n=0}^{\infty} N_n} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n e^{-\beta \varepsilon_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \varepsilon_n}}. \quad \text{Eq. (12)}$$

Essa soma aparentemente complexa pode ser simplificada. Note que a expressão acima pode ser reescrita como:

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{d}{d\beta} \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \varepsilon_n} \right). \quad \text{Eq. (13)}$$

Agora, uma vez que $\varepsilon = nh\nu$, temos que:

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta nh\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta h\nu} \right)^n, \quad \text{Eq. (14)}$$

e lembrando que a função $(1-x)^{-1}$ expandida em série de Maclaurin tem a forma:

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n, \quad \text{Eq. (15)}$$

temos, se $x = \exp(-\beta h\nu)$, que a Equação 13 pode ser reescrita como:

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{d}{d\beta} \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}} \right) \quad \text{Eq. (16)}$$

Enfim, calculando a derivada acima e colocando de volta a expressão em termos de kT , temos:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{hv}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}. \quad \text{Eq. (17)}$$

Desde que o comprimento de onda esteja relacionado com a frequência por meio da relação $\lambda = c/\nu$, a Equação 17 é igual a:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{hc}{\lambda} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}. \quad \text{Eq. (18)}$$

Planck repetiu as contas de Rayleigh e encontrou a seguinte relação para a densidade de energia por unidade de tempo:

$$I(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \bar{\varepsilon}, \quad \text{Eq. (19)}$$

ou seja,

$$I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}. \quad \text{Eq. (20)}$$

Que nada mais é do que a fórmula de Planck, a Equação 9, com $C_1 = 2\pi hc^2$ e $C_2 = hc/k$!

Assim, o modelo do oscilador harmônico quantizado levou Planck à fórmula empírica que ele havia proposto para reproduzir os resultados experimentais para todos os comprimentos de onda.

Você demonstrará em uma das questões da autoavaliação que $I(\lambda, T)$ tem um valor máximo para o comprimento de onda:

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{4,965kT}, \quad \text{Eq. (21)}$$

ou seja, a fórmula de Planck satisfaz a lei de deslocamento de Wien, Equação 4.





Atividade 3

Verifique que a energia total irradiada por unidade de tempo e unidade de área, obtida integrando a Equação 20 sobre toda faixa de comprimento de onda,

$$I_{\text{total}}(T) = \int_0^{\infty} I(\lambda, T) d\lambda, \quad \text{Eq. (22)}$$

leva à lei de Stefan-Boltzmann:

$$I_{\text{total}}(T) = \frac{8}{15} \left(\frac{\pi^5 k^4}{c^3 h^3} \right) T^4, \quad \text{Eq. (23)}$$

e, portanto,

$$\sigma = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3}. \quad \text{Eq. (24)}$$

Dicas para a resolução da atividade

- 1) Faça a seguinte mudança de variável: $x = hc/\lambda kT$, escrevendo a integral em função de x . Como ficam os limites de integração?
- 2) Use a técnica de expansão em série de Maclaurin (reveja a disciplina Cálculo I) para demonstrar que:

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}. \quad \text{Eq. (25)}$$

- 3) Usando a Equação 25, você deve chegar a uma soma de integrais do tipo:

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-nx} dx. \quad \text{Eq. (26)}$$

Se não conseguiu, refaça os passos anteriores com atenção. Se conseguiu, continue. Use a tabela de integrais para obter o resultado para essa integral para n qualquer.

- 4) Finalmente, verifique que a soma em n converge para o valor numérico “8/15” encontrado na Equação 23.

Planck usou o valor $T\lambda_{\text{max}}$, obtido por Lummer e Pringsheim em 1900, como também o valor σ , obtido da radiação total emitida por um corpo negro como o medido por Kurlbaum em 1898. E com essas informações, obteve os seguintes valores para as constantes de Boltzmann e de Planck, como veio a ser chamada posteriormente a constante h :

$$k = 1,346 \times 10^{-23} \text{ J/K},$$

$$h = 6,550 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}.$$

A concordância tão próxima entre o valor calculado e os valores conhecidos na época para a constante de Boltzmann k foi um dos sucessos da fórmula de Planck. Isso, provavelmente, o encorajou a divulgar sua descoberta no encontro alemão de Física que ocorreu em 14 de Dezembro de 1900. Foi nessa data que a quantização da energia do oscilador harmônico foi apresentada pela primeira vez, daí o motivo de ser considerado o dia do nascimento da Teoria Quântica. Planck comunicou seu achado na Academia de Ciências de Berlim em 1900 e publicou seu trabalho em 1901.

Implicações do postulado de Planck

Por mais de uma década, Planck relutou em aceitar a ideia revolucionária por trás da quantização da energia. Ele tentou encaixar a ideia quântica dentro da teoria clássica, e a cada sucessivo fracasso produziu novas ideias e técnicas que a teoria quântica mais tarde adotou. Foi durante esse período de relutância que Planck como editor do jornal de pesquisa alemão *Annalen der Physik* recebeu o primeiro artigo de Einstein sobre relatividade, e defendeu vigorosamente esse trabalho. Por outro lado, paradoxalmente, resistiu às ideias propostas por Albert Einstein sobre a teoria quântica da radiação, e que mais tarde confirmaram e estenderam o seu próprio trabalho.

Einstein, cuja visão do eletromagnetismo e da mecânica estatística talvez fosse inigualável nessa época, percebeu que o resultado de Planck exigia a necessidade de uma reformulação completa da estatística e do eletromagnetismo clássicos. Ele formulou previsões e interpretações de muitos fenômenos que foram mais tarde confirmados experimentalmente, entre eles o efeito fotoelétrico, que veremos na próxima aula. Planck foi agraciado, por seu postulado da quantização da energia, com o Prêmio Nobel de Física em 1918.

Resumo

Nesta aula, você estudou sobre o fenômeno da radiação térmica e aprendeu que tal radiação é constituída de ondas eletromagnéticas. Foi definido o modelo de corpo negro e mostrado como este modelo idealizado levou a uma das maiores descobertas da ciência, a quantização da energia. A intensidade total (potência média irradiada por área) irradiada pela superfície de um corpo negro é proporcional à quarta potência da temperatura absoluta T . O comprimento de onda λ_m em que um corpo negro irradia mais intensamente é inversamente proporcional a T , e é dada pela lei do deslocamento de Wien. Planck explicou a curva experimental da emitância espectral postulando a quantização da energia.

Autoavaliação

1

Demonstre que a expressão de Wien (Equação 5) tem um máximo que satisfaz o resultado experimental, a lei de deslocamento de Wien,

$$\lambda_{\max} = \frac{2,90 \times 10^{-3}}{T} m \cdot K$$

desde que $C_2 = 1,4489 \times 10^{-5} K$.

2

Demonstre que a fórmula de Planck (Equação 9) também satisfaz a lei de Wien, se $C_2 = 1,4388 \times 10^{-2} K$.

3

Supondo que o Sol emita radiação como se fosse um corpo negro:

- estime qual é a temperatura de sua superfície, sabendo que a radiação com maior intensidade é aquela com $\lambda_{\max} = 500 \text{ nm}$;
- qual é a potência total irradiada por unidade de área?

4

Um corpo negro a 2500 K emite raios-X e ondas de rádio?

Referências

CRUZ-GARRITZ, Diana; CHAMIZO, Jose A.; GARRITZ, Andoni. **Estructura atômica**: um enfoque químico. Wilmington, Delaware: Editora Addison-Wesley Iberoamericana, 1991.

EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois, 1979.

YOUNG, Hugh D.; FREEDMAN, Roger A. **Física IV**: ótica e física moderna: Sears e Zemansky. 12. ed. São Paulo: Editora Pearson Education, 2009.

O efeito fotoelétrico e o efeito Compton

Aula

3



Apresentação

A luz é algo muito importante e comum em nosso dia-a-dia. É ela que estimula as terminações nervosas de nossos olhos e nos permite enxergar o mundo à nossa volta. Mas apesar da luz e da nossa noção de luz serem bastante comuns, o comportamento e a natureza da luz são bastante complicados.

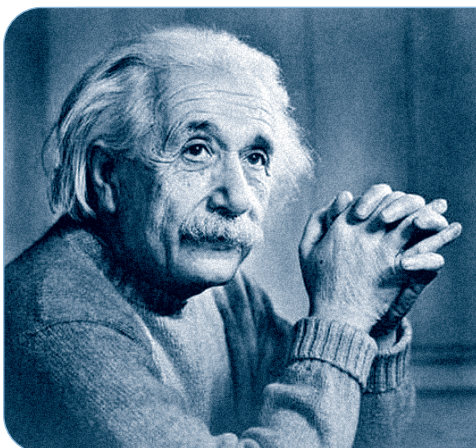
Nesta aula, vamos estudar e entender o comportamento da luz, como ela se propaga e como interage. Dessa forma, vamos tentar entender qual a verdadeira natureza da luz e perceber como a evolução histórica de seu estudo culminou na atual descrição de suas propriedades e perceber a importância essencial da descrição onda-partícula da luz para a Física Quântica.

Objetivos



- 1 Conhecer o desenvolvimento histórico do conceito de luz e do debate sobre sua natureza corpuscular *versus* ondulatória.
- 2 Perceber que a teoria corpuscular e as leis de conservação da energia e do momento explicam a propagação da luz e os fenômenos de reflexão e difração.
- 3 Aprender que o modelo ondulatório também explica a propagação em linha reta, a reflexão e a refração da luz.
- 4 Entender como a observação da difração e da interferência da luz levou ao estabelecimento da concepção ondulatória da luz.
- 5 Estudar os efeitos fotoelétrico e Compton que resgataram o caráter corpuscular da luz.
- 6 Entender a natureza dual da luz e das ondas eletromagnéticas.

Introdução histórica



“O fato mais incompreensível na natureza é ela poder ser compreendida.” Albert Einstein (1879-1955).

O debate científico envolvendo a dicotomia **discreto versus contínuo** não ficou restrito ao estudo e descrição da matéria. A natureza da luz também esteve no centro dessa polêmica. Esse debate, para a luz, surgiu de conjecturas filosóficas acerca do funcionamento da visão e cresceu com o estudo dos aspectos relacionados à propagação da luz e aos fenômenos luminosos.

Devemos frisar que os aspectos mais simples relacionados à propagação da luz, como a propagação em linha reta e a passagem de um meio para outro, são parcialmente conhecidos desde a Antiguidade. Desde o período pré-socrático já se especulava, filosoficamente, sobre a natureza discreta ou contínua da luz para explicar o mecanismo da visão.

Havia duas correntes sobre a natureza da luz. A primeira, atribuída aos pitagóricos, sustentava que a luz era um feixe, como uma substância contínua, que fluía desde a fonte até os objetos, numa propagação análoga à das ondas na superfície de um lago. A segunda corrente, atribuída aos atomistas, defendia que a luz era formada de pequenos corpúsculos.

O debate sobre a natureza da luz, nessa época, era pura especulação filosófica.

Euclides de Alexandria (360 a.C. - 295 a.C.) tornou essa discussão menos especulativa ao apresentar a primeira teoria matemática da visão, concentrando-se em apresentar uma fundamentação geométrica e descritiva para a ótica e ignorando a causa primeira dos fenômenos luminosos. Ao aplicar a geometria ao estudo da ótica, Euclides mostrou que esses fenômenos podiam ser descritos qualitativa e quantitativamente.

Durante a Idade Média, a luz despertou o interesse de diversos estudiosos e, por se propagar na Terra e no Céu, era tida como divina. Nessa época não houve avanço importante na compreensão dos fenômenos luminosos ou da natureza da luz.

A ótica só começou a se edificar em bases sólidas no Século XVII, quando o holandês Willebrord van Roijen Snell (1591-1626), em 1621, estabeleceu uma das primeiras leis quantitativas da Física, a **lei da refração**, que trata a mudança na direção de um raio de luz ao passar de um meio transparente para outro. Detalhes sobre a refração da luz e sobre os outros

fenômenos luminosos e ondulatórios foram vistos na disciplina Ondas, Som e Luz. Embora estabelecida por Snell, a lei da refração só foi publicada por René Descartes (1596-1650) em 1637. Deve-se a Descartes a primeira importante contribuição moderna à compreensão da natureza dos fenômenos luminosos.

Desde Snell e Descartes, diversos cientistas contribuíram para o estudo da propagação da luz e dos fenômenos luminosos. Foi ainda no Século XVII que estes estudos fizeram surgir um intenso debate sobre a natureza corpuscular ou ondulatória da luz. Esse debate ficou conhecido como a polêmica Newton-Huygens.

Embora Isaac Newton (1643-1727) seja considerado o principal partidário da teoria corpuscular da luz, ele não tinha uma opinião definitiva sobre a natureza da luz. Em seu livro *Ótica*, Newton relata seus resultados sobre a decomposição espectral da luz branca e observações de efeitos ondulatórios. As suas ideias sobre a luz combinavam as teorias corpuscular e ondulatória, lembrando um pouco a atual teoria quântica.

Uma das hipóteses de Newton sobre a natureza da luz era que ela se constituía de feixes de corpúsculos que se deslocavam em linha reta. Esses corpúsculos poderiam penetrar em materiais transparentes e eram refletidos pelas superfícies dos materiais opacos. Essa teoria corpuscular da luz explicava fenômenos como a reflexão e a refração da luz que seriam consequências diretas das leis de conservação do momento e da energia para o movimento das partículas.

Em 1690, em seu livro *Tratado sobre a luz*, Christiaan Huygens (1629-1695) retoma o ponto de vista ondulatório para a luz conseguindo explicar os fenômenos de reflexão e de refração da luz.

Se a propagação da luz era um fenômeno ondulatório, por que a luz não se desviaria das extremidades de um obstáculo como fazem as ondas na superfície de um lago ou como as ondas sonoras? Ou seja, por que a luz não apresentava o fenômeno de difração? Este fato e o prestígio de Newton fizeram com que a teoria ondulatória da luz não fosse prontamente aceita.

Na verdade, a difração é observada quando as dimensões de uma fenda ou obstáculo por onde uma onda passa é comparável ao seu comprimento de onda. No caso da luz visível, isso significa comprimentos entre $4,0 \times 10^{-7}$ e $7,0 \times 10^{-7}$ metros.



Atividade 1

Explique o porquê de ser:

- a) fácil observarmos a interferência e a difração de ondas na superfície de um lago ou de ondas sonoras;
- b) tão difícil observarmos a interferência e a difração da luz.

Os fenômenos de difração e de interferência da luz foram observados por Thomas Young (1773-1829) entre os anos de 1800 e 1803 e, mais acuradamente, por Augustin-Jean Fresnel (1788-1827) em 1826. Fresnel também pôde concluir, em 1821, que a luz consiste de ondas transversais, diferentemente do som, que são ondas longitudinais. Os experimentos de Young e Fresnel serão estudados mais detalhadamente na disciplina Física Moderna Experimental.

Após os experimentos de Young e Fresnel a teoria ondulatória da luz ficou fortemente estabelecida.

Um grande passo no entendimento e no estudo da ótica foi dado por James Clerk Maxwell (1831-1879), que demonstrou que os campos elétricos e magnéticos obedecem a equações de onda e se propagam, no vácuo, com velocidade igual à velocidade da luz. Ou seja, ele mostrou que a luz é uma onda eletromagnética produzida por cargas elétricas em movimento. Essa demonstração determinou a união dos ramos da ótica e do eletromagnetismo, como foi visto na disciplina Eletromagnetismo.

A dedução de Maxwell foi comprovada por Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894), que produziu e detectou ondas eletromagnéticas em laboratório. Em suas experiências, Hertz produzia uma descarga oscilante entre dois eletrodos para gerar as ondas eletromagnéticas e as detectava usando uma antena ressonante, onde a detecção também era acompanhada de uma faísca entre eletrodos. Ele também observou que a faísca de detecção saltava com mais dificuldade quando os eletrodos da antena receptora não estavam expostos à luz (predominantemente ultravioleta) proveniente da faísca primária. Assim, ao comprovar a teoria de Maxwell, Hertz descobria o efeito fotoelétrico, uma das primeiras evidências experimentais da quantização da luz.

A união dos ramos da ótica e do eletromagnetismo foi muito importante para a Física, pois garantiu que todos os fenômenos estudados para a luz ocorrem, nas condições apropriadas, para as outras ondas eletromagnéticas. Também temos que as equações e previsões para ondas eletromagnéticas são aplicáveis à luz.

O efeito fotoelétrico

O fenômeno do efeito fotoelétrico consiste na liberação de elétrons pela superfície de um metal após a absorção da energia proveniente da luz (radiação eletromagnética) incidente sobre ele, de tal modo que a energia total da luz é parcialmente transformada em energia cinética dos elétrons expelidos. Após ser descoberto por Hertz, esse fenômeno foi extensivamente estudado por Philipp Eduard Anton von Lenard (1862-1947) em 1902, e por Robert Andrews Millikan (o mesmo cientista que determinou a carga do elétron e a quantização da carga elétrica) entre os anos de 1906 e 1916.

A constatação de que as partículas emitidas eram elétrons se deu em 1899, quando J. J. Thomson, que havia determinado a razão carga/massa para o elétron (Aula 1 – O átomo e a Física), ao expor à radiação ultravioleta uma superfície metálica no interior de um tubo de Crookes, estabeleceu que essas partículas eram de mesma natureza daquelas que constituíam os raios catódicos. Esses elétrons são, normalmente, chamados de **fotoelétrons** por terem sido ejetados do material devido à interação com os *quanta* de luz que são chamados de **fótons**.

Numa experiência típica para observar o efeito fotoelétrico, colocam-se os eletrodos dentro de uma ampola transparente de quartzo, dentro da qual é feito vácuo. Entre os eletrodos estabelece-se uma diferença de potencial V . Iluminando-se o cátodo com luz de frequência ν e intensidade I_0 , mede-se a corrente elétrica i gerada no circuito com a ajuda de um amperímetro. Esse esquema é mostrado na Figura 1, onde também vemos a presença de um voltímetro para se determinar a diferença de potencial à qual são submetidos os eletrodos.

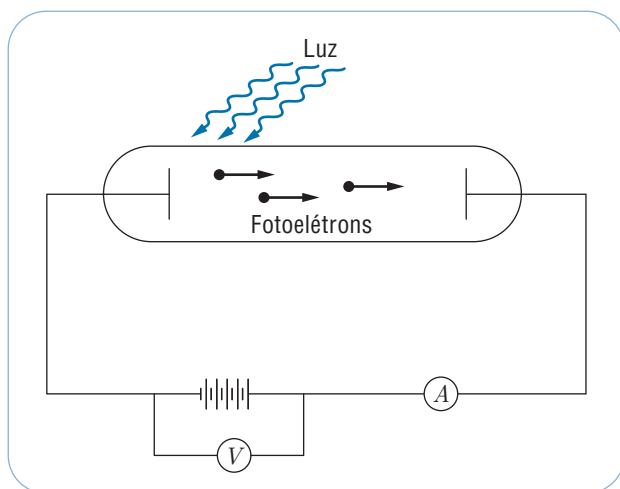


Figura 1 – Esquema para estudo do efeito fotoelétrico.

Segundo a Física Clássica, onde a luz era considerada uma onda, havia diversas previsões para os resultados do experimento do efeito fotoelétrico. As características apontadas para o experimento pelo modelo ondulatório da luz são completamente contraditórias aos resultados observados. Comparemos as previsões clássicas com os respectivos resultados experimentais:

1ª previsão clássica: a energia cinética dos fotoelétrons deve depender da intensidade da luz, pois os elétrons devem absorver energia continuamente das ondas eletromagnéticas e uma luz mais intensa deve transferir energia mais rapidamente para o metal e os elétrons devem ser emitidos com maior energia cinética.

Resultado experimental: a energia cinética máxima dos elétrons é independente da intensidade luminosa.

2ª previsão clássica: para uma luz de intensidade muito fraca deve haver um intervalo de tempo mensurável entre a incidência da luz e a ejeção de um elétron, pois os elétrons precisam absorver a radiação incidente antes de adquirirem energia suficiente para escapar do metal.

Resultado experimental: elétrons são emitidos da superfície quase instantaneamente para qualquer intensidade luminosa.

3ª previsão clássica: os elétrons devem ser ejetados do metal para qualquer frequência da luz incidente, desde que a intensidade seja alta o suficiente, pois a energia está sendo transferida ao metal independentemente da frequência.

Resultado experimental: não há elétrons ejetados se a frequência da luz incidente está abaixo de uma **frequência de corte**, ν_c , que é característica do material que está sendo iluminado, mesmo se a intensidade luminosa é muito alta.

4ª previsão clássica: não deve haver relação entre a energia cinética máxima dos elétrons ejetados e a frequência da luz, pois a energia cinética deve estar relacionada com a intensidade da luz.

Resultado experimental: a energia cinética máxima dos fotoelétrons aumenta com o aumento da frequência da luz.

Os resultados observados nos experimentos do efeito fotoelétrico têm o aspecto mostrado nos gráficos das Figuras 2(a) e 2(b), onde são mostradas a intensidade de corrente elétrica i medida em função da diferença de potencial V entre os eletrodos.

Para I_0 e ν fixos em um dado material do cátodo, todos os fotoelétrons arrancados pela luz são coletados pelo ânodo quando a diferença de potencial V é positiva ou nula, correspondendo a uma corrente constante i_s , que é chamada **corrente de saturação**. Se a diferença de potencial for tomada negativa, para frear os elétrons no lugar de acelerá-los, a corrente continua passando no mesmo sentido, mas vai diminuindo de intensidade até se anular para $V = -V_c$. O potencial V_c é chamado **potencial de corte** ou **potencial de freamento**. Esses comportamentos são mostrados

no gráfico da Figura 2(a). Nela, vemos também que se a intensidade da luz é aumentada, para I'_0 , por exemplo, o aspecto da curva permanece o mesmo, assim como o valor do potencial de corte, mas a corrente de saturação irá aumentar.

Se, ao invés de mudarmos a intensidade da luz incidente mudamos a sua frequência, o aspecto qualitativo da curva permanece o mesmo, mas o valor do potencial de corte irá aumentar com o aumento da frequência e a corrente de saturação também aumenta. Esse comportamento é mostrado no gráfico da Figura 2(b).

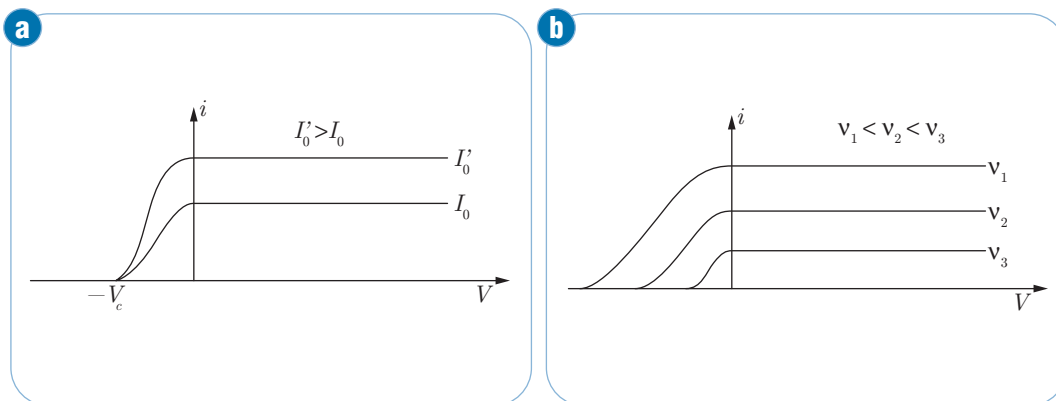


Figura 2 – Gráficos da corrente elétrica em função da diferença de potencial V entre os eletrodos no efeito fotoelétrico: (a) para duas intensidades de luz incidente (I_0 e I'_0) com a mesma frequência; (b) para diferentes frequências de luz incidente (ν_1 , ν_2 e ν_3), mas com a mesma intensidade.

Esses resultados para os experimentos do efeito fotoelétrico não são passíveis de explicação segundo o modelo ondulatório da luz.

A explicação para o efeito fotoelétrico foi dada por Albert Einstein num trabalho publicado em 1905. Einstein propôs uma teoria baseada numa extensão mais audaciosa das ideias de Planck sobre quantização (lembre-se da Aula 2 – A radiação térmica e a quantização da energia).

Para Einstein, a radiação eletromagnética de frequência consiste de *quanta* de energia:

$$E = h\nu, \quad \text{Eq. (1)}$$

onde h é a constante de Planck.

De acordo com Einstein, cada *quantum* de energia, ao penetrar na superfície do metal, interage com um único elétron transmitindo-lhe toda a sua energia. Mas para um elétron abandonar a superfície do metal é necessário que ele adquira uma quantidade mínima de energia ϕ , denominada função trabalho e que só depende do tipo de metal. Na Tabela 1, temos os valores da função trabalho para alguns metais. Lembre-se que 1 eV é a energia adquirida por um elétron ao percorrer uma diferença de potencial de 1 volt , ou seja, $1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$.

Tabela 1 - Função trabalho de alguns metais.

Metal	ϕ (eV)
Alumínio	4,08
Cobre	4,70
Zinco	4,31
Prata	4,73
Platina	6,35
Chumbo	4,14
Ferro	4,50

Voltando à análise do efeito fotoelétrico e admitindo que é pouco provável que um único elétron absorva dois ou mais *quanta* de energia, os elétrons só conseguem abandonar o metal se $h\nu > \phi$. E, portanto, aqueles que escapam têm uma energia cinética máxima igual a:

$$K_{max} = h\nu - \phi. \quad \text{Eq. (2)}$$

A Equação 2 está de acordo com o fato de que se aumentando a intensidade da luz e, conseqüentemente, o número de *quanta* de luz, aumenta-se o número de elétrons ejetados e, portanto, aumenta-se a corrente elétrica observada, mas não a energia cinética máxima destes fotoelétrons.

Este modelo corpuscular para a luz explica todas as características do efeito fotoelétrico que não são explicadas pelo modelo ondulatório. Vejamos:

- 1)** A Equação 2 mostra que a energia cinética máxima dos fotoelétrons depende da frequência da luz incidente e não de sua intensidade.
- 2)** Como cada *quantum* de luz interage com um único elétron, não há intervalo de tempo entre a incidência da luz e a ejeção dos elétrons.
- 3)** A ejeção dos elétrons depende da frequência e não da intensidade, pois o *quantum* de luz precisa ter uma energia maior que a função trabalho do material para conseguir arrancar elétrons. Se a intensidade da luz é aumentada, apenas o número de *quanta* de luz é aumentado e não a energia de cada quantum.
- 4)** A Equação 2 também expressa o fato da energia dos fotoelétrons aumentar com o aumento da frequência da luz.



Atividade 2

Um estudante quer ejetar elétrons de uma placa metálica usando radiação de microondas. Será que terá êxito em sua experiência? Justifique.

Além de explicar as características do efeito fotoelétrico, o modelo proposto por Einstein fez uma interessante previsão.

Se considerarmos que o potencial de corte, V_c , necessário para deter o fluxo de elétrons, é determinado pela energia potencial elétrica:

$$U = eV_c, \quad \text{Eq. (3)}$$

e que esta deve ser igual à energia cinética máxima dos fotoelétrons dada pela Equação 2. Assim, podemos escrever:

$$eV_c = h\nu - \phi. \quad \text{Eq. (4)}$$

Isolando o potencial de corte na Equação 4, podemos reescrevê-la como:

$$V_c = \frac{h}{e}\nu - \frac{\phi}{e}. \quad \text{Eq. (5)}$$

Da Equação 5 percebemos que um gráfico de $V_c \times \nu$ deve ser uma reta com coeficiente angular independente da natureza da substância e igual a h/e .

Conforme ilustra o gráfico da Figura 3, o coeficiente angular da reta é o mesmo para diferentes substâncias, mas a intersecção com o eixo das abscissas é diferente, correspondendo ao valor da função trabalho do material dividido por h . Esta razão é a de **frequência de corte** do material.

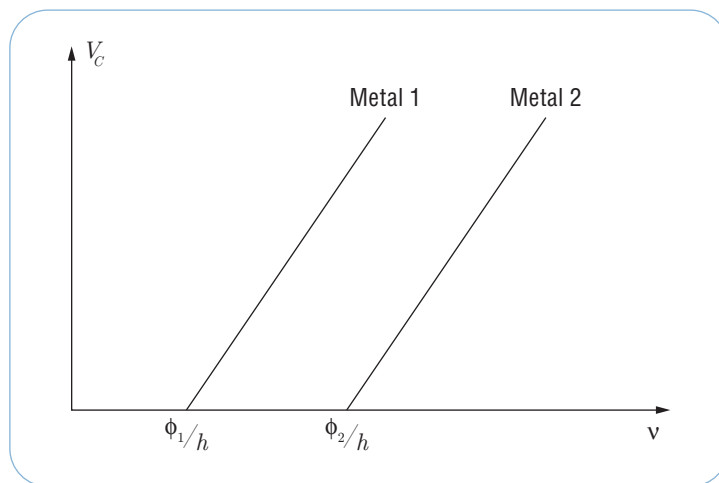


Figura 3 – Gráfico da diferença de potencial em termos da frequência da luz para diferentes metais.

Usando os dados de seus experimentos e a expressão linear proposta por Einstein, Millikan determinou de maneira precisa e acurada o valor da constante de Planck. O valor experimental estabelecido, em 1914 por Millikan, com erro relativo menor que 0,5%, foi:

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

Vale ressaltar três notas importantes acerca do efeito fotoelétrico.

- 1)** O nome **fóton** para os *quanta* de luz só apareceu em 1926 num trabalho de Gilbert Newton Lewis (1875-1946).
- 2)** Em 1921, Einstein foi agraciado com o prêmio Nobel em Física, exatamente pela teoria do efeito fotoelétrico.
- 3)** Hoje em dia, as **fotocélulas**, que empregam o efeito fotoelétrico para converter um sinal luminoso em uma corrente elétrica, têm inúmeras aplicações práticas, tais como fotômetros, controladores de portas de elevador, sensores de movimento etc.

O efeito Compton

Ao explicar o efeito fotoelétrico, em 1905, Einstein propôs que a luz era composta de *quanta* que interagem com os elétrons do material como se fossem partículas com energia dada pela Equação 1.

Pela Relatividade, o momento de uma partícula está relacionado à sua energia total pela equação:

$$E^2 = p^2c^2 + (mc^2)^2, \quad \text{Eq. (6)}$$

onde m é a massa de repouso da partícula e c é a velocidade da luz no vácuo.

Como o fóton é uma partícula de massa de repouso igual a zero, a Equação 6 pode ser reescrita, para os fótons, como:

$$E = pc. \quad \text{Eq. (7)}$$

Assim, das Equações 1 e 6, podemos escrever o momento de um fóton como:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c}. \quad \text{Eq. (8)}$$



Atividade 4

Calcule a energia e o momento para um fóton com comprimento de onda igual a 700 nm.

Se os fótons carregam energia e momento, ambos devem ser conservados na interação da radiação eletromagnética com um elétron.

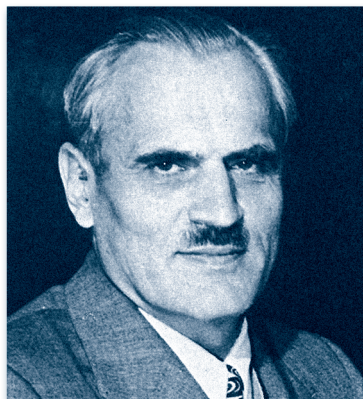


Figura 4 – Arthur Holly Compton (1892-1962).

Em 1923, Arthur Holly Compton (Figura 4) desenvolveu a ideia de Einstein de momento e energia para os fótons e a aplicou aos experimentos de espalhamento da radiação eletromagnética de curtíssimo comprimento de onda (na região dos raios-X) por alvos de grafite. Os resultados desses experimentos garantiram que a ideia de fótons fosse aceita pela comunidade científica.

A teoria clássica falhava completamente ao explicar o espalhamento dos raios-X pelos elétrons do material nos experimentos de Compton. Segundo o modelo clássico, ondas eletromagnéticas incidentes de frequência ν_0 deveriam sofrer os seguintes efeitos:

- 1)** Os elétrons deveriam ser acelerados na direção de propagação dos raios-X pela pressão da radiação (lembre-se da disciplina Eletromagnetismo).
- 2)** O campo elétrico oscilante da radiação deveria colocar os elétrons para oscilar em frequência levemente diferente da frequência da radiação, devido ao efeito Doppler, já que o elétron absorve a radiação em movimento.
- 3)** O elétron reirradia a radiação, em movimento, exibindo um outro efeito Doppler na frequência da radiação emitida.

Os efeitos descritos acima estão incluídos no esquema da Figura 5, que representa a descrição clássica do efeito Compton.

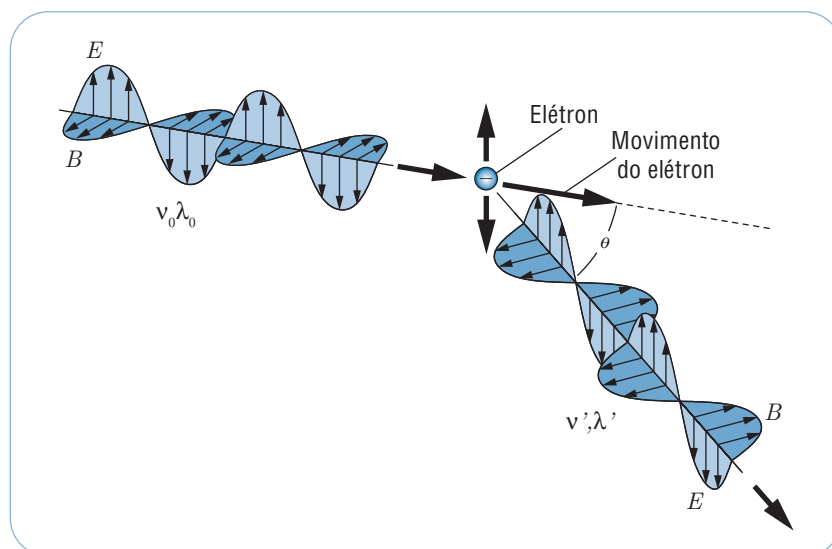
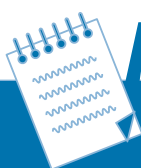


Figura 5 – Espalhamento de raios-X por um elétron segundo a descrição do modelo ondulatório da radiação eletromagnética.

Como elétrons diferentes deslocam-se com velocidades diferentes, dependendo da quantidade de energia absorvida das ondas eletromagnéticas, as frequências das ondas espalhadas em um certo ângulo deveria apresentar uma distribuição de valores em torno de ν_0 e deslocadas pelo efeito Doppler. Contrariamente a esta previsão, a experiência de Compton mostrou que, para um dado ângulo, apenas uma frequência de radiação aparecia e esta era, no geral, bem diferente da frequência da radiação incidente.



Atividade 5

Descreva, qualitativamente, a diferença entre a radiação espalhada no experimento de Compton, segundo as descrições do modelo ondulatório e do modelo corpuscular da radiação.

Comparando-se as Figuras 5 e 6, percebemos claramente uma outra diferença crucial entre as duas descrições do efeito: no modelo ondulatório, o elétron é empurrado do material, pela pressão de radiação, na direção incidente da radiação; enquanto que no modelo corpuscular, o elétron é espalhado de um ângulo θ em relação a esta direção, como se fosse um colisão entre bolas de sinuca.

O espalhamento de raios-X pelo material deve ser estudado a partir da conservação do momento e da energia na colisão fóton-elétron, com estas expressões escritas em sua forma relativística. Como a energia dos fótons de um feixe de raios-X é muito maior que a energia cinética dos elétrons nos átomos, pode-se considerar que, inicialmente, os elétrons estão em repouso.

Assim, a energia do fóton incidente somada à energia de repouso do elétron deve ser igual à energia do fóton espalhado mais a energia total do elétron de recuo (repouso mais cinética). Matematicamente, temos:

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + m_e c^2 + m_e c^2(\gamma - 1)$$

$$h\nu = h\nu' + m_e c^2 (\gamma - 1), \quad \text{Eq. (9)}$$

onde o m_e é a massa do elétron e γ é o fator de Lorentz que vale:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{Eq. (10)}$$

Usando a relação entre o comprimento de onda e a frequência de uma onda eletromagnética:

$$c = \lambda\nu, \quad \text{Eq. (11)}$$

podemos reescrever a Equação 9 em termos do comprimento de onda:

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} + m_e c(\gamma - 1) \quad \text{Eq. (12)}$$

Para a conservação de momento colisão elétron-fóton, temos que escrever as equações separadas para a conservação do momento nas direções x e y . Já usando a relação dada pela equação 11, obtemos:

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \phi + \gamma m_e v_e \cos \theta \quad (\text{eixo } x) \quad \text{Eq. (13)}$$

$$0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \phi - \gamma m_e v_e \sin \theta \quad (\text{eixo } y) \quad \text{Eq. (14)}$$

onde v_e é a velocidade de recuo do elétron logo após a colisão.

Das Equações 12, 13 e 14, e com um pouco de manipulação algébrica, Compton obteve:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos \phi), \quad \text{Eq. (15)}$$

onde $\Delta\lambda$ é chamado **deslocamento Compton** da radiação no espalhamento e a razão $h/m_e c$ é chamada **comprimento de onda Compton**, cujo valor depende da massa da partícula responsável pelo espalhamento dos fótons. No caso estudado, esta partícula é o elétron m_e e a sua massa.

O comprimento de onda da radiação espalhada pelos elétrons do material é quase sempre diferente do comprimento de onda da radiação incidente: $\lambda' \neq \lambda$.

Exemplo 1:

O comprimento de onda Compton de uma partícula depende apenas de sua massa. Se a massa de repouso do elétron vale $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, determine o comprimento de onda Compton do elétron.

Solução:

O comprimento de onda Compton de uma partícula vale:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} \quad \text{Eq. (16)}$$

Assim, para o caso do elétron temos:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = \frac{6,63 \times 10^{-34} (\text{J} \cdot \text{s})}{9,11 \times 10^{-31} (\text{kg}) \times 3,00 \times 10^8 (\text{m/s})} = 2,43 \times 10^{-12} \text{ m}$$

Exemplo 2:

Um fóton tem comprimento de onda igual a 1 \AA e é espalhado pelos elétrons de um material emergindo com ângulo de 90° em relação à direção incidente. Determine o comprimento de onda do fóton espalhado.

Solução:

Usando a equação 15 podemos escrever que:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \Rightarrow \lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad \text{Eq. (17)}$$

Pelo resultado do exemplo 1 e sabendo que $\cos 90^\circ = 0$ e que $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 100 \times 10^{-12} \text{ m}$, podemos escrever o comprimento de onda do fóton espalhado (Eq. 17) como:

$$\lambda' = 100 \times 10^{-12} (\text{m}) + 2,43 \times 10^{-12} (\text{m}) (1 - 0) = 102,43 \times 10^{-12} \text{ m}$$

$$\lambda' = 1,0243 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Onde percebemos que a variação no comprimento de onda do fóton espalhado foi de menos de 3% do comprimento de onda do fóton incidente.

Há duas coisas importantes sobre esta experiência que ainda não mencionamos.

- 1)** A radiação espalhada contém um componente de comprimento de onda igual ao da radiação incidente. Esse componente pode ser explicado como resultante do espalhamento da radiação incidente não por um elétron quase-livre, mas pelos átomos da rede cristalina que, por terem uma massa muito maior que a massa do elétron causa um deslocamento Compton muito menor que o dos elétrons e, assim, a radiação espalhada pelos átomos tem um comprimento de onda praticamente igual ao da radiação incidente: $\lambda' \cong \lambda$.
- 2)** A interpretação de Compton para o espalhamento da radiação eletromagnética recebeu uma confirmação adicional quando o elétron de recuo do espalhamento foi observado, fato que só ocorreu em 1950, num experimento de William G. Cross e Norman F. Ramsey (1922-1993), que usaram fótons de raios *gama* com energia de $2,6 \text{ MeV}$, que é muito maior que a energia dos raios-X usados por Compton. Eles também verificaram que o ângulo de recuo do elétron tem o valor previsto pela teoria de Compton.

Observação – Outra coisa importante que nos indica o efeito Compton e que deve ser lembrada sempre pelos técnicos de raios-X que trabalham em hospitais e laboratórios de radiologia é que os raios-X direcionados ao corpo do paciente sofrem espalhamento Compton em todas as direções pelos elétrons do corpo e o comprimento de onda desta radiação espalhada ainda corresponde a raios-X e podem danificar as células e tecidos do corpo humano. Por isso, esses técnicos só devem operar os aparelhos de raios-X por trás de uma parede absorvente, normalmente feita de chumbo.



Atividade 6

Os fótons de luz visível, com comprimento de onda igual a 700 nm , são espalhados pelos elétrons de um material e emergem do material fazendo um ângulo de 90° com a direção incidente. Determine o deslocamento Compton e o comprimento de onda da radiação espalhada.

A natureza dual da luz

Os modelos teóricos baseados na quantização da luz e das ondas eletromagnéticas estão em completa concordância com as medidas experimentais do efeito fotoelétrico e do espalhamento de raios-X. Nos dois casos, a evidência é clara: quando a luz e a matéria interagem, a luz se comporta como se fosse composta por partículas de energia $h\nu$ e momento $h\nu/c$.

A luz, no entanto, apresenta propriedades ondulatórias. Tanto a luz quanto as outras ondas eletromagnéticas exibem os efeitos de difração e de interferência que somente são consistentes com o modelo ondulatório.

Qual modelo está correto? Qual modelo deve ser utilizado para descrever a luz? O modelo corpuscular ou o modelo ondulatório? A luz é uma onda ou uma partícula?

A resposta depende do fenômeno que está sendo observado. Algumas experiências podem ser melhor explicadas ou só podem ser explicadas com o modelo corpuscular da luz como, por exemplo, as experiências do efeito fotoelétrico e do espalhamento de ondas eletromagnéticas. Outras experiências são melhor explicadas ou mesmo somente explicadas pelo modelo ondulatório, como as experiências em que ocorrem a difração ou a interferência das ondas eletromagnéticas.

Os dois modelos são necessários para explicar o comportamento e a natureza da luz. A verdadeira natureza da luz não pode ser explicada por uma única visão clássica.

A luz tem uma natureza dual: exibe tanto características ondulatórias quanto corpusculares.

Uma compreensão completa do comportamento e da natureza da luz só é possível se os dois modelos, o ondulatório e o corpuscular, são combinados de forma complementar. Pois um mesmo feixe de luz pode ejetar elétrons em um metal e ser difratado por uma rede de difração e não se pode usar exclusivamente um ou outro modelo para descrever todas as propriedades da luz. Em outras palavras:

Os modelos ondulatório e corpuscular da luz complementam-se mutuamente e ambos são necessários para descrever a propagação e a interação da luz.

Para a Física Quântica, a luz se comporta como partícula ou como onda, dependendo somente do tipo de fenômeno que estamos observando. Suas características corpusculares e ondulatórias não podem ser separadas.

Resumo

Nesta aula, você aprendeu que os estudos da luz e dos fenômenos luminosos levaram a um intenso debate sobre a natureza corpuscular ou ondulatória da luz. A propagação retilínea e os fenômenos de reflexão e de refração da luz podem ser explicados pelos dois modelos, enquanto que os fenômenos de difração e de interferência só podem ser explicados pelo modelo ondulatório. E os efeitos fotoelétrico e Compton só podem ser explicados pelo modelo corpuscular. Do ponto de vista da Física Quântica, as ondas eletromagnéticas, incluindo a luz, têm propriedades ondulatórias e corpusculares que se complementam e que são estritamente necessárias para explicar a propagação da luz e sua interação com a matéria.

Autoavaliação

1

Por que a observação dos fenômenos de difração e de interferência da luz levou ao estabelecimento do modelo ondulatório em detrimento do modelo corpuscular da luz?

2

Por que, segundo o modelo ondulatório da luz, deveria haver um intervalo de tempo entre a iluminação do metal por uma fonte de luz de baixa intensidade e a emissão dos primeiros fotoelétrons pela placa?

3

Explique, com suas palavras, o que é a frequência de corte de um material no efeito fotoelétrico.

4

O cobre tem uma função trabalho igual a $4,70 \text{ eV}$. Determine:

- a) o comprimento de onda de corte e a frequência de corte para o efeito fotoelétrico;
- b) o potencial de corte, se o comprimento de onda da luz incidente for de 150 nm .

5

Raios-X com uma energia igual a 500 keV sofrem espalhamento Compton pelos elétrons de um alvo. Os fótons espalhados são detectados a 45° em relação aos fótons incidentes. Determine:

- a) o deslocamento Compton nesse ângulo;
- b) a energia dos raios-X espalhados;
- c) a energia, o momento e o ângulo de recuo do elétron.

6

Um fóton de $0,200 \text{ nm}$ colide com um elétron estacionário. Após a colisão, o elétron desloca-se para a frente e o fóton recua no sentido contrário ao da sua incidência. Determine:

- a) o momento e a energia cinética do elétron;
- b) a energia do fóton que recua.

7

Explique por que ao iluminarmos um material com luz visível, digamos amarela, e ao olharmos sob ângulos diferentes em relação ao feixe de luz incidente não observamos uma mudança de cor correspondente à mudança no comprimento de onda da luz espalhada.

Diga, com suas palavras, por que as naturezas corpuscular e ondulatória da luz são necessárias para explicar a propagação e a interação da luz?

Referências

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. **Física moderna**: origens clássicas e fundamentos quânticos. Rio de Janeiro: Editora Campus, 2006.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos e partículas. São Paulo: Editora Campus, 1979.

NUSSENZVEIG, H. Moisés. **Curso de física básica 4**: ótica, relatividade, física quântica. São Paulo: Edgar Blucher, 1998.

SERWAY, Raymond A.; JEWETT JÚNIOR, John W. **Princípios de física**: óptica e física moderna. São Paulo: Editora Thomson, 2005.

Os espectros atômicos e o modelo de Bohr

Aula

4



Apresentação

Nesta aula, discutiremos os espectros atômicos de emissão e absorção e mostraremos como os estudos dos dados experimentais espectroscópios conduziram ao modelo atômico de Bohr.

Objetivos

- 1 Entender os princípios físicos da espectroscopia.
- 2 Determinar os níveis de energia do átomo de hidrogênio.
- 3 Entender como, a partir de alguns postulados, Bohr deduziu as fórmulas empíricas das séries espectrais.
- 4 Compreender algumas consequências e aplicações do modelo de Bohr-Sommerfeld.
- 5 Perceber as limitações do modelo atômico de Bohr-Sommerfeld.



Espectros atômicos: emissão e absorção

Um espectro é um registro da radiação eletromagnética. A ciência que estuda as diversas formas de obter um espectro de radiação e como interpretá-las se chama espectroscopia.

Desde muito tempo é conhecido que os gases emitem luz quando são excitados. Em 1752, o físico escocês, Thomas Melvill, ao estudar a chama de sódio, encontrou que seu espectro não apresentava todas as cores do visível (arco-íris), como sucede com sólidos e líquidos, mas apenas parte delas, separadas por intervalos sem cor.

Os espectros de emissão atômica são obtidos de uma forma muito simples, e a técnica pode ser aplicada tanto a substâncias gasosas como a soluções. O processo básico encontra-se esquematizado na figura 1.

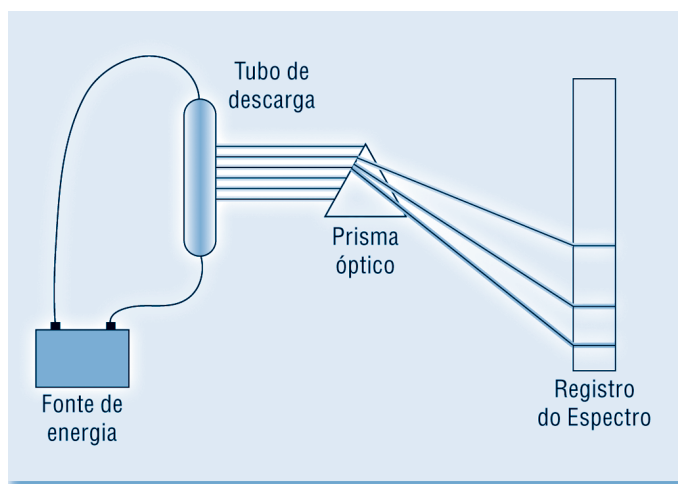


Figura 1 – Processo básico para se obter um espectro de emissão atômico.

Alguns dos mecanismos para isso são, por exemplo, I) esquentar um gás a uma alta temperatura, II) produzir uma descarga elétrica no interior do gás ou III) provocar a passagem de corrente elétrica em um gás rarefeito. Exemplos de emissão com que você tem contato no dia a dia são as lâmpadas de neônio ou mercúrio.

A radiação emitida pelo gás pode ser separada em seus diferentes comprimentos de onda por meio de um prisma (figura 1). No início, as observações eram visuais e depois foram usadas placas fluorescentes ou placas fotográficas para analisar a natureza da luz produzida pela emissão.



Atividade 1

Veja neste site <<http://astro.u-strasbg.fr/~koppen/discharge/>> o espectro de emissão de vários gases sob descarga elétrica. Qual seria a coloração predominante dos seguintes metais: sódio, cobre e ferro, quando exposto à chama de um bico de Bunsen?

Ainda que os elementos sejam similares do ponto de vista das propriedades químicas, como *He* e *Ne* (figura 2), seus espectros de emissão são radicalmente diferentes. Cada gás pode ser identificado a partir de seu espectro de linhas, como se fossem as impressões digitais de cada elemento.



Figura 2 – Parte do espectro de emissão de Hélio e Neônio.

Em 1860 e 1861 os trabalhos de Gustav Robert Kirchhoff (lembre-se de que já falamos deste cientista genial na disciplina Eletromagnetismo e na Aula 2 - A radiação térmica e a quantização da energia) e do químico Robert Bunsen (o inventor do bico de Bunsen), levaram ao descobrimento dos novos elementos rubídio e célio. Tal descoberta ocorreu ao analisar o espectro de emissão de certa água mineral, quando encontraram linhas não atribuídas a nenhum outro elemento conhecido. Esses cientistas foram os inventores do espectroscópio.

Desde os primeiros experimentos de Isaac Newton, em 1666, ao passar a luz do Sol através de um prisma, pensava-se que esta consistia em um espectro contínuo. Em 1802, William Hyde Wollaston achou sete linhas escuras espaçadas irregularmente. Em 1814, Joseph von Fraunhofer ampliou esses experimentos, contando com um melhor aparato experimental, e encontrou com precisão 324 linhas escuras. Atualmente (figura 3), mais de 25.000 linhas escuras foram catalogadas. Foi Kirchhoff que explicou as linhas negras como tendo origem pela absorção da luz solar pelos vapores de vários elementos presentes nas camadas mais frias em torno do Sol. Este trabalho pavimentou o caminho para a espectroscopia atômica e anunciou o advento da física moderna.

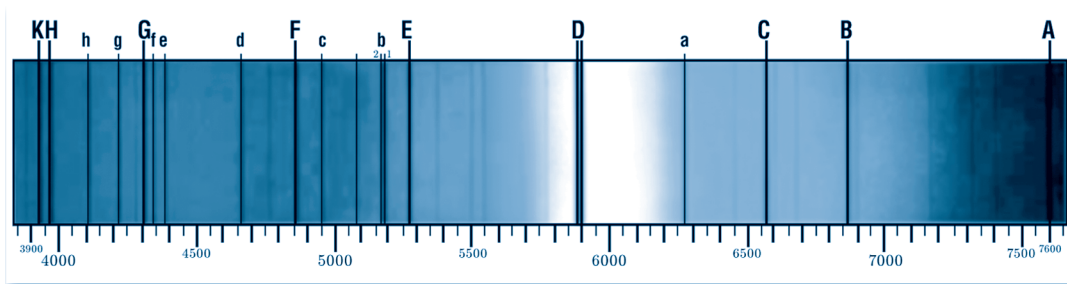


Figura 3 – Linhas escuras de Fraunhofer na parte visível do espectro solar. Atualmente, mais de 25.000 linhas escuras foram catalogadas.

Um espectro de absorção atômica é obtido de uma maneira ligeiramente diferente do espectro de emissão. Em vez de excitarmos (com eletricidade ou calor) os átomos da amostra de forma a que estes emitam radiação, colocamos a amostra entre a fonte de radiação (no caso, uma lâmpada) e o detector, conforme mostra o esquema na Figura 4. Um prisma óptico ou uma rede de difração é colocado entre a amostra e o detector.

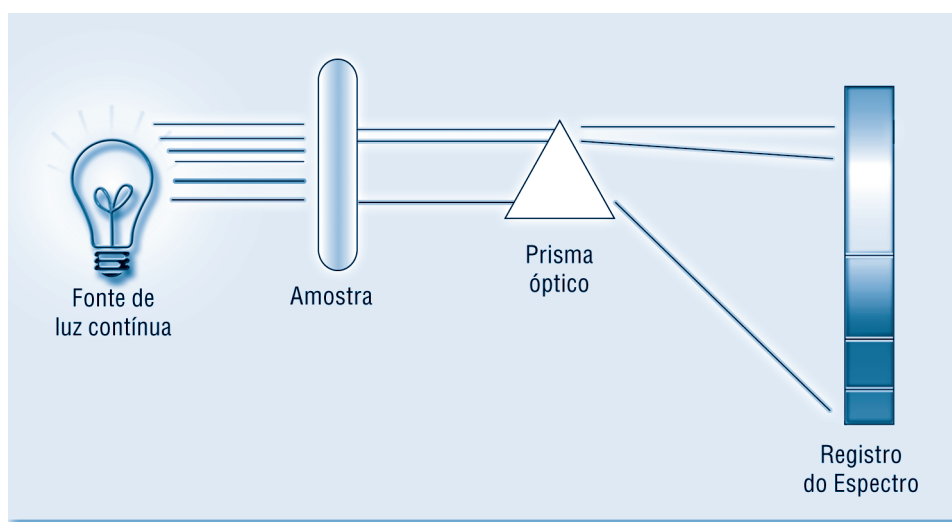


Figura 4 – Processo básico para se obter um espectro de absorção atômico.



Atividade 2

Com base no que você estudou neste início da aula, como poderíamos determinar a composição da atmosfera dos planetas ou mesmo a ausência de atmosfera na Lua?

Uma curiosidade sobre os espectros de emissão e de absorção atômica de um mesmo elemento é que eles são complementares, isto é, somando-os, obtemos um espectro contínuo (figura 5).

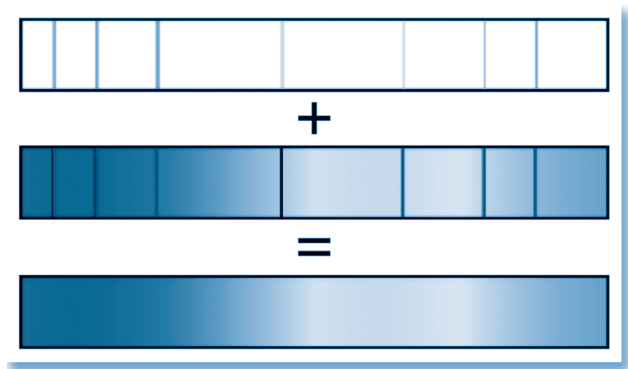


Figura 5 – Complementaridade do espectro atômico de absorção e de emissão de um mesmo elemento.

A fórmula de Balmer

Passados 70 anos do trabalho original de Fraunhofer, acumulou-se uma grande quantidade de medidas de comprimentos de ondas e intensidades da luz emitida e absorvida por variados tipos de gases. No entanto, ninguém havia sido capaz de explicar por que os gases absorviam ou emitiam de tal forma descontínua. O primeiro passo, nessa direção, resultante da busca obsessiva por parte de vários cientistas de relações numéricas entre as linhas espectrais, foi dado pelo suíço Johann Balmer, em 1885, que descobriu uma relação empírica para os comprimentos de onda de quatro linhas do espectro visível de emissão do hidrogênio medido pelo sueco Anders Jonas Ångström (é em homenagem a Ångström a unidade de comprimento $\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$).

A fórmula de Balmer é

$$\lambda = b \left(\frac{n^2}{n^2 - 2^2} \right) \quad \text{Eq. (1)}$$

com $b = 3645,6 \text{ Å}$. Para $n \geq 3$ os resultados se mostraram quase idênticos aos resultados experimentais de Ångström.

Outras séries do hidrogênio

Em 1890, Johannes Robert Rydberg reescreveu a fórmula de Balmer como:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{4}{b} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{Eq. (2)}$$

e encontrou que a constante $4/b$ desta fórmula aparecia também em expressões similares para outros elementos e encontrou relações semelhantes entre as linhas correspondentes a diferentes séries. Em sua homenagem, $4/b$ é conhecida como a constante de Rydberg (R_H). Balmer havia proposto que se encontrariam outras séries de linhas de emissão se substituísse o valor 2 na equação (1) por outros números inteiros, o que se mostrou errado, entretanto, Rydberg descobriu que, fazendo tal substituição na equação (2), a especulação de Balmer era correta! Ou seja, a fórmula

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{com} \quad n_i > n_f \quad \text{Eq. (3)}$$

reproduzia todas as linhas de emissão do hidrogênio!



Atividade 3

Mostre que as fórmulas (1) e (2) são equivalentes, obtendo a equação 2 da equação 1.

Fórmulas como essa são chamadas de “empíricas”, termo técnico para indicar uma equação achada na base de tentativa e erro. Na época de Balmer e Rydberg, ninguém entendia porque o espectro do hidrogênio se ajustava tão bem a essas expressões relativamente simples. Quem deu o primeiro passo para desvendar esse enigma foi o dinamarquês Niels Bohr, como veremos a seguir.

Os postulados de Bohr

A dificuldade encontrada para aceitar o modelo do átomo de Rutherford (Aula 1 – O Átomo e a Física) foi de certa forma resolvida pelo físico dinamarquês Niels Bohr (figura 6), em 1913, quando apresentou quatro **postulados** (regras não demonstradas matematicamente) que enfaticamente negavam a possibilidade de aplicação da física clássica da radiação para o caso dos átomos.



Figura 6 – Niels Henrik Bohr (1885-1962).

1) Os átomos mono-eletrônicos (H , He^+ , etc.) são constituídos por um núcleo, de carga Ze , que é A vezes maior que a massa m do elétron, o qual gira ao redor do núcleo em uma órbita circular. Para o átomo de hidrogênio $A = 1836,1$.

2) O momento angular do átomo é quantizado e dado por

$$L = mvr = n\hbar, \quad \text{Eq. (4)}$$

em que $n = 1, 2, 3, \dots$, e $\hbar = h/2\pi$. Cada valor de n corresponde a um valor permitido para o raio da órbita r . O valor de n para cada órbita é chamado de número quântico principal para a referida órbita.

3) O elétron em um átomo pode circular em torno do núcleo descrevendo *órbitas estacionárias* sem emitir *nenhuma* radiação.

4) Existe uma energia definida associada a cada órbita estacionária, o átomo só irradia energia ao fazer uma transição de uma dessas órbitas para outra de menor energia. A quantidade de energia irradiada na forma de um fóton (Aula 3) é

$$hf = E_i - E_f. \quad \text{Eq. (5)}$$

Níveis de energia do átomo de hidrogênio no modelo de Bohr

A energia total do átomo de hidrogênio em um orbital estacionário n é igual à soma da energia cinética com a energia potencial:

$$E = T + V \quad \text{Eq. (6)}$$

Tomando como referência o próton, a energia cinética é dada apenas pela energia cinética do elétron

$$T = \frac{1}{2}mv^2. \quad \text{Eq. (7)}$$

Como a energia potencial corresponde à energia potencial eletrostática do núcleo (carga $+e$) e do elétron (carga $-e$) em um orbital estacionário n a uma distância r , temos então que

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r}. \quad \text{Eq. (8)}$$

A energia potencial possui sinal negativo porque consideramos a energia potencial igual a zero, quando o elétron está a uma distância infinita do núcleo (ver disciplina Eletromagnetismo para uma revisão, se for necessário). Desde que o elétron, segundo o postulado 1, movimenta-se numa órbita estacionária circular de raio r , com uma velocidade v , o módulo da força eletrostática (em um sistema de unidades onde a constante de Coulomb é $k = 1$) de atração entre o próton e o elétron é

$$F = \frac{e^2}{r^2}. \quad \text{Eq. (9)}$$

Como esta força é a única força relevante que atua no elétron, temos pela 2ª lei de Newton:

$$F = \frac{e^2}{r^2} = ma_{cp} = m\frac{v^2}{r}, \quad \text{Eq. (10)}$$

ou seja,

$$mv^2 = \frac{e^2}{r}. \quad \text{Eq. (11)}$$

Substituindo (11) na equação (8) temos que a energia total depende da posição da órbita do elétron como

$$E = -\frac{e^2}{2r}. \quad \text{Eq. (12)}$$

Note que chegamos a este resultado usando apenas o postulado 1.

De acordo com o postulado 2, temos que

$$m^2 v^2 r^2 = n^2 \hbar^2. \quad \text{Eq. (13)}$$

Isolando v^2 desta equação e substituindo na equação (11) temos que

$$\frac{n^2 \hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{e^2}{mr} \quad \text{Eq. (14)}$$

e portanto

$$\frac{1}{r} = \frac{me^2}{\hbar^2 n^2}. \quad \text{Eq. (15)}$$

Enfim, substituindo esta expressão na equação (12) encontramos

$$E = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2 n^2}. \quad \text{Eq. (16)}$$

Esta expressão mostra que a energia do átomo é mínima quando $n = 1$, pois E possui seu maior valor negativo. Esse valor fornece a energia do estado fundamental do átomo, que é o nível com o menor raio orbital. Para $n = 2, 3, \dots$, os valores absolutos de E ficam cada vez menores e a energia se torna progressivamente maior (menos negativa), além que a distância entre dois níveis subsequentes se torna cada vez menor, como ilustra a figura 7.

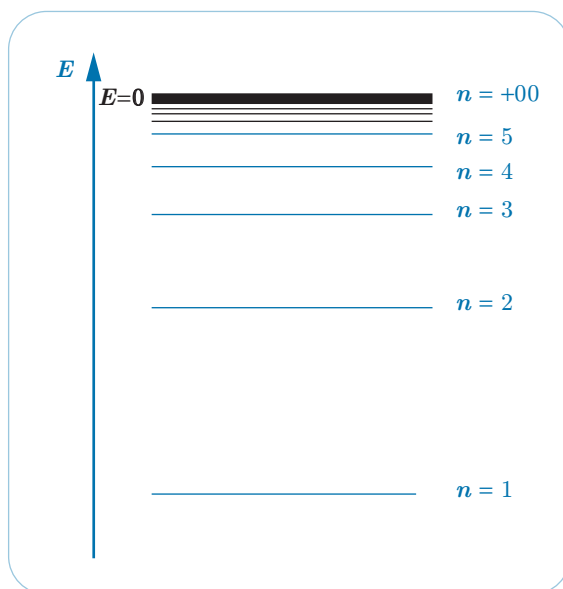


Figura 7 – Representação de alguns níveis de energia do elétron do átomo de hidrogênio de acordo com o modelo de Bohr.

Conhecendo os níveis de energia, podemos imediatamente determinar a frequência do espectro do átomo de hidrogênio, usando o postulado 4. Assim, se o átomo muda de um estado inicial caracterizado por n_i para outro estado final caracterizado por n_f , com $n_f < n_i$, a frequência f da radiação emitida é dada por

$$f = \frac{E_i - E_f}{h} = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{h\hbar^2} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = \frac{1}{4} \frac{me^4}{\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad \text{Eq. (17)}$$

Lembrando que $f = c/\lambda$, podemos escrever a equação acima como

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad \text{Eq. (18)}$$

onde

$$R_H = \frac{1}{4} \frac{me^4}{\pi c \hbar^3}. \quad \text{Eq. (19)}$$

A equação anterior nos mostra como calcular o valor da constante de Rydberg a partir das constantes fundamentais m , c , e , e \hbar , as quais podem ser determinadas independentemente do modelo de Bohr. Bohr ganhou o Prêmio Nobel de física em 1922 por ter resolvido (momentaneamente) com seu modelo o problema da estabilidade do átomo.



Atividade 4

Verifique que a constante de Rydberg dada pela equação (19) tem como valor $R_H = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. Este valor concorda com o determinado a partir de medidas experimentais de comprimentos de ondas, o que fornece uma forte comprovação do modelo de Bohr.

Para saber mais...

As **órbitas elípticas de Sommerfeld**. O modelo de Bohr explicava muito bem as linhas espectrais do hidrogênio e átomos semelhantes. No entanto, logo foi descoberto que as linhas espectrais na verdade consistiam de várias linhas muito próximas. Se uma linha grossa, por exemplo, era composta por duas linhas mais finas (doublete), isto implicava que existiam duas transições com energia ligeiramente diferente, o que não era previsto pelo modelo de Bohr.

Logo após a descoberta experimental deste fenômeno, apareceu o trabalho de Arnold Sommerfeld com a introdução das órbitas elípticas, que deu uma primeira explicação a este fenômeno.

No modelo de Sommerfeld, os elétrons só poderiam se mover em elipses permitidas (figura 8). Ele criou então um segundo número quântico l o qual chamou de **número quântico secundário** ou **número quântico azimutal**. Este número definia a forma da elipse. Para $n = 1$ a órbita só podia ser circular ($l = 0$), para $n = 2$ havia duas órbitas de diferentes formas ($l = 0$ - elíptica, $l = 1$ - circular). Para qualquer n haviam n diferentes formas das órbitas. Os elétrons movendo-se em duas órbitas de mesmo n mas de diferentes formas tinham pequenas diferenças de energias. O que explicava a descoberta da estrutura das linhas espectrais.

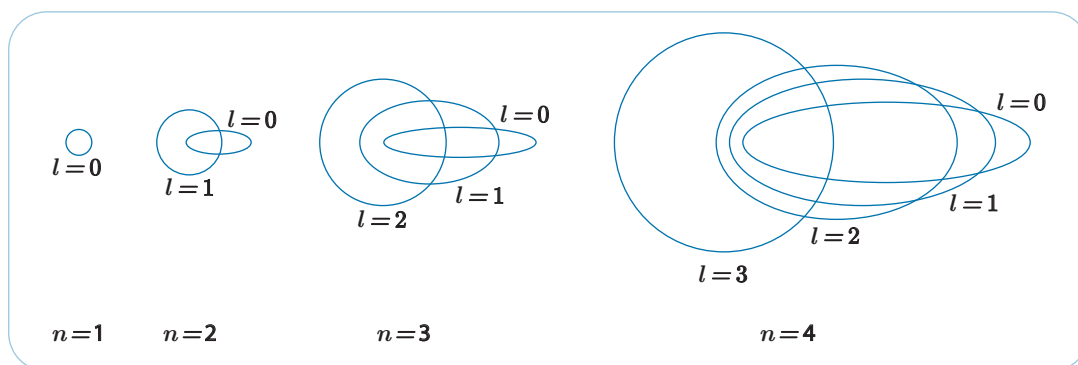


Figura 8 – Órbitas eletrônicas permitidas para os quatro números quânticos pelo modelo de Bohr-Sommerfeld.

Outro tipo de melhoramento do átomo de Bohr foi a descoberta que as órbitas não tinham que estar no mesmo plano. Elas podiam estar orientadas no espaço em algumas direções definidas. Sua orientação seria definida pelo **número quântico magnético** m_l , que estaria associado ao campo magnético gerado pelo elétron ao percorrer sua órbita.

Se o sistema era posto em um campo magnético externo, então as órbitas dos elétrons se dispunham por si mesmas de uma maneira especial de modo que o campo magnético gerado pelos elétrons apontaria na mesma direção do campo magnético externo. Para mudar a órbita eletrônica para outra direção deveria ser dada uma energia adicional ao sistema. Sommerfeld provou que existiam apenas alguns números definidos para as possíveis direções orbitais, que

seriam num total de $2l + 1$. Cada posição no campo magnético teria uma pequena diferença de energia. O número m_l poderia ter valores de $-l$ a $+l$, ou seja, $2l + 1$ valores diferentes. O fenômeno do campo magnético das órbitas serem quantizados para um mesmo conjunto de valores n e l explicava a quebra das linhas espectrais quando um átomo era posto sob a influência de um campo magnético externo. Este é o conhecido efeito Zeeman, que leva este nome por ter sido descoberto por Pieter Zeeman.

Para um melhor entendimento dos números quânticos n , l e m_l , os valores para $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$ estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Orbitais possíveis no modelo de Bohr-Sommerfeld.

Números quânticos			Número de estados químicos	
n	l	m_l	Na sub-camada l	Na camada n
1	0(s)	0	2	2
2	0(s)	0	2	8
	1(p)	-1, 0, +1	6	
3	0(s)	0	2	18
	1(p)	-1, 0, +1	6	
	2(d)	-2, -1, 0, +1, +2	10	
4	0(s)	0	2	32
	1(p)	-1, 0, +1	6	
	2(d)	-2, -1, 0, +1, +2	10	
	3(f)	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	14	

Além dos fenômenos descritos anteriormente, um mais foi descoberto, que a linha espectral consistia de duas, quatro ou mais linhas muito próximas uma da outra, muito mais próximas do que as formas de órbitas eram possíveis de explicar. O fato, conhecido como efeito Zeeman anômalo, não podia ser previsto pelo modelo de Bohr-Sommerfeld. A figura 9 ilustra o efeito, ao submeter átomos a um campo magnético de grande magnitude, os seus níveis de energia se desdobram em dois, quatro ou mais níveis, o que leva a uma multiplicação de linhas espectrais de emissão.

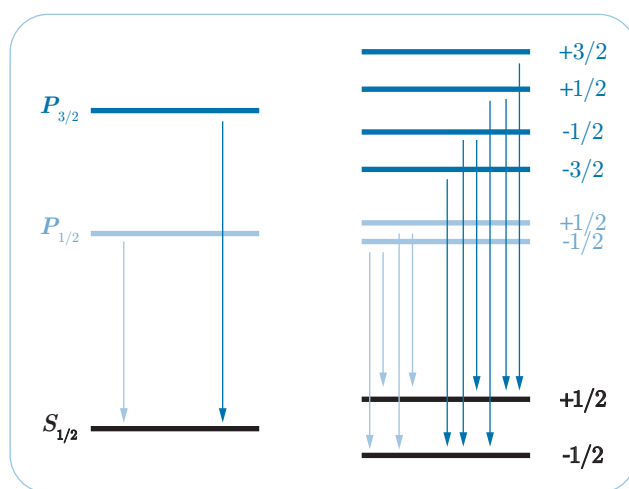


Figura 9 – Ilustração do efeito Zeeman.

Quem explicou o efeito Zeeman anômalo foi a dupla George Eugene Uhlenbeck e Samuel Abraham Goudsmit, este último aluno de Zeeman. Para isto eles propuseram que os elétrons, além de circular em torno dos núcleos, também giravam em duas direções, criando uma corrente que flui na direção da rotação. A corrente induz um campo magnético que é direcionado com o campo criado pelo elétron se movendo na órbita ou oposto a ela. Tais campos somam-se ou subtraem-se gerando campos resultantes diferentes por uma pequena quantidade. Assim, as linhas espectrais se desdobrariam. O *spin*, número quântico magnético é usado para definir a direção da rotação. O *spin* pode ser $+1/2$ ou $-1/2$, que produz o desdobramento da linha espectral em duas linhas muito próximas.

Após o modelo de Bohr ter sido implementado, percebeu-se que ele descrevia muito bem o espectro do hidrogênio. As linhas principais eram geradas pelo elétron ocupando diferentes órbitas (definidas por n). As linhas consistiam de linhas postas muito próximas para diferentes formas de órbitas (definidas por l). No campo magnético, as linhas sofrem um desdobramento, porque as órbitas ocupam diferentes lugares no espaço. E, por último, o elétron pode girar em duas direções, o que causa o desdobramento das linhas espectrais em duas linhas extras.

Como o modelo de Bohr descreve muito bem os espectros de hidrogênio e de outros átomos hidrogenóides (átomos formados por seu núcleo e por um único elétron, como por exemplo, He^+ , Li^{2+}), ele foi considerado um sucesso. Mas, para alguns cientistas, as suas suposições aparentavam artificiais. A pergunta mais frequente era: por que deveriam os elétrons girar em torno dos núcleos apenas em órbitas definidas? A resposta foi dada após 1925 por de Broglie, Schrödinger e Planck. Este será o assunto das nossas próximas aulas.

Resumo

Quando um átomo faz uma transição de um nível de energia E_i para um nível de energia mais baixo E_f , a energia do fóton emitido é igual a $E_i - E_f$. Os níveis de energia do átomo de hidrogênio são dados pela equação

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{mc^2}{\hbar^2 n^2}.$$

Sommerfeld melhorou o modelo de Bohr, permitindo o elétron se mover em órbitas elípticas e com a descoberta do Spin por Uhlenbeck e Goudsmit, o modelo de Bohr-Sommerfeld permitiu entender as linhas espectrais do átomo de hidrogênio e dos íons hidrogenados, no entanto, além do modelo misturar a teoria clássica com idéias novas incompatíveis, ele era incapaz de prever os níveis de energia de qualquer átomo particular.

Autoavaliação

1

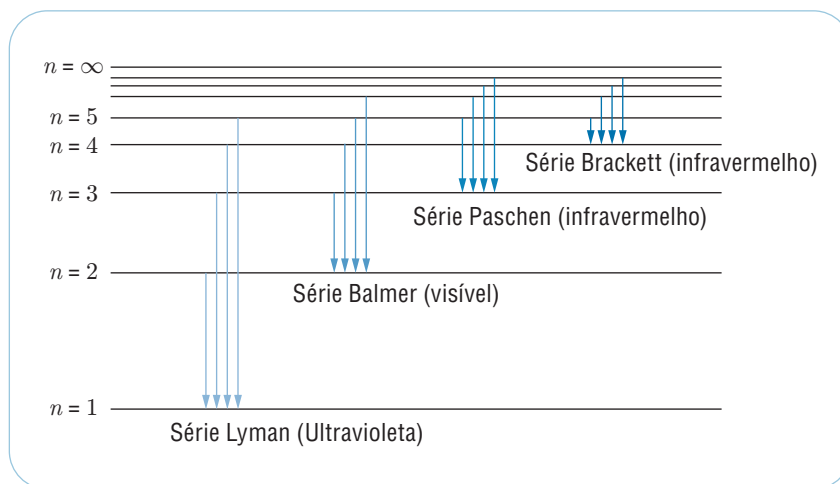
Determine a energia cinética, a energia potencial e a energia total do átomo de hidrogênio em seu primeiro nível excitado e calcule o comprimento de onda do fóton emitido na transição do primeiro nível excitado até o nível fundamental.

2

A luz correspondente ao fóton do problema anterior se encontra no visível? Se sim, qual a sua cor?

3

Desafio! Outras séries espectrais para o hidrogênio foram descobertas, como as séries de Lyman, Paschen, Brackett e Pfund. Seus comprimentos de onda podem ser determinados mediante fórmulas semelhantes às da série de Balmer, equação (2). Na figura abaixo, apresentamos um diagrama dos níveis de energia do hidrogênio, mostrando algumas transições correspondentes às séries de Lyman, Balmer, Paschen e Brackett. Deduza as fórmulas das séries de Lyman, Paschen e Brackett apresentadas no diagrama.



4

Qual é o comprimento de onda da radiação emitido de um sistema onde um elétron é capturado por um próton (ou íon de hidrogênio, H^+) formando um átomo de hidrogênio no seu estado fundamental? Em que faixa do espectro se encontra a radiação emitida? Isto é, se é infravermelho, visível, ultravioleta, gamma, etc.

Referências

ANSWERS.COM. **Fraunhofer lines**. Disponível em: <<http://www.answers.com/topic/fraunhofer-lines>>. Acesso em: 22 jun. 2009.

CRUZ-GARRITZ, Diana; CHAMIZO, Jose A.; GARRITZ, Andoni. **Estructura atomica**: um enfoque químico. Wilmington, Delaware: Editora Addison-Wesley Iberoamericana, 1991.

EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois, 1979.

YOUNG, Hugh D.; FREEDMAN, Roger A. **Física IV**: ótica e física moderna: Sears e Zemansky. 12. ed. São Paulo: Editora Pearson Education, 2009.

Propriedades ondulatórias das partículas

Aula

5



Apresentação

Os estudos da luz e dos efeitos luminosos revelaram que a luz e as outras ondas eletromagnéticas possuem características de onda e de partícula. Essas características se complementam e são essenciais à explicação e estudo dos fenômenos relacionados à propagação e interação das ondas eletromagnéticas.

A natureza é simétrica em relação à dualidade onda-partícula e não são só as ondas eletromagnéticas que apresentam tal dualidade: a matéria também tem natureza dual.

Nesta aula, vamos entender como o comportamento dual que se apresenta para as partículas e corpos materiais, tais como elétrons, prótons, pedras, pessoas, planetas e outros, e também perceber porque esse comportamento passa despercebido nas situações de nosso cotidiano e entender como tal dualidade permitiu o desenvolvimento dos microscópios eletrônicos.

Objetivos

- 1** Compreender que a matéria, assim como a luz, apresenta uma natureza dual.
- 2** Entender a observação experimental das ondas associadas a partículas materiais.
- 3** Perceber que as características ondulatórias dos corpos macroscópicos não podem ser percebidas experimentalmente.
- 4** Definir e conhecer as propriedades de uma partícula quântica.
- 5** Entender os princípios físicos do funcionamento de um microscópio eletrônico.

Introdução



“Todas as partículas podem exibir efeitos de interferência, e todos os movimentos ondulatórios têm energia na forma de quanta”.
Paul Dirac (1902-1984).

Nas primeiras aulas de nossa disciplina temos estudado sobre as limitações da Física Clássica em explicar alguns fenômenos naturais. Vimos que a Física conhecida até o final do Século XIX estava restrita a explicar e descrever o mundo macroscópico, que é o mundo que percebemos com nossos sentidos. Ela não podia explicar os fenômenos e efeitos relacionados, direta ou indiretamente, às escalas microscópicas.

Nessas aulas, vimos que a estrutura atômica da matéria e a quantização da carga elétrica, quando estudadas de acordo com os conceitos da Física Clássica, tornam inexplicável a própria existência da matéria. Aprendemos que os espectros atômicos não podem, de maneira alguma, ser explicados em termos de conceitos e princípios clássicos e que o modelo atômico de Bohr-Sommerfeld explica, qualitativa e quantitativamente, o átomo de hidrogênio e seus espectros e fornece uma explicação para a estrutura atômica da matéria e estabilidade dos átomos. Aprendemos que os espectros da radiação térmica, que têm forma muito diversa da prevista pela Física Clássica, podem ser obtidos considerando-se a quantização da energia dos modos de vibração dos materiais. Vimos que a luz tem uma natureza dual, na qual os aspectos corpusculares e ondulatórios combinam-se e complementam-se para explicar sua propagação e sua interação. Para explicar esses efeitos e fenômenos foram criados e desenvolvidos novos princípios e conceitos, aos quais estamos estudando em cada uma das aulas de nossa disciplina.

Dando continuidade, vamos perceber que a dualidade onda-partícula não está restrita à luz e às ondas eletromagnéticas, mas que é, também, uma propriedade de todas as partículas e corpos materiais.

Para tanto, vamos lembrar que ao estudar a propagação da luz e sua interação com a matéria (Aula 3 – O efeito fotoelétrico e o efeito Compton), fomos forçados a aceitar sua natureza dual. Ou seja, não conseguimos explicar os fenômenos e efeitos luminosos assumindo apenas o comportamento corpuscular ou o comportamento ondulatório da luz. É um fato comprovado experimentalmente que a luz possui características corpusculares e ondulatórias.

Já ao estudarmos a matéria, é natural que adotemos um modelo corpuscular para explicar seu comportamento e natureza. Estamos acostumados a tratar a matéria e seus constituintes (prótons, nêutrons e elétrons) apenas como corpúsculos materiais.

Veremos, agora, que a natureza é bastante simétrica em relação à dualidade onda-partícula. A matéria também apresenta uma natureza dual. Nesta aula, entenderemos esse comportamento e aprenderemos sobre a sua constatação experimental e sobre o porquê de não percebemos esta dualidade para os objetos e partículas de nosso cotidiano, ou seja, vamos entender porque, mesmo tendo propriedades ondulatórias associadas a nossos corpos, não sofremos difração e interferência ao passar pela porta de nossa casa.

O postulado de De Broglie e as ondas de matéria

Em 1923, o físico francês Louis de Broglie (Figura 1), que estava preparando sua tese de doutoramento, postulou que:

Como os fótons têm características corpusculares e ondulatórias, talvez todas as formas de matéria tenham propriedades ondulatórias assim como corpusculares.



Figura 1 – Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie, conhecido como Louis de Broglie (1892-1987).

Essa era uma ideia altamente revolucionária e especulativa, baseada nos resultados obtidos para fótons, nos efeitos fotoelétrico e Compton, na teoria de Bohr para o átomo de hidrogênio e na analogia ótico-mecânica. Para entender como esses resultados levaram de Broglie a postular a dualidade onda-partícula para a matéria, devemos lembrar alguns pontos importantes relacionados a cada um desses resultados.

Em primeiro lugar, os fótons de luz, em sua propagação e interação, manifestam efeitos que os caracterizam como partículas e que dependem de suas propriedades ondulatórias, como pode ser explicitado pelo momento carregado pelo fóton e sua relação com o comprimento de onda da luz:

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad \text{Eq. (1)}$$

Em segundo lugar, o próprio De Broglie revelou que uma pista importante para a proposição de seu postulado foi o aparecimento de números inteiros na condição de quantização de Bohr para as órbitas dos elétrons dos átomos de hidrogênio, pois os únicos fenômenos físicos em que apareciam números inteiros eram nos fenômenos de interferência e nos modos normais de ondas (lembre-se da disciplina Ondas, Som e Luz). Se os níveis de energia dos elétrons no átomo estavam relacionados por números inteiros, então os elétrons deveriam estar relacionados à periodicidade, ou seja, deveriam estar relacionados a ondas.

Partindo desse raciocínio, De Broglie imaginou que se a luz que antes era considerada onda tinha propriedades corpusculares, os elétrons e outras partículas deveriam ter propriedades ondulatórias. Por analogia com a Equação 1 para o momento de um fóton, ele postulou que o comprimento de onda associado a uma partícula de momento p , seria:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \text{Eq. (2)}$$

que se chama comprimento de onda de De Broglie da partícula.

Para uma partícula não-relativística de momento $p = mv$, o comprimento de onda de de Broglie vale:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{Eq. (3)}$$

e para uma partícula com velocidade qualquer é:

$$\lambda = \frac{h}{\gamma mv}, \quad \text{Eq. (4)}$$

onde γ é o fator de Lorentz (ver disciplina Relatividade) e vale:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad \text{Eq. (5)}$$

Além disso, segundo de Broglie, as partículas obedecem à relação de Einstein para fótons ($E = hf$), de tal forma que a frequência associada a uma partícula é:

$$f = \frac{E}{h}. \quad \text{Eq. (6)}$$

Percebam que, diferente do que foi feito em aulas anteriores, vamos usar a letra f para representar a frequência de uma onda ou partícula para que não venhamos a confundir, no decorrer desta aula, as grandezas frequência e velocidade de uma partícula.

As Equações 2 e 6 evidenciam a natureza dual da matéria, pois cada uma contém tanto conceitos corpusculares (p e E) quanto conceitos ondulatórios (λ e f). O fato de essas relações terem sido estabelecidas experimentalmente para os fótons tornou mais fácil que a hipótese de De Broglie fosse aceita.



Atividade 1

Um elétron tem massa igual a $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ e em um tubo de Crookes é acelerado por uma diferença de potencial de 100 volts, adquirindo uma velocidade de módulo igual a $v = 5,93 \times 10^6 \text{ m/s}$. Determine o comprimento de onda de de Broglie para:

- este elétron;
- para um próton, cuja massa vale $m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$ e tem a mesma velocidade que o elétron do item anterior.

Os pequenos valores para os comprimentos de onda de De Broglie de partículas como o elétron ($\lambda \sim 1\text{Å} = 10^{-10} m$) e ainda menores para partículas mais massivas como os prótons e nêutrons, explicam o porquê das propriedades ondulatórias da matéria terem passado despercebidas até o início do Século XX. Conforme observou o próprio de Broglie, é a mesma razão pela qual as propriedades ondulatórias da luz visível (os fenômenos de interferência e difração) passam despercebidas em nosso cotidiano, permitindo que se empregue a ótica geométrica para explicar a propagação da luz.

Para objetos macroscópicos, mesmo com baixas velocidades, o comprimento de onda é ainda menor (veja o Exercício 3 da autoavaliação). E, portanto, é muito menor que qualquer abertura por onde esses objetos possam passar para sofrer difração. Portanto, as propriedades ondulatórias de objetos macroscópicos não podem ser observadas.

Observação das ondas de matéria

Durante a defesa de tese de De Broglie, um dos membros da banca perguntou se suas ondas de matéria poderiam ser detectadas experimentalmente. A resposta de de Broglie foi que isso talvez fosse possível fazendo-se experiências de difração de elétrons por cristais.

Isso é verdade porque, mesmo com comprimentos de onda tão pequenos, sob condições apropriadas, elétrons deveriam exibir efeitos de difração.

Em 1927, três anos após o trabalho de De Broglie ter sido publicado, C. J. Davisson e L. H. Germer (Figura 2) conseguiram medir o comprimento de onda dos elétrons e constataram, dessa forma, a natureza ondulatória das partículas.



Figura 2 – Clinton Joseph Davisson (à esquerda, 1881-1958) e Lester Halbert Germer (à direita, 1896-1971).

Vale lembrar que a intenção inicial de Davisson e Germer não era confirmar a hipótese de De Broglie. Tal descoberta ocorreu acidentalmente. A experiência envolvia o espalhamento de elétrons de baixa energia por um alvo de níquel no vácuo. Durante uma das experiências, uma garrafa de ar líquido explodiu e oxidou o alvo de níquel. Para eliminar o óxido, o alvo foi submetido a um tratamento térmico que formou grandes regiões cristalinas em seu interior e causou uma mudança radical na distribuição angular dos elétrons espalhados por esse alvo, de forma que essa distribuição dos elétrons passou a exibir máximos e mínimos de intensidade e em ângulos específicos.

Davisson e Germer perceberam que os elétrons haviam sido difratados pelos planos cristalinos do alvo de níquel. Logo em seguida, eles realizaram extensivas medições de espalhamento de elétrons por alvos de um único cristal. Seus resultados mostraram a natureza ondulatória dos elétrons e confirmaram a relação de De Broglie (Equação 2) para os elétrons.

No ano seguinte, George Paget Thomson (1892-1975) observou padrões de difração de elétrons ao fazê-los passar por uma folha muito fina de ouro. G. P. Thomson era filho de J. J. Thomson, o cientista que descobriu o elétron (veja a Aula 1 – O átomo e a Física).

Posteriormente, foram observadas as difrações de partículas neutras, como átomos de He , moléculas de H_2 e nêutrons, sendo que as experiências de difração dos nêutrons levaram a técnicas valiosas de investigação da estrutura de cristais. Técnicas que são complementares à difração de raios X.

A partícula quântica

Na Aula 3 e nesta, as nossas concepções de partícula e de onda, que antes eram consideradas distintas, começaram a se mesclar.

Devemos lembrar que, para a Física Clássica, uma partícula ideal era um objeto com dimensão nula. Já uma onda ideal tem comprimento infinito e uma frequência única. Partícula ideal e onda ideal são modelos de simplificação para as partículas e ondas reais, que podem ser tidas, respectivamente, como um objeto bem localizado e uma entidade que se estende pelo espaço.

A comprovação experimental da natureza dual das ondas e também da matéria nos leva a um novo modelo de simplificação para representar essas entidades que denominaremos **partícula quântica**.

Assim, devemos nos perguntar: o que é uma partícula quântica? Quais as suas características?

Uma partícula quântica, ao mesclar propriedades das partículas ideais e das ondas ideais, pode ser tida como um pacote localizado de ondas que está restrito a uma certa região do espaço e com frequência definida em certo intervalo de frequência. Na Figura 3, vemos uma representação pictórica de uma partícula quântica localizada sobre o eixo x de um sistema de referência. A partícula de matéria, se a detectássemos, estaria em algum lugar entre o início e o fim da região do pacote de onda, mas a sua posição não é exatamente definida. Voltaremos a discutir esses pontos em nossas próximas aulas.

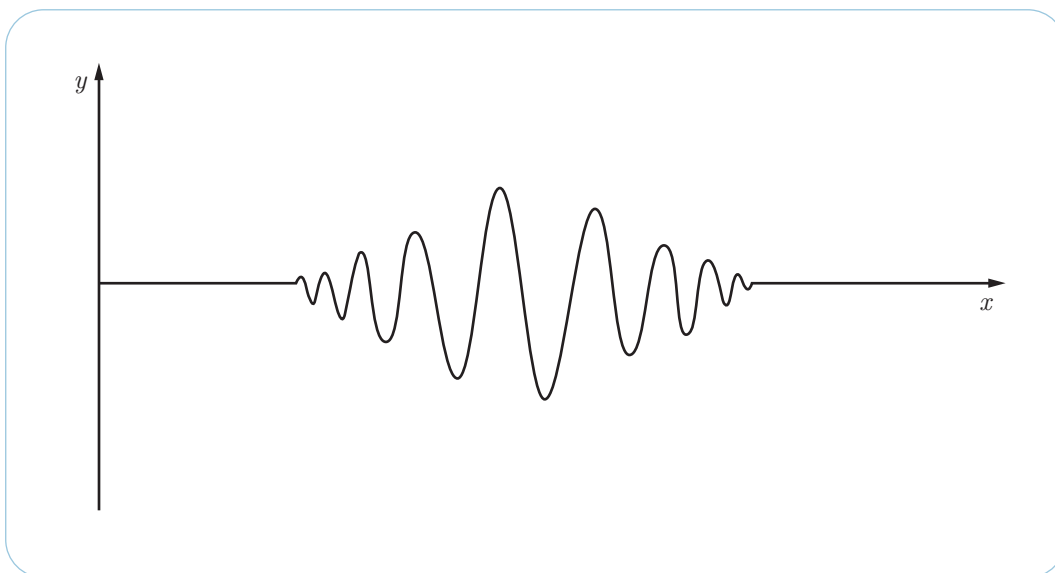


Figura 3 – Representação do pacote de ondas associado a uma partícula quântica.

Por hora, é muito importante ressaltarmos que as propriedades ondulatórias e corpusculares desse **pacote de ondas** não podem ser separadas e, tão pouco, podem ser evidenciadas pelo mesmo experimento. Ou seja, a partícula quântica tem, simultaneamente, as propriedades de partícula e de onda, mas estas propriedades só são evidenciadas em separado e dependendo do tipo de interação a que está sujeita a partícula que vamos observar.

Por exemplo, se um elétron de um material interagir com um fóton e for espalhado, a interação e o respectivo espalhamento serão regidos pelas propriedades corpusculares do elétron e do fóton. Mas se fazemos incidir um elétron em um material onde o espaçamento entre os planos interatômicos é comparável ao comprimento de onda de De Broglie associado ao elétron, o seu espalhamento será regido por suas propriedades ondulatórias e observaremos sua difração. Ou seja, o comportamento ondulatório ou corpuscular de uma partícula será evidenciado pelo tipo de experimento preparado para observá-la, sendo o processo de observação que determina se a partícula irá se comportar como onda ou como corpúsculo.

A natureza ondulatória da descrição das partículas proposta por De Broglie foi extremamente importante para a formulação da Física Quântica como uma teoria física completa, que é independente dos princípios e conceitos da Física Clássica. A aplicação destes princípios e conceitos permitiu diversos avanços tecnológicos, dos quais, no decorrer de nossa disciplina, ficaremos conhecendo alguns.

Na próxima seção, apresentaremos o funcionamento do microscópio eletrônico, que tem nas propriedades ondulatórias dos elétrons seu princípio de funcionamento.

Os microscópios eletrônicos

A observação das propriedades ondulatórias das partículas materiais permitiu alguns desenvolvimentos tecnológicos importantes. Dentre eles, talvez o mais importante tenha sido a construção dos microscópios eletrônicos, que permitem criar uma imagem de um objeto ou amostra usando elétrons de altas velocidades no lugar de luz visível ou outras ondas eletromagnéticas.

O microscópio eletrônico foi inventado em 1933 pelo alemão Ernst Ruska (1906–1988) e vem sendo aperfeiçoado desde então. Nesses aparelhos, faz-se incidir sobre a amostra um feixe de elétrons de altas velocidades, focalizados por um campo eletromagnético. Os microscópios eletrônicos produzem imagens detalhadas com uma ampliação superior a 250.000 vezes. Ao mostrar imagens de objetos infinitamente menores que os observados ao microscópio ótico, o microscópio eletrônico contribuiu para o progresso do conhecimento da estrutura da matéria e foi crucial no desenvolvimento da Biologia celular e molecular, permitindo observações diretas e precisas de células e organismos microscópicos como vírus.

As ampliações fantásticas são possíveis, pois os elétrons, por serem partículas carregadas, interagem eletricamente com a amostra no microscópio e se espalham de acordo com a forma e a densidade das várias partes da amostra, fornecendo uma maneira de visualizá-la.

Os microscópios normais ou microscópios óticos usam luz visível para construir a imagem da amostra que só pode ter dimensões comparáveis ao comprimento de onda da luz incidente, ou seja, só pode ter dimensões entre 0,4 e 0,7 micrômetros ($1 \mu m = 10^{-6} m$), vindo daí o nome microscópio.

Já os microscópios eletrônicos podem utilizar elétrons acelerados a altas velocidades e com comprimentos de onda menores que $1 nm$ ($10^{-9} m$) e, assim, podem visualizar amostras mais de mil vezes menores que as observadas em microscópios comuns.

Se fôssemos, por exemplo, utilizar fótons para observar tais amostras, teríamos que ter fótons com comprimentos de onda da ordem de 1 nm que estão na região dos raios X e, por não terem carga elétrica, tendem a atravessar amostras tão pequenas sem interagir e nem serem espalhados. Por isso, não é possível se construir um microscópio utilizando fótons para observar amostras tão diminutas.

Basicamente, existem três tipos de microscópios eletrônicos: o de transmissão; o de varredura; e o de tunelamento.

O **microscópio eletrônico de transmissão (MET)**, cujo esquema é mostrado na Figura 4, possui várias lentes magnéticas, além de bobinas eletromagnéticas, localizadas ao longo do caminho do feixe de elétrons. A função das lentes é, principalmente, a colimação do feixe de elétrons produzido pelo canhão de elétrons. Os elétrons, que formam um feixe paralelo e de intensidade suficiente, incidem sobre a amostra e são difratados por ela. A lente do projetor irá formar a primeira imagem da distribuição angular dos feixes eletrônicos difratados pela amostra, imagem que pode ser novamente ampliada pelo uso de outras lentes magnéticas.

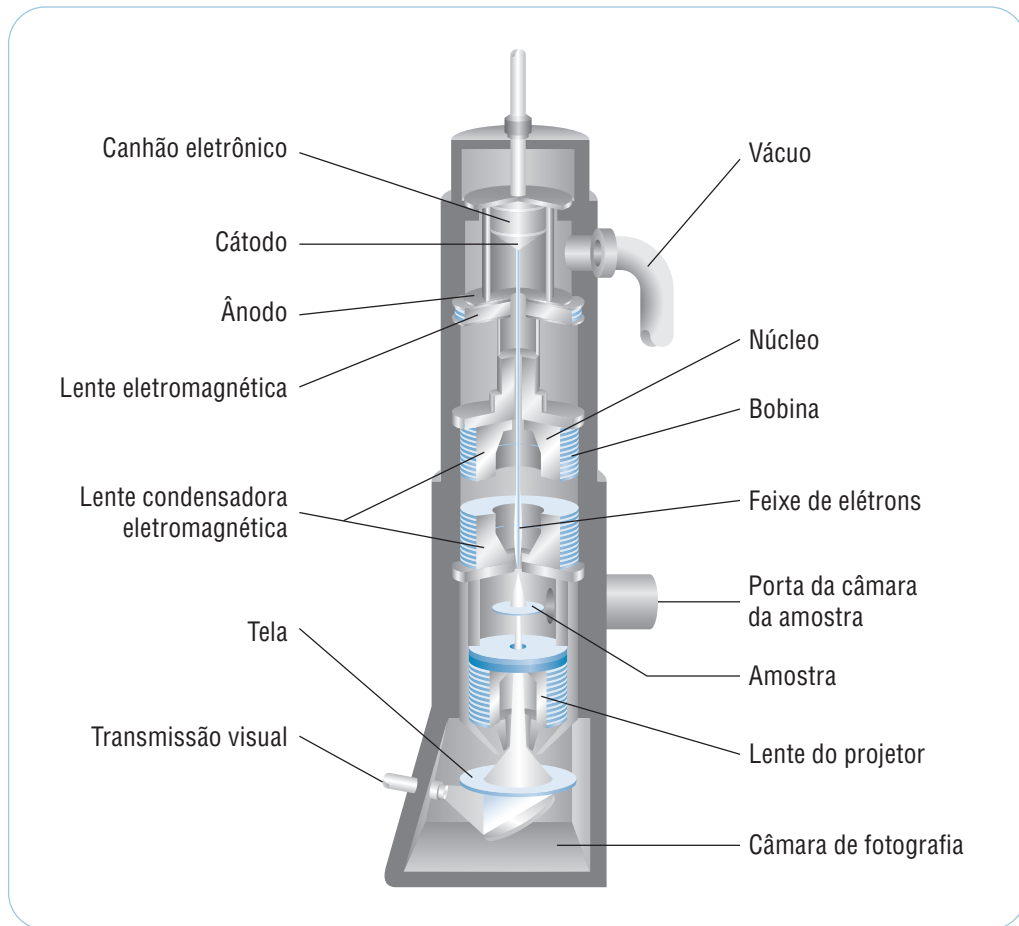


Figura 4 – Esquema de um microscópio eletrônico de transmissão.

O **microscópio eletrônico de varredura (MEV)** é um tipo de microscópio eletrônico que usa, no geral, feixes de elétrons com energia menor (comprimento de onda maior) que a energia dos feixes de elétrons utilizados nos microscópios eletrônicos de transmissão. Por isso, nos MEV's, os elétrons do feixe são espalhados pela superfície do material e podem produzir imagens de alta resolução da superfície da amostra. Devido à maneira como são criadas, as imagens de MEV tem uma aparência tridimensional característica e são úteis para avaliar a estrutura superficial e as falhas nessa estrutura quase a nível atômico.

O **microscópio eletrônico de tunelamento (MET)** utiliza feixes de elétrons preparados para interagirem com os átomos da amostra via efeito túnel e, dessa forma, as imagens obtidas com esse tipo de microscópio podem mostrar até os átomos do material. Na Aula 7 (A equação de Schrödinger), discutiremos o efeito túnel e poderemos entender melhor o funcionamento dos microscópios eletrônicos de varredura.

No estudo e análise de materiais, os vários tipos de microscopias são utilizados, cada uma com suas vantagens e desvantagens. Na verdade, as várias técnicas de microscopia são complementares e cada uma tem seu campo específico de aplicação, mesmo a microscopia ótica tem vasto campo de atuação. Destacando-se a principal potencialidade de cada uma, podemos afirmar que:

- **microscopia ótica:** utiliza luz visível para observar as amostras, permite a análise de grandes áreas em curto espaço de tempo, além de ser de utilização simples, rápida e pouco dispendiosa;
- **microscopia eletrônica de transmissão:** permite a análise de defeitos e fases internas das amostras;
- **microscopia eletrônica de varredura:** excelente para se estudar irregularidades superficiais, a nível quase atômico, em amostras e objetos;
- **microscopia de tunelamento:** por apresentar excelente resolução, permite estudos difíceis de serem realizados com as outras técnicas, tais como observação de defeitos puntiformes e visualização de átomos e aglomerados de átomos.

É muito importante ressaltarmos que o aumento da energia (velocidade) do feixe de elétrons e conseqüente diminuição de seu comprimento de onda não irá, necessariamente, aumentar a resolução da espectroscopia eletrônica. Aumentando-se a energia dos elétrons e, conseqüentemente, diminuindo-se o seu comprimento de onda, estamos diminuindo o tamanho da região da amostra ou estrutura com a qual o elétron irá interagir, mas, para formar a imagem, precisamos detectar esses elétrons difratados pela amostra e interpretar os padrões de difração que eles apresentam, o que é feito pela lente do projetor (veja Figura 4), uma lente eletromagnética controlada por uma corrente elétrica. A maior limitação prática dos microscópios eletrônicos atuais está relacionada ao controle das correntes elétricas das lentes eletromagnéticas dos microscópios e são essas lentes que irão resolver o feixe de elétrons difratado pela amostra e permitir-nos interpretá-lo como uma imagem.

Resumo

Nesta aula, aprendemos que todas as formas de matéria, assim como as ondas eletromagnéticas, apresentam uma natureza dual, comportando-se como onda e como corpúsculo. Descobrimos como calcular o comprimento de onda associado a cada partícula ou objeto e também aprendemos que, para corpos macroscópicos, esse comprimento de onda é muito menor que qualquer abertura por onde o corpo possa passar e, dessa forma, ser difratado. Também vimos que o comportamento ondulatório das partículas materiais, como elétrons, nêutrons, átomos e moléculas, já foi comprovado experimentalmente e que uma importante aplicação das propriedades ondulatórias dos elétrons é a microscopia eletrônica, que é utilizada para produzir imagens de estruturas e objetos milhares de vezes menores que o comprimento de onda da luz visível.

Autoavaliação

1

Um elétron e um próton não-relativísticos estão em movimento e têm o mesmo comprimento de onda de De Broglie. Quais das seguintes grandezas também têm o mesmo valor para estas partículas?

- a) Velocidade escalar
- b) Energia cinética
- c) Momento
- d) Frequência

2

Na Aula 3 (O efeito fotoelétrico e o efeito Compton), vimos que um elétron tem designado para si o comprimento de onda Compton. Nesta aula, vimos que o mesmo elétron pode ter designado para si o comprimento de onda de De Broglie. Qual(is) desses comprimentos de onda é um comprimento de onda físico real associado ao elétron? Justifique.

3

Uma pedra de massa igual a $50,0\text{ g}$ é arremessada com velocidade escalar igual a $10,0\text{ m/s}$.

- a)** Determine o comprimento de onda de De Broglie dessa pedra e compare-o com o diâmetro normal de uma pedra (3 cm).
- b)** Poderíamos criar um experimento para observar a difração dessa pedra? Justifique.

4

Uma partícula de massa m e carga elétrica q é acelerada por uma diferença de potencial V . Supondo que essa partícula desloca-se com velocidade não-relativística, calcule o seu comprimento de onda de De Broglie.

Dica – Para calcular a energia da partícula, utilize a relação entre o trabalho realizado sobre uma carga elétrica em uma diferença de potencial obtida na disciplina Eletromagnetismo. E para obter o momento em termos da energia, lembre-se da disciplina Movimento e Mecânica Clássica.

5

Se a partícula do exercício anterior for um elétron acelerado por uma diferença de potencial de $50,0\text{ volts}$, qual é o seu comprimento de onda?

6

Quais as vantagens e desvantagens de um microscópio eletrônico em relação a um microscópio ótico?

7

O poder de resolução mais elevado de um microscópio, a princípio, só estaria limitado pelo comprimento de onda utilizado; isto é, o menor detalhe que pode ser separado tem as dimensões mais ou menos iguais ao comprimento de onda. Suponhamos que queremos “olhar” para dentro de um átomo. Admitindo que o diâmetro do átomo seja 100 pm ($1\text{ pm} = 10^{-12}\text{ m}$), significa que desejamos ver detalhes da ordem de 10 pm , aproximadamente.

- a)** Se for usado um microscópio eletrônico, qual a energia mínima que os elétrons devem ter?
- b)** Se for usado um microscópio ótico, qual a energia mínima dos fótons? Em que região do espectro eletromagnético estão esses fótons?
- c)** Qual dos dois microscópios parece mais prático para esse fim? Justifique.

Referências

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. **Física moderna**: origens clássicas e fundamentos quânticos. São Paulo: Editora Campus, 2006.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos e partículas. São Paulo: Editora Campus, 1979.

NUSSENZVEIG, H. Moysés. **Curso de física básica 4**: ótica, relatividade, física quântica. São Paulo: Editora Edgard Blücher, 1998.

SERWAY, Raymond A.; JEWETT JÚNIOR, John W. **Princípios de física**: óptica e física moderna. São Paulo: Editora Thomson, 2005. v 4.

O Princípio da Correspondência e o Princípio da Incerteza

Aula

6



Apresentação

Estamos estudando o surgimento da Física Quântica a partir dos estudos de fenômenos não explicados pela Física Clássica. Entretanto, a Física Clássica mostra-se correta ao explicar diversos fenômenos presentes em nosso cotidiano. Assim, qualquer nova teoria que explique os fenômenos inacessíveis à Física Clássica deve reduzir-se a ela na explicação dos fenômenos de nosso cotidiano. A regra que determina o limite em que uma nova teoria física deve reduzir-se à Física Clássica é o Princípio da Correspondência.

Por outro lado, a interação do observador com o sistema a ser observado nem sempre pode ser determinada ou desprezada, por isso há uma limitação natural na precisão das medidas simultâneas de posição e momento feitas em um sistema. Tal limitação é descrita pelo Princípio da Incerteza.

Objetivos

- 1** Entender o Princípio da Correspondência e a relação entre a validade de uma nova teoria física e a validade da Física Clássica.
- 2** Entender o Princípio da Incerteza de Heisenberg e a falta de determinismo da Física Quântica.
- 3** Perceber que o Princípio da Incerteza é uma limitação natural de qualquer sistema físico e que está relacionado ao ato de observação do sistema.



Introdução



“Existe um limite para os nossos poderes de observação e para o mínimo de perturbação que acompanha o nosso ato de observação, um limite que é inerente à natureza das coisas e que nunca pode ser vencido pelo aperfeiçoamento da técnica e da habilidade do observador”. Paul Dirac (1902-1984).

Nas aulas anteriores desta disciplina, estudamos as limitações da Física Clássica em explicar alguns fenômenos naturais e as primeiras tentativas de explicar esses fenômenos, que nos apresentaram conceitos novos e, alguns deles, bastante surpreendentes. Dentre esses conceitos, podemos citar a quantização da matéria, da carga elétrica e da energia e a dualidade da luz, das ondas eletromagnéticas e das partículas materiais.

Esses conceitos, suas implicações e alguns princípios básicos permitiram a formulação da Física Quântica tal como conhecemos hoje e muitos dos avanços científicos e tecnológicos do último século.

Nesta sexta aula, vamos estudar dois princípios físicos extremamente importantes para a Física Quântica: o **Princípio da Correspondência** e o **Princípio da Incerteza**.

Na verdade, esses princípios são extremamente importantes para toda a Física. O primeiro representa a relação entre a Física Clássica e qualquer nova teoria física. E o segundo representa uma restrição às medidas observacionais de qualquer sistema físico, mas suas implicações e limites só são percebidos no estudo dos sistemas quânticos.

O Princípio da Correspondência

O Princípio da Correspondência foi postulado por Niels Bohr (lembre-se da Aula 4 - Os espectros atômicos e o modelo de Bohr), em 1923, como uma regra para testar a validade das previsões da teoria quântica que estava surgindo e também como uma forma de explicar os limites onde a Física Clássica começa a deixar de valer, e só é possível explicar os sistemas físicos em termos de uma teoria quântica.

Para entender como Bohr chegou a esse princípio, vamos começar lembrando que, como foi apresentado na aula 4, ele havia proposto um modelo para o átomo de hidrogênio fazendo uso de alguns postulados. Esse modelo previa, com bastante acurácia, os espectros atômicos do átomo de hidrogênio e fazia uso de números inteiros relacionados às órbitas dos elétrons no átomo e às energias dos elétrons em cada órbita. A energia do elétron no n -ésimo nível de energia é dada por (Equação 16 da aula 4):

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2 n^2}. \quad \text{Eq. (1)}$$

onde m e e são, respectivamente, a massa e a carga elétrica do elétron; \hbar é a constante de Planck dividida por 2π ; e n é um inteiro positivo. A Equação 1 pode ser reescrita como:

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2}. \quad \text{Eq. (2)}$$

onde E_1 é a energia do nível fundamental ou nível de menor energia do átomo de hidrogênio e é definida como

$$E_1 \equiv \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}.$$

Calculando-se a diferença de energia entre dois níveis subsequentes, n e $n+1$, obtemos:

$$E_{n+1} - E_n = -E_1 \left[\frac{1}{(n+1)^2} - \frac{1}{n^2} \right].$$
$$E_{n+1} - E_n = E_1 \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \quad \text{Eq. (3)}$$

Da Equação 3, vemos que, à medida que o valor de n aumenta, a diferença de energia entre os dois níveis subsequentes vai diminuindo. Compare, por exemplo, as diferenças de energia entre níveis subsequentes calculadas para alguns valores de n mostradas na tabela a seguir.

n	$E_{n+1} - E_n \text{ (eV)}$
1	10,2
5	0,1662
1000	$1,997 \times 10^{-9}$

Dessa forma, à medida que n aumenta, fica cada vez mais difícil distinguir a separação entre dois níveis de energia subsequentes do átomo de hidrogênio, ou seja, o espectro do átomo de hidrogênio tende a um espectro contínuo, como os espectros previstos pela Física Clássica, e não é possível perceber qualquer quantização da energia emitida nas transições do elétron de um nível para outro.

A partir da análise do seu modelo do átomo de hidrogênio e imaginando que todo sistema quântico pudesse ser especificado por um ou mais números quânticos, Bohr enunciou o Princípio da Correspondência.

As previsões da Física Quântica para o comportamento de qualquer sistema físico devem corresponder às previsões da Física Clássica no limite em que os números quânticos que especificam o estado de um sistema se tornam muito grandes.

A primeira parte desse princípio é óbvia, pois é esperado que a Física Quântica se reduza à Física Clássica na descrição de um sistema que se comporta classicamente.

Mas, o princípio da correspondência, como enunciado acima, não só informa que a Física Quântica deve ter a Física Clássica como caso particular na descrição de sistemas que se comportem classicamente, mas nos fornece a regra para identificar se um sistema se comporta clássica ou quanticamente, ou seja, esse princípio nos permite identificar se devemos usar a Física Clássica ou a Física Quântica para descrever um respectivo sistema. Basta verificarmos se os números quânticos que descrevem o sistema são muito grandes.

O princípio da correspondência pode ser enunciado em uma forma mais geral, válida para toda e qualquer nova teoria física.

Nos limites de validade da Física Clássica, os resultados de qualquer nova teoria física devem se reduzir aos resultados da Física Clássica.

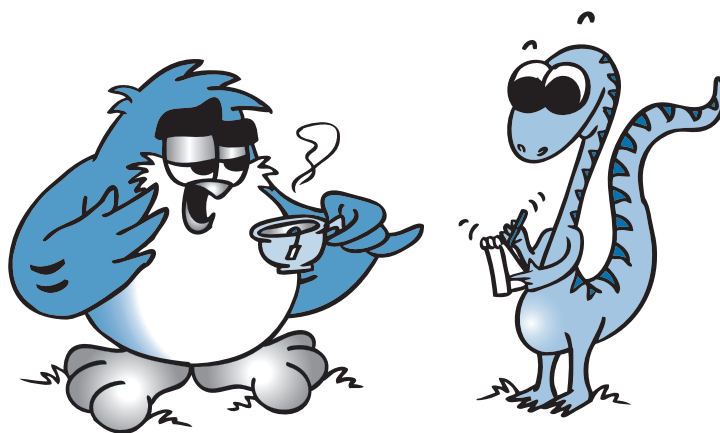
Apresentado dessa forma, o Princípio da Correspondência nos explica, por exemplo, por que a Teoria da Relatividade Especial reduz-se à Mecânica Newtoniana quando a velocidade dos objetos e sistemas estudados é muito menor que a velocidade da luz no vácuo.

O Princípio da Incerteza

A Física Clássica faz uso de considerações probabilísticas e análise estatística como ferramentas matemáticas para descrever sistemas muito complicados, mas tanto a Física Clássica quanto suas leis básicas são determinísticas, no sentido de que sempre é possível determinar a posição e a velocidade de uma partícula ou objeto em um dado instante e, com essas informações e as equações de movimento da partícula, prever a posição exata da partícula em qualquer instante no passado ou futuro.

Além disso, mesmo sabendo que a medida da posição e da velocidade de uma partícula possui incertezas experimentais, não há barreira fundamental para o aperfeiçoamento das técnicas ou dos procedimentos de medida, ou seja, com o aperfeiçoamento das técnicas de medida, seria possível realizar tais medidas com incertezas arbitrariamente pequenas. Além disso, para a Física Clássica, qualquer interação do observador com o sistema ao medir os estados deste podem ser previstas ou controladas de forma que as incertezas nas medidas do sistema podem ser tão pequenas quanto se deseje.

Já a Física Quântica, por outro lado, tem na interpretação probabilística de suas equações uma ferramenta fundamental na descrição de qualquer sistema físico (vamos estudar mais detalhes dessa interpretação a partir da próxima aula). E, além disso, as interações do observador com o sistema ao realizar uma medida nem sempre podem ser determinadas ou desprezadas. Tais considerações implicam que, para a Física Quântica, há uma barreira ou limitação fundamental para a realização de medidas em um sistema, de modo que as incertezas nessas medidas sejam arbitrariamente pequenas.



O Princípio da Incerteza para posição e momento



Figura 1 – Werner Karl Heisenberg (1901-1976).

Em 1927, Werner Heisenberg (Figura 1) expressou a limitação na determinação conjunta da posição e da velocidade (ou, equivalentemente, do momento $p = mv$) de uma partícula através da expressão:

$$\delta x \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad \text{Eq. (4)}$$

Onde δx é a incerteza na medida de posição da partícula; δp_x é a incerteza na medida do momento da partícula na direção x ; e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π .

O Princípio da Incerteza, expresso pela Equação 4, representa um compromisso entre as incertezas relativas da posição e do momento de uma partícula. Ele não significa que a incerteza na medida da posição ou do momento não pode ser arbitrariamente pequena. Significa que: se a incerteza na posição for arbitrariamente pequena, a incerteza no momento deverá ser grande o suficiente para respeitar a desigualdade da Equação 4; e se a incerteza na medida do momento for arbitrariamente pequena, a incerteza na medida da posição deve ser grande o bastante pra respeitar tal relação.

Há relações correspondentes para as outras componentes do momento e da posição: $\delta y \delta p_y \geq \hbar/2$ e $\delta z \delta p_z \geq \hbar/2$. Dessas relações, vemos que não há qualquer restrição, por exemplo, para as medidas simultâneas da posição x de uma partícula e da componente p_y de seu momento.

O Princípio da Incerteza é uma característica inerente à natureza e, portanto, o compromisso entre as incertezas não depende do grau de refinamento do experimento realizado.

Neste ponto, precisamos entender como o Princípio da Incerteza pode restringir ou limitar os resultados de um experimento. Vamos analisar quantitativamente a limitação imposta por esse princípio aos experimentos com corpos macroscópicos e com partículas microscópicas.

Exemplo 1 – Experimento com bala de fuzil

Imaginemos que um experimento seja montado para medir, simultaneamente, a posição e o momento de uma bala de fuzil que tem massa igual a 100 gramas. A velocidade medida para a bala é de 300 m/s com uma incerteza de $0,01\%$. Nesse caso, determinemos os itens a seguir.

a) O momento e a incerteza na medida do momento da bala de fuzil.

Essa bala tem uma velocidade não relativística que podemos tomar como sendo na direção x , dessa forma seu momento p_x é dado por:

$$p_x = mv_x = 0,1(\text{kg}) \times 300 (\text{m/s}) = 30\text{kg} \cdot \text{m/s}.$$

E a incerteza na componente x do momento, pela teoria de propagação de erros, é dada por:

$$\delta p_x = \sqrt{\left(\frac{\partial p_x}{\partial m}\right)^2 (\delta m)^2 + \left(\frac{\partial p_x}{\partial v_x}\right)^2 (\delta v_x)^2}$$

$$\delta p_x = \sqrt{v_x^2 (\delta m)^2 + m^2 (\delta v_x)^2} \quad \text{Eq. (5)}$$

Supondo-se que a incerteza na medida da massa é desprezível, a Equação 5 reduz-se a:

$$\delta p_x = m \delta v_x \quad \text{Eq. (6)}$$

Substituindo os valores numéricos temos:

$$\delta p_x = 0,1(\text{kg}) \times 300 (\text{m/s}) \times 0,001 = 0,003\text{kg} \cdot \text{m/s}$$

b) A incerteza mínima que poderia ser medida para a posição da bala.

Usando a expressão matemática do Princípio da Incerteza (Equação 4), temos que:

$$\delta x \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi}$$

$$\delta x \geq \frac{h}{4\pi \delta p_x} \quad \text{Eq. (7)}$$

Substituindo-se os valores numéricos da constante de Planck e da incerteza no momento, temos:

$$\delta x \geq \frac{6,6 \times 10^{-34} (\text{J} \cdot \text{s})}{4 \times \pi \times 3,0 \times 10^{-3} (\text{kg} \cdot \text{m/s})} = 1,75 \times 10^{-32} \text{m}$$

A incerteza fundamental calculada para a posição da bala é cerca de 10^{-17} vezes o tamanho do núcleo atômico. O Princípio da Incerteza não representa qualquer limitação prática na determinação da posição da bala. O mesmo pode ser dito para o movimento de quaisquer outros objetos macroscópicos.

Exemplo 2 – Experimento com elétron

Imaginemos que um experimento seja montado para medir, simultaneamente, a posição e o momento de um elétron que tem massa igual a $9,11 \times 10^{-31}$ quilogramas. Vamos supor que a velocidade medida para o elétron é, também, igual a 300 m/s com uma incerteza de $0,01\%$. Nesse caso, determinemos os itens a seguir.

a) O momento e a incerteza na medida do momento do elétron.

A velocidade do elétron é não-relativística e, como no exemplo anterior, podemos considerar que está na direção x , dessa forma seu momento p_x é dado por:

$$p_x = mv_x = 9,1 \times 10^{-31} (\text{kg}) \cdot 300 (\text{m/s}) = 2,7 \times 10^{-28} \text{kg} \cdot \text{m/s}$$

E a incerteza no momento, dada pela Equação 5, vale:

$$\delta p_x = m \delta v_x = 9,1 \times 10^{-31} (\text{kg}) \times 300 (\text{m/s}) \times 0,001 = 2,7 \times 10^{-32} \text{kg} \cdot \text{m/s}$$

b) A incerteza fundamental na medida da posição do elétron.

Substituindo os valores numéricos na expressão do Princípio da Incerteza (Equação 7), temos:

$$\delta x \geq \frac{h}{4\pi \delta p_x} = \frac{6,6 \times 10^{-34} (\text{J} \cdot \text{s})}{4 \times \pi \times 2,7 \times 10^{-32} (\text{kg} \cdot \text{m/s})} = 2,0 \times 10^{-3} \text{m}$$

Neste caso, a incerteza fundamental calculada para a posição do elétron, $2,0 \text{ mm}$, é cerca de 10.000 vezes o diâmetro de um átomo.

Para objetos microscópicos, tais como o elétron, o Princípio da Incerteza representa uma limitação prática na determinação precisa e simultânea da posição e do momento dessas partículas.

Nos exemplos anteriores, percebemos que, embora haja uma limitação fundamental na determinação precisa e simultânea da posição e do momento de uma partícula, essa limitação só representa um limite prático para o caso do movimento de partículas microscópicas.

Por mais que refinemos o experimento para melhorar a precisão das medidas, o produto das incertezas obtidas obedecerá à relação imposta pelo Princípio da Incerteza, mas esse limite só será relevante para o movimento de objetos microscópicos.



Atividade 1

A velocidade de um elétron em um acelerador de partículas é medida como sendo $2,00 \times 10^8 \text{ m/s}$ com uma incerteza de 0,001%. Dentro de quais limites pode-se determinar a posição desse elétron ao longo da direção de sua velocidade?



Atividade 2

A localização de uma partícula é medida e especificada como ocorrendo exatamente em $x=0$, com incerteza nula. Como isso afeta a nossa habilidade de medir, simultaneamente, sua componente de velocidade da direção y ?

O microscópio de Bohr

Para entendermos a origem física do Princípio da Incerteza, vamos usar uma experiência imaginária devida a Niels Bohr, na qual se usaria um microscópio ótico ideal para observar um elétron e determinar as incertezas em sua posição e momento. Esse experimento imaginário também nos ajudará a perceber que, por mais que tentemos refinar o experimento para observar mais acuradamente posição e momento de uma partícula microscópica, não conseguimos ir além da relação expressa pelo Princípio da Incerteza.

Devemos lembrar que para observar um elétron devemos iluminá-lo com luz ou com outro tipo de onda eletromagnética, pois, na verdade, o que detectamos ao “observar” um elétron é o fóton espalhado por ele. O esquema do microscópio de Bohr é mostrado na Figura 2, em que temos também a ilustração do espalhamento do fóton pelo elétron e a figura de difração que será observada como imagem do elétron.

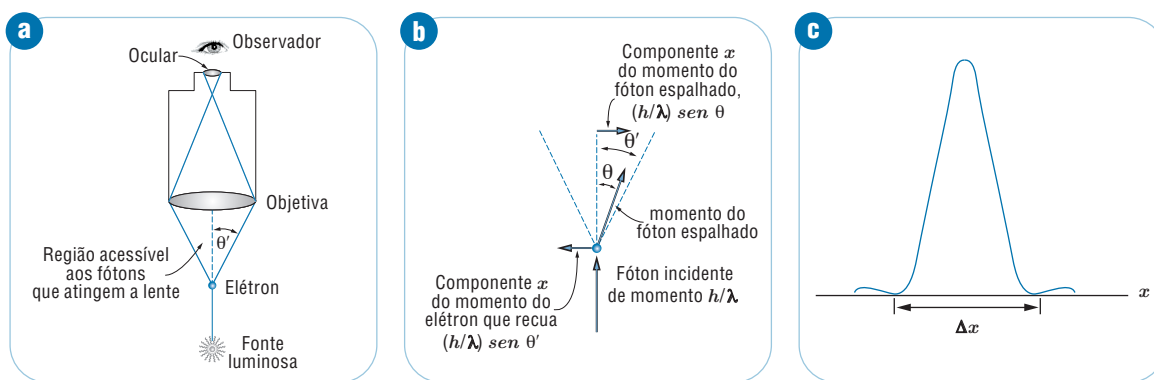


Figura 2 – Experiência imaginária do microscópio de Bohr: (a) esquema do equipamento; (b) espalhamento do fóton pelo elétron; (c) figura de difração da imagem do elétron vista pelo observador.

Já ao iluminarmos o elétron para observá-lo e mesmo antes de fazer qualquer cálculo ou suposição matemática, temos o Princípio da Incerteza presente na experiência, uma vez que o fato de observarmos o elétron fazendo o fóton interagir com ele perturba-o de uma forma que essa perturbação, como veremos logo a seguir, não pode ser determinada. Assim, o Princípio da Incerteza diz respeito à interação do observador com a coisa observada. Mas, voltemos ao experimento.

No instante em que iluminamos o elétron, ele recua devido ao efeito Compton na interação com cada fóton que chega a ele. Vamos supor que este é um experimento ideal e que é possível observarmos o elétron se apenas um fóton interagir com ele. O momento do fóton é $p = h/\lambda$. Esse fóton, que chega à lente do microscópio, pode ser espalhado em qualquer direção dentro da região angular $2\theta'$ subtendida pela lente objetiva a partir da localização do elétron. Por isso, a interação elétron-fóton não pode ser previamente calculada. Dessa forma, vemos que a componente x do momento do fóton pode variar de $+p \text{ sen}\theta'$ a $-p \text{ sen}\theta'$ e sua incerteza depois do espalhamento vale:

$$\delta p_x = 2p \text{ sen}\theta' = \frac{2h}{\lambda} \text{ sen}\theta' \quad \text{Eq.(8)}$$

A lei de conservação do momento exige que o elétron receba um momento na direção x igual em módulo à variação da componente x do momento do fóton. Assim, a componente x do momento do elétron tem a mesma incerteza que a componente x do momento do fóton (Equação 8).

Da Equação 8, vemos que para diminuirmos a incerteza na componente x do momento do elétron podemos aumentar o comprimento de onda da luz ou usar um microscópio cuja objetiva subtenda um ângulo menor.

A incerteza na componente x do momento do elétron já foi determinada. E quanto à incerteza na posição x do elétron?

Devemos lembrar que a imagem de um objeto pontual vista através de um microscópio não é um ponto, mas uma figura de difração. Assim, a imagem do elétron aparecerá difusa na lente do microscópio. O poder de resolução do microscópio determina a precisão máxima com a qual podemos localizar o elétron. O poder de resolução de um microscópio é determinado pela largura do máximo central de difração, que vale $\lambda/\text{sen } \theta'$. Se tomarmos a largura do máximo central como sendo a medida da incerteza na posição x do elétron, podemos escrever que a incerteza na posição do elétron observado pelo microscópio vale:

$$\delta x = \frac{\lambda}{\text{sen } \theta'} \quad \text{Eq. (9)}$$

Da Equação 9, vemos que para diminuirmos a incerteza na medida da componente x da posição do elétron devemos diminuir o comprimento de onda do fóton que ilumina o elétron ou usar um microscópio cuja objetiva subtenda um ângulo maior. Estes são os procedimentos que aumentam a incerteza na medida do momento.

Assim, do produto das incertezas na componente do momento x (Equação 8) e da posição (Equação 9) do elétron, obtemos:

$$\delta x \delta p_x = \left(\frac{2h}{\lambda} \text{sen } \theta' \right) \left(\frac{\lambda}{\text{sen } \theta'} \right) = 2h \quad \text{Eq. (10)}$$

Analisando a Equação 9, vemos que qualquer procedimento usado para diminuir a incerteza no momento (aumentar λ ou diminuir θ') aumenta a incerteza na posição e vice-versa. A Equação 10 concorda com o limite mínimo fixado para o produto das incertezas δp_x e δx (Equação 4).

Na prática, uma experiência utilizada para medir simultaneamente a posição e momento de um elétron fornece resultados piores que o expresso na Equação 10, pois esta foi obtida considerando-se a situação mais ideal possível.

O resultado expresso pela Equação 10 foi obtido diretamente a partir de fenômenos físicos mensuráveis (como o efeito Compton e o poder de resolução de uma lente) e advém da quantização da radiação. Pois, para observarmos um elétron, devemos ter, no mínimo, um fóton o iluminando. Quando espalhado pelo elétron, o fóton realiza a interação necessária entre o microscópio e o elétron. E essa interação perturba o elétron de uma forma que não pode ser exatamente prevista ou controlada, de forma que a posição e momento do elétron não podem ser completamente conhecidos após a medida.

Concluindo: não é possível melhorar um experimento ou as técnicas de medida de modo que as incertezas nas medidas simultâneas da posição e do momento de uma partícula desrespeitem a relação de incerteza expressa pela Equação 4. A interação entre observador e observado sempre existe e no caso de partículas microscópicas essa interação não pode ser desprezada. Da Equação 4, vemos também que a constante de Planck, h , é uma medida da menor perturbação não controlável relacionada a uma medida física.

O Princípio da Incerteza para energia e tempo da medida

O Princípio da Incerteza pode também ser expresso em termos das incertezas na energia medida e no tempo necessário à realização da medida. Nessa forma, o Princípio da Incerteza pode ser escrito como:

$$\delta E \delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad \text{Eq. (11)}$$

Usando o caso de uma partícula livre, podemos deduzir a forma do Princípio da Incerteza dada pela Equação 11 diretamente de sua expressão dada pela Equação 4. Consideremos um elétron se movendo ao longo do eixo x com energia dada por:

$$E = \frac{p_x^2}{2m}. \quad \text{Eq. (12)}$$

Se p_x tem uma incerteza δp_x , então, a incerteza na energia E é dada por:

$$\delta E = \frac{p_x}{m} \delta p_x = v_x \delta p_x. \quad \text{Eq. (13)}$$

Onde a velocidade v_x pode ser interpretada como a velocidade de recuo do elétron, ao longo do eixo x , ao ser iluminado durante uma medida de posição. Assim, temos que:

$$\delta p_x = \frac{\delta E}{v_x}. \quad \text{Eq. (14)}$$

Se o intervalo de tempo necessário para a medida é δt , a incerteza em sua posição será:

$$\delta x = v_x \delta t \quad \text{Eq. (15)}$$

Substituindo as expressões 13 e 14 na Equação 4, temos que:

$$\delta x \delta p_x = v_x \delta t \frac{\delta E}{v_x} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\delta E \delta t \geq \frac{\hbar}{2},$$

que é exatamente a Equação 11.

Embora demonstrada aqui, considerando-se apenas uma partícula livre, a forma do Princípio da Incerteza expressa na Equação 11 vale em qualquer situação.

Atividade 3

A energia de um fóton emitido por um átomo ao decair do primeiro estado excitado para o estado fundamental é igual a $3,0 \times 10^{-21} \text{ J}$. Sabendo que a incerteza na energia do átomo é da mesma ordem da energia do fóton emitido, determine a vida média do estado excitado do átomo.

Algumas implicações do Princípio da Incerteza

Uma das implicações mais básicas do Princípio da Incerteza é o fato de que toda medida feita em um sistema irá perturbá-lo. Não há como medir a posição e velocidade de uma partícula sem interferir em seu movimento futuro. Nos sistemas clássicos, essa perturbação é desprezível e seus efeitos são irrisórios em comparação com o comportamento do sistema, mas nos sistemas quânticos essas perturbações são extremamente importantes e tornam impossível a determinação precisa do estado do sistema.

A impossibilidade da determinação do estado do sistema com precisão e a interpretação probabilística implicam que se deve abandonar o determinismo na descrição dos sistemas físicos. Os sistemas que só podem ser descritos em termos da Física Quântica devem, necessariamente, ter suas grandezas e observáveis expressos em termos de probabilidades.

Assim, se não podemos determinar a posição e velocidade de um sistema ou partícula em um dado instante de tempo, não podemos prever o seu comportamento futuro (ou passado) com precisão. Podemos apenas calcular a probabilidade de, em um instante de tempo qualquer, encontrar o sistema ou partícula em certa posição e com uma certa velocidade.

Além disso, o Princípio da Incerteza permite-nos entender como é possível que a radiação (e também a matéria) tenha uma natureza dual e que, ainda assim, só possamos observar seu caráter ondulatório se não observarmos seu caráter corpuscular, e vice-versa. Já que um experimento que seja preparado para forçar a radiação a revelar seu caráter ondulatório irá suprimir fortemente o caráter corpuscular. E se um experimento for preparado para acentuar o caráter corpuscular, fará o caráter ondulatório desaparecer. Podemos observar o comportamento ondulatório ou o corpuscular da radiação, mas não os dois ao mesmo tempo. Essa impossibilidade é explicada pelo Princípio da Incerteza, de onde percebemos que os comportamentos ondulatório e corpuscular são complementares entre si e não contraditórios. O mesmo é válido para a dualidade onda-partícula da matéria.

Devemos ter sempre em mente que o Princípio da Incerteza é uma consequência da interação do observador com a partícula ou sistema observado. Essa interação, nas escalas microscópicas, não pode ser desprezada ou controlada e, por isso, nunca é possível ter precisões absolutas e simultâneas nas medidas de posição e momento (ou energia e tempo de observação).

Veja também que, novamente, quem dá as regras para a quantificação do mundo quântico é a constante de Planck, h . O fato do valor de h ser pequeno implica que não observamos as consequências e implicações do Princípio da Incerteza nas experiências de nosso cotidiano, ou seja, esse princípio não representa limitação prática às experiências com sistemas macroscópicos.

Para saber mais...

A expressão matemática do Princípio da Incerteza pode ser obtida diretamente do estudo da equação de Schrödinger (que será estudada em nossa próxima aula). Portanto, na teoria de Heisenberg para a Física Quântica essa expressão aparece como um princípio e na teoria de Schrödinger ela aparece como uma consequência.

Leitura complementar

No livro *O Incrível Mundo da Física Moderna*, de George Gamow, há uma discussão completa e muito interessante sobre o que aconteceria com o nosso Universo e o nosso mundo se a constante de Planck tivesse valores diferentes do observado.

Resumo

Nesta aula, aprendemos que a Física Quântica, quando aplicada a sistemas que se comportam classicamente, deve exprimir os mesmos resultados que seriam obtidos usando-se a Física Clássica para descrever tais sistemas. Vimos também que o limite para sabermos se precisamos usar a Física Quântica para estudar um sistema é a ordem dos números quânticos que quantificam o sistema, ou seja, se os números quânticos de um sistema são muito grandes, podemos descrever esse sistema em termos da Física Clássica, pois os resultados serão os mesmos da Física Quântica. Aprendemos ainda que há um limite para a observação de qualquer sistema físico e, dessa forma, não podemos determinar simultaneamente e com precisão arbitrariamente grande a posição e o momento de uma partícula ou sistema. Essa limitação é intrínseca à natureza e não depende do grau de aperfeiçoamento das técnicas de observação e está diretamente relacionada ao fato de que ao observarmos um sistema, o próprio ato de observar, causa uma perturbação no sistema que não pode ser prevista e tampouco controlada.

Autoavaliação

- 1 As órbitas definidas do modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio são consistentes com o Princípio da Incerteza? Justifique.
- 2 Um microscópio, usando fótons, localizou um elétron dentro de uma região de $0,1 \text{ \AA}$. Qual é a incerteza na velocidade desse elétron?

3

A vida média de um estado excitado de certo núcleo atômico é de $1,2 \times 10^{-11}$ s. Qual a incerteza na energia do fóton emitido por esse núcleo ao tornar-se estável?

4

Um microscópio de fótons é usado para localizar um elétron num átomo, num intervalo de distância de 10 pm. Qual é a incerteza mínima na medição do momento do elétron localizado dessa forma?

5

Qual seria a implicação no Princípio da Incerteza se o valor da constante de Planck fosse muito maior do que é? Para entender essa implicação, tome como exemplo um valor de $h=0,1$ J.s para o cálculo da incerteza na posição de uma bola de futebol que tem velocidade igual a $5,00$ m/s medida com uma incerteza de $0,1\%$.

Referências

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. **Física moderna**: origens clássicas e fundamentos quânticos. São Paulo: Editora Campus, 2006.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos e partículas. São Paulo: Editora Campus, 1979.

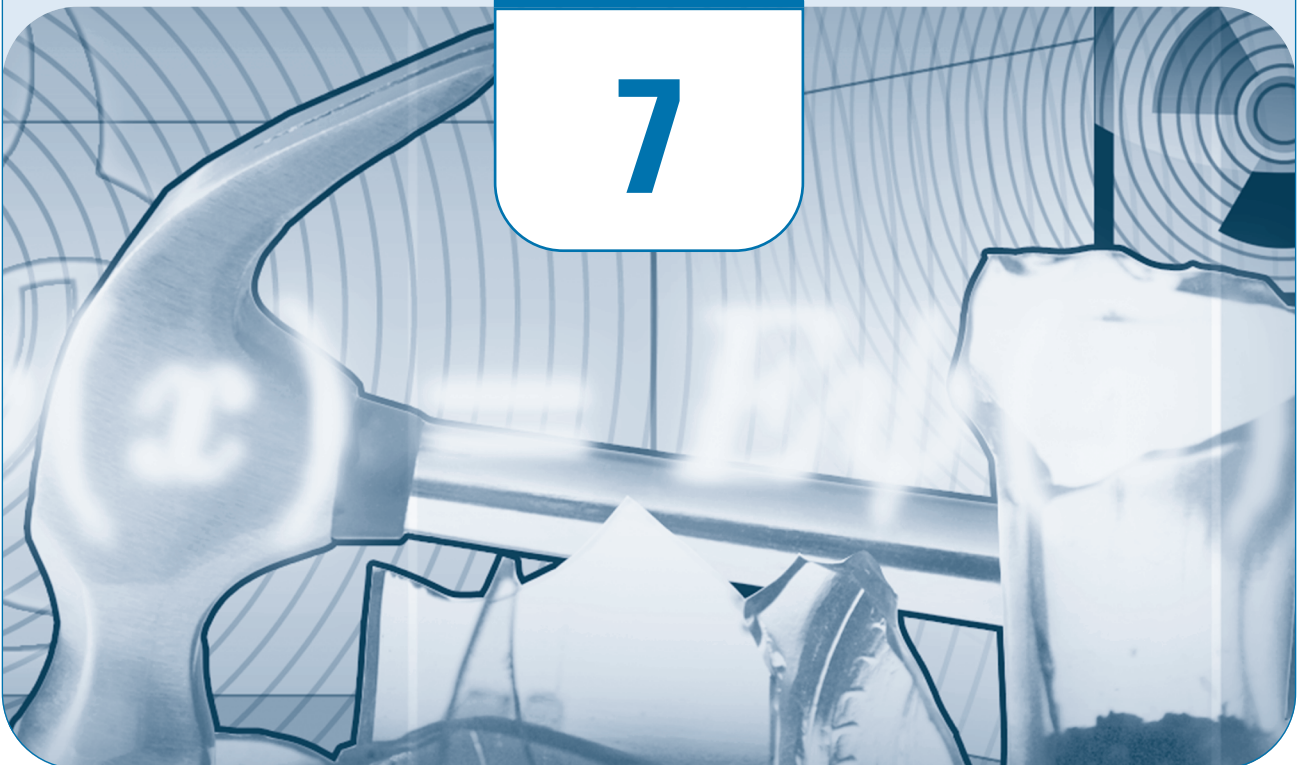
NUSSENZVEIG, H. Moysés. **Curso de física básica 4**: ótica, relatividade, física quântica. São Paulo: Editora Edgard Blucher, 1998.

SERWAY, Raymond A.; JEWETT JÚNIOR, John W. **Princípios de Física**: óptica e física moderna. São Paulo: Editora Thomson, 2005. v 4.

A equação de Schrödinger

Aula

7



Apresentação

Schrödinger publicou em 1926 quatro trabalhos históricos nos quais estabeleceu a base da mecânica quântica, tal como conhecemos atualmente. Nesta aula, apresentaremos a equação de Schrödinger em uma dimensão, resolveremos essa equação para três tipos de potenciais: partícula livre ou potencial nulo, partícula em um poço de potencial infinito e oscilador harmônico simples. Também descreveremos, conceitualmente, o efeito túnel.

Objetivos

- 1** Apresentar as equações de Schrödinger dependente e independente do tempo e a interpretação probabilística da função de onda.
- 2** Aplicar a equação de Schrödinger para o estudo de uma partícula livre.
- 3** Estudar uma partícula em uma caixa de paredes de potencial infinito.
- 4** Aplicar a equação de Schrödinger para o estudo de um sistema massa-mola quântico na aproximação do oscilador harmônico.
- 5** Entender conceitualmente o que é efeito túnel e algumas de suas aplicações.



Introdução

Como vimos nas aulas anteriores, um novo paradigma na Física emergiu no início do século XX motivado pelas observações experimentais da quantização da energia e da natureza dual onda-partícula da luz e da matéria. Inspirado em seus antecessores, Louis de Broglie (veja Aula 6 desta disciplina – O Princípio da Correspondência e o Princípio da Incerteza) sugeriu que não apenas a luz tem características de partícula, mas que partículas clássicas, tais como elétrons, têm características de onda. Ele associou o comprimento de onda λ dessas ondas com o momento linear p através da relação $p = h/\lambda$.

Erwin Schrödinger (Figura 1) estava muito intrigado com as ideias de de Broglie e se dispôs a encontrar a equação de onda para o elétron. Ele seguiu de perto o protótipo eletromagnético de uma equação de onda e, tentando descrever o elétron relativisticamente, ele primeiro chegou a uma equação de onda conhecida como equação de Klein-Gordon. Para seu desapontamento, entretanto, essa equação, quando aplicada ao átomo de hidrogênio, não resultou nos níveis de energia consistentes com o do modelo de Bohr. Schrödinger então abordou o caso não-relativístico e obteve neste a sua famosa equação original, a qual leva seu nome. Em 1926, ele publicou seus resultados em uma série de quatro artigos.



Figura 1 – Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887-1961).

Um ano antes, Werner Heisenberg desenvolveu sua versão da mecânica quântica, chamada de mecânica matricial, enquanto a versão de Schrödinger foi chamada de mecânica ondulatória. Na mecânica matricial, Heisenberg determinava todos os valores das quantidades físicas mensuráveis como autovalores de uma matriz. Schrödinger demonstrou logo depois que o seu formalismo era totalmente equivalente ao de Heisenberg. Estudaremos nesta aula a versão da mecânica quântica proposta por Schrödinger.

A equação de onda de uma partícula

A equação de Schrödinger tem um papel análogo, na Física Quântica, ao da segunda lei de Newton na Física Clássica, que relaciona, através de uma equação diferencial, força e posição de uma partícula. Resolver essa equação diferencial significa conhecer o futuro e o passado de uma partícula ou de um sistema de partículas. Do mesmo modo, resolver a equação de Schrödinger significa conhecer a forma da onda associada a uma partícula qualquer. No entanto, não significa, o que seria contraditório com o Princípio da Incerteza, conhecer arbitrariamente qualquer grandeza associada à partícula. Conhecer a expressão da função de onda, como veremos, é uma fonte de grande informação estatística sobre uma partícula qualquer.

Não é possível deduzir rigorosamente a equação de Schrödinger a partir de outros princípios; ela é um novo princípio em si. Entretanto, podemos fazer com que a equação de Schrödinger pareça plausível, considerando que:

- 1) ela deve estar relacionada com as relações de de Broglie;
- 2) deve permitir superposição de funções de onda, o que fornece uma explicação para padrões de interferência. Isso implica que a equação de onda deve ser linear, ou seja, que se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções, então, $\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$ também será solução;
- 3) a função de onda, solução da equação, deve ser “bem-comportada” matematicamente, ou seja, não deve apresentar um comportamento descontínuo;
- 4) de acordo com o apreendido sobre ondas na disciplina **Ondas, som e luz**, é muito razoável que a equação forneça soluções senoidais em muitos casos, que contêm o caráter oscilatório inerente à própria noção de “ondas”.

Com base nessas considerações, entre outras, e considerando apenas o caso de uma dimensão, postulamos a seguinte equação diferencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad \text{Eq. (1)}$$

onde $\Psi(x, t)$ é a função de onda da partícula, m a massa da partícula, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , $V(x, t)$ é a função energia potencial da partícula e $i = \sqrt{-1}$ é o número imaginário.

Assim, se conhecemos $V(x, t)$ obtemos a partir da equação de Schrödinger (Eq. 1) a função de onda, da mesma forma que na mecânica clássica precisávamos conhecer a força exercida sobre a partícula para conhecer sua posição em todos os momentos que desejássemos.

Interpretação estatística do quadrado da função de onda

Em 1927, Max Born deu um significado físico-estatístico ao quadrado da função de onda, tornando a Física Quântica uma teoria fundamentalmente estatística, com uma visão probabilística de mundo. Isso não agradou a muitos cientistas como, por exemplo, Einstein, que preferiu a célebre frase: “Deus não joga dados com o mundo”. Apesar de outras interpretações serem possíveis, inclusive interpretações determinísticas, a de Born virou a interpretação oficial na Física Quântica. Basicamente, Born afirmou que:

num instante t qualquer, a probabilidade de que a partícula associada à função de onda $\Psi(x)$ esteja numa posição qualquer entre x e $x + dx$ é dada por:

$$P(x)dx = \Psi(x)^* \Psi(x) dx = |\Psi(x)|^2 dx \quad \text{Eq. (6)}$$

Ou seja, segundo essa interpretação revolucionária, para ondas associadas a uma partícula, temos que o módulo ao quadrado da função de onda é uma densidade de probabilidade da posição x de uma partícula.

Sendo o módulo ao quadrado uma densidade de probabilidade, ele deve obedecer à condição de normalização usual:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{Eq. (7)}$$

Suponha que queiramos conhecer a probabilidade da partícula estar localizada entre as posições $x = x_1$ e $x = x_2$. Pela própria definição de densidade de probabilidade, teremos:

$$P(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx \quad \text{Eq. (8)}$$

Se quisermos conhecer a posição média da partícula, basta fazer:

$$\langle x \rangle = x_{\text{médio}} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x)|^2 dx \quad \text{Eq. (9)}$$

De acordo com essa interpretação, a equação de Schrödinger nos fornece a densidade de probabilidade da localização de uma partícula (e poderíamos deduzir também a densidade de probabilidade de outra grandeza, como a energia). Assim, não temos mais como na Física Clássica um conhecimento completo e determinístico, mas um conhecimento estatístico das quantidades físicas. Comprovações experimentais das previsões obtidas a partir da equação de Schrödinger podem envolver, por exemplo, múltiplas realizações de um experimento, para se buscar uma distribuição de resultados que possa ser comparada ao módulo ao quadrado da função de onda.

Após essa discussão introdutória, passemos à aplicação da equação a algumas situações clássicas, o que fomentará novas discussões.

Partícula livre

Como primeira aplicação da equação de Schrödinger, estudaremos uma “partícula livre”, ou seja, uma partícula livre da influência de forças externas. Em uma dimensão, temos que:

$$F_x = -\frac{dV(x)}{dx} = 0 \quad \text{Eq. (10)}$$

portanto, o potencial $V(x)$ é constante para que a sua derivada seja zero. Podemos escolher

$$V(x) = 0 \quad \text{Eq. (11)}$$

para uma partícula livre, o que nos leva, a partir da Equação 5 a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad \text{Eq. (12)}$$

ou

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \quad \text{Eq. (13)}$$

onde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad \text{Eq. (14)}$$

Para resolver a Equação 13, temos que descobrir quais as funções que quando derivadas duas vezes produzem elas mesmas multiplicadas por uma constante negativa “ $-k^2$ ”.



Atividade 3

Fazendo uma breve revisão sobre derivadas de funções nas Aulas 4 e 5 da disciplina Cálculo 1 (A derivada e Derivadas de função composta), verifique que duas funções que satisfazem a Equação 13 são $\sin(kx)$ e $\cos(kx)$. Verifique também que a combinação linear dessas duas funções, ou seja:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \quad \text{Eq. 15}$$

é a solução geral da Equação 13. É por isso que a equação de Schrödinger é classificada como uma equação diferencial **linear**.

Da Equação 15, vemos que a função de onda de uma partícula livre é uma função senoidal. A energia da partícula é

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad \text{Eq. (16)}$$

Como não há restrições para o valor de k , essa energia não é quantizada. Como $V(x) = 0$, essa energia é simplesmente a energia cinética. Na Física Clássica, a relação entre energia cinética e momento linear é

$$E_c = \frac{p^2}{2m}, \quad \text{Eq. (17)}$$

o que nos permite inferir que o momento linear da partícula seja:

$$p = \hbar k, \quad \text{Eq. (18)}$$

que nada mais é do que a proposta de de Broglie! Lembrando que de Broglie postulou que

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad \text{Eq. (19)}$$

temos, comparando as equações 18 e 19, que k é o “número de onda”:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad \text{Eq. (20)}$$

Uma curiosidade acerca da função de onda de uma partícula livre, Equação 15, é que ela não satisfaz a condição de normalização, Equação 7 (veja o problema 1 da autoavaliação). Essa dificuldade surge porque a situação de uma partícula livre em uma região de extensão infinita é, de fato, não-física. Experimentos reais são sempre realizados em locais com extensão finita, ou seja, limitados pelas paredes de um laboratório ou pelas dimensões de um equipamento.

O poço de potencial infinito

Suponhamos agora um caso mais interessante: o de uma partícula confinada em uma caixa unidimensional de potencial com paredes de “altura” infinita, tal que as paredes são impenetráveis. Suponhamos que a caixa tenha uma largura L , como ilustra a Figura 2. O potencial pode ser escrito como:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ +\infty & x < 0 \text{ ou } x > L \end{cases} \quad \text{Eq. (21)}$$

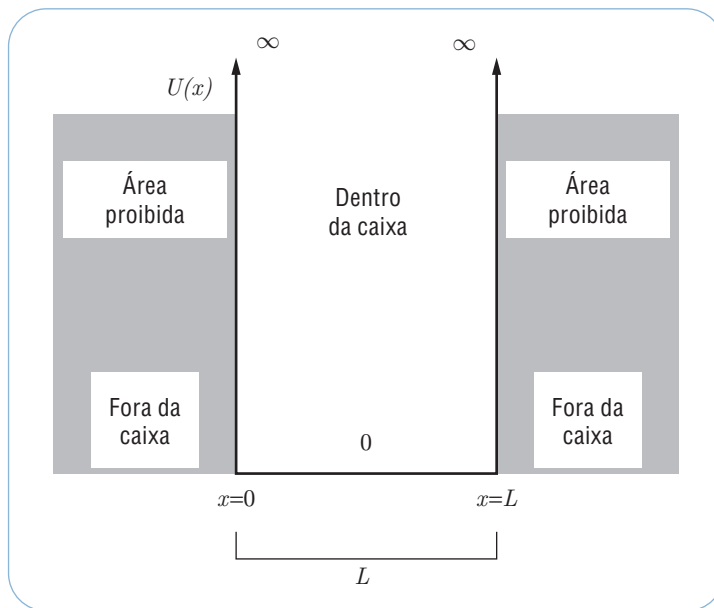


Figura 2 – Energia potencial de uma partícula em uma caixa.

Desde que é fisicamente impossível para a partícula sair da caixa, a região interessante para estudarmos é aquela dentro da caixa, onde $V(x) = 0$. Portanto, a função de onda correspondente da partícula dentro da caixa é exatamente a mesma que obtivemos na seção anterior para uma partícula livre, e é dada pela Equação 15, que repetimos aqui:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad \text{Eq. (15)}$$

Uma vez que a probabilidade de encontrar a partícula fora da caixa é zero, a função de onda é igualmente nula nessa região. Como a função de onda deve ser contínua em $x = 0$ e $x = L$, temos que:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \quad \text{Eq. (22)}$$



Atividade 4

Mostre que a Equação 22 implica que

$$B = 0, \quad \text{Eq. (23)}$$

e

$$k = n \frac{\pi}{L}, \quad \text{Eq. (24)}$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$.

Enfim, temos que a função de onda de uma partícula em poço de potencial infinito é

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad \text{Eq. (25)}$$

onde A é a amplitude da função de onda.

Para determinar a amplitude, fazemos uso da condição de normalização. Matematicamente, isso significa

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{Eq. (26)}$$

Em outras palavras, essa equação diz que a probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar no eixo- x é 100%.



Atividade 5

Substituindo a Equação 25 na 26, mostre que a amplitude da função de onda de uma partícula na caixa de potencial infinito é:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}, \quad \text{Eq. (27)}$$

portanto, a função de onda é dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & 0 \leq x \leq L \\ 0 & x < 0 \text{ ou } x > L \end{cases} \quad \text{Eq. (28)}$$

A figura a seguir ilustra os níveis de energia, dados pela Equação 29, cuja separação entre níveis subsequentes aumenta linearmente com n , e as respectivas funções de onda, dadas na equação 28.

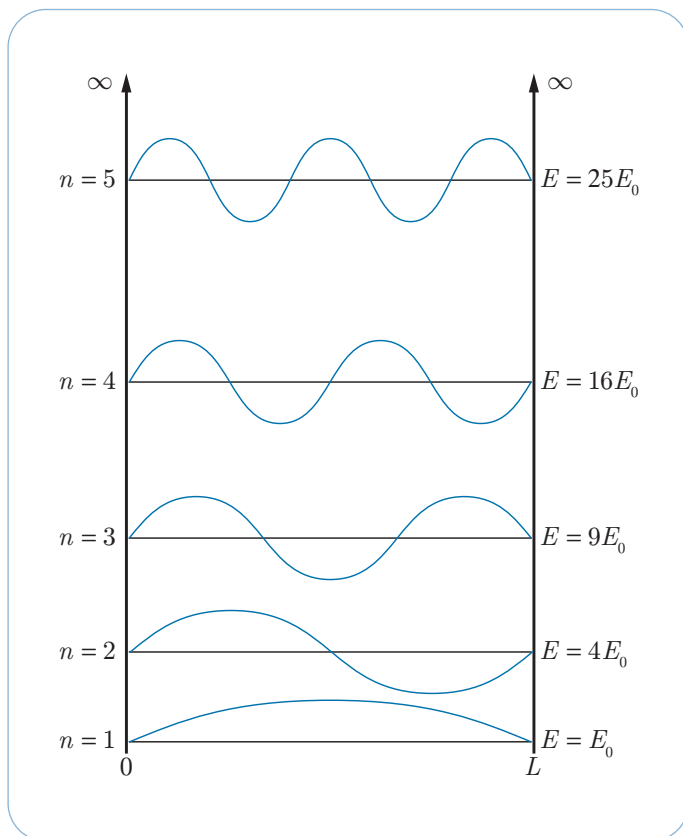


Figura 3 – Níveis de energia e funções de onda de uma partícula em um poço de potencial infinito.

Enfim, a equação 28 nos diz que a solução da equação de Schrödinger para um poço infinito é uma série de “ondas estacionárias de de Broglie”, cujos comprimentos de onda devem obedecer à relação:

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{Eq. (30)}$$

Esse exemplo do poço infinito é muito instrutivo, apesar de sua simplicidade. Dele emerge a quantização da energia e uma rica visão probabilística. Também podemos ver que a menor energia do sistema é não nula, um fenômeno essencialmente quântico e que está relacionado ao Princípio da Incerteza. Enquanto na Física Clássica a menor energia possível para a partícula seria a que corresponde à situação em que a partícula estiver em repouso dentro da caixa, ou seja, energia igual a zero, no caso da Física Quântica a relação de incerteza não permite termos a partícula com momento zero em uma posição determinada, pois assim teria posição e momento simultaneamente bem definidos. Voltaremos a discutir esse ponto na próxima seção ao estudarmos o oscilador harmônico quântico.

O oscilador harmônico quântico

O estudo do oscilador harmônico é um capítulo fundamental da Física Clássica, é também um sistema físico de especial importância no estudo das vibrações das moléculas e de interesse do ponto de vista da Física Quântica. O oscilador harmônico mais simples é constituído de uma massa m ligada a uma mola ideal de constante elástica k . A mola exerce sobre a massa uma força restauradora $F(x) = -kx$ (Lei de Hooke) sempre que a partícula sofre um deslocamento x , medido a partir da posição em que a mola está relaxada. O sistema é descrito por uma energia potencial

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \quad \text{Eq. (31)}$$

cuja forma é mostrada na Figura 4. As soluções da equação de movimento de Newton são funções $x(t)$ que oscilam no tempo com a frequência natural $\omega = \sqrt{k/m}$ do oscilador.

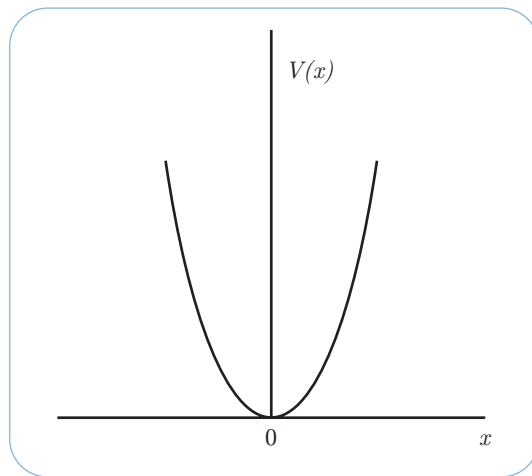


Figura 4 – O potencial do oscilador harmônico.

Na versão quântica desse sistema, ao invés de resolvermos a 2ª Lei de Newton, resolvemos a equação de Schrödinger, substituindo no potencial quântico o potencial dado pela Equação 31. Assim, a equação de Schrödinger para uma partícula quântica “massa-mola” é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x). \quad \text{Eq. (32)}$$

A solução dessa equação diferencial não é trivial como a de uma partícula livre, ou da partícula presa em uma caixa. Demonstra-se em cursos mais avançados de Física Quântica que as soluções (já normalizadas) são:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_n(\alpha x) \quad (\text{com } n = 0, 1, 2, \dots), \quad \text{Eq. (33)}$$

Note que temos aqui diferenças com relação ao oscilador harmônico clássico. No caso clássico, a energia pode ter qualquer valor, sendo determinada pelas condições iniciais do problema (velocidade e posição iniciais da massa). Já no caso quântico, o espectro de energias consiste em um número infinito de níveis discretos igualmente espaçados, como mostrados na Figura 5. Vemos que a Equação 36 é exatamente da mesma forma que Planck havia proposto quando formulou a teoria que explicava a radiação emitida por um corpo negro, como você estudou na Aula 2 – A radiação térmica e a quantização da energia. Outra diferença com relação ao oscilador clássico é que o nível de menor energia correspondente a $n = 0$ é $E_0 = \hbar\omega/2$. Esse valor finito da energia para o estado fundamental, como vimos na discussão do poço infinito, é chamado de energia de *ponto zero*, um fenômeno essencialmente quântico, que está relacionado ao Princípio da Incerteza, estudado na aula anterior.

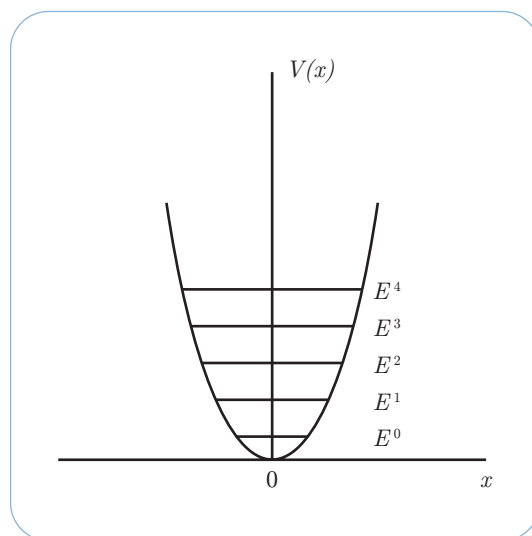


Figura 5 – Espectro de energias para o potencial de oscilador harmônico quântico.

O efeito túnel

A ideia de De Broglie de “matéria como uma onda” sugere um fenômeno inusitado para a matéria clássica: o efeito túnel. A equação de Schrödinger mostra isso rigorosamente. Diferente das partículas clássicas, a Física Quântica permite que partículas (tais como elétrons e prótons), assim como a luz, apareçam onde uma “parede” de potencial impediria que elas aparecessem. Na Figura 6, ilustramos a parede como uma “barreira de potencial”, em que do ponto de vista clássico qualquer partícula deve ter uma energia maior que certo valor para atravessá-la e aparecer do outro lado. Entretanto, quanticamente, mesmo quando a partícula tem uma energia menor que a barreira de potencial, ela pode atravessar a parede, exatamente como acontece com uma onda que atravessa um obstáculo.

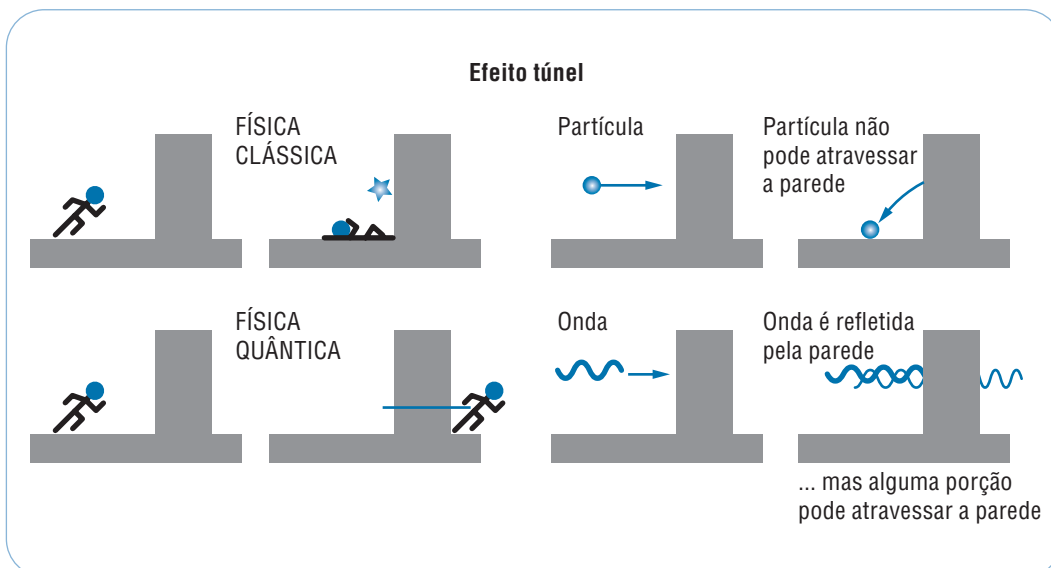


Figura 6 – Efeito túnel.

Desde que uma partícula, assim como a luz, possui dualidade onda-partícula, de acordo com a Física Quântica, a matéria pode atravessar a parede.

Esse efeito explica a desintegração espontânea de substâncias radioativas (tais como o rádio), com a emissão de partículas alfa, embora a interação nuclear forte dentro do núcleo produza uma barreira de potencial altíssima. Veja como isso ocorre na Figura 7. Um núcleo é formado por prótons e nêutrons, o agrupamento de dois prótons e dois nêutrons é denominado partícula alfa. A partícula alfa está confinada no núcleo pelas forças de interação forte, sua energia E é menor que a altura da barreira de potencial V .

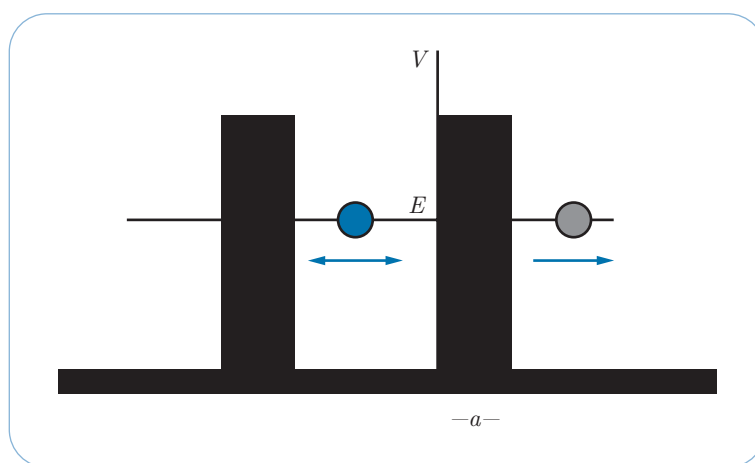


Figura 7 – Desintegração espontânea radioativa.

Classicamente, a partícula alfa deveria mover-se no interior do núcleo refletindo-se nas paredes da barreira com certa frequência característica, porém sem poder abandoná-lo. No entanto, as previsões da Física Quântica são distintas: a partícula alfa, em cada choque com

as paredes, tem certa probabilidade de abandonar o núcleo e essa probabilidade depende fortemente da largura a da barreira de potencial. Quando a partícula alfa abandona o núcleo de um elemento radioativo por efeito túnel, o núcleo transforma-se em outro núcleo de massa quatro unidades menores.

O efeito túnel é o principal responsável pelos grandes avanços tecnológicos da microeletrônica e rendeu ao seu descobridor, o japonês Leo Esaki, o Prêmio Nobel de Física de 1973.

Resumo

Nesta aula, você conheceu a equação de Schrödinger dependente do tempo e a partir dela obteve a equação de Schrödinger independente do tempo. Aplicou essa última equação ao estudo de uma partícula livre, de uma partícula presa em uma caixa com paredes de potenciais infinitos e ao estudo de um sistema “massa-mola” quântico. Em todos esses casos, você conheceu as respectivas funções de onda e energias que satisfazem a equação de Schrödinger. Ao final da aula, você entrou em contato com um dos principais fenômenos de origem quântica que possui vasta aplicação na tecnologia microeletrônica moderna: o efeito túnel.

Autoavaliação

1

Verifique, por substituição na equação de Schrödinger independente do tempo, que $\psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$ é solução da mesma, para o valor de k , dado pela Equação 14.

2

Verifique que a função de onda de uma partícula livre (Equação 15), não satisfaz a condição de normalização (Equação 7).

3

Encontre a probabilidade de encontrar uma partícula em algum lugar x dentro de uma caixa de potencial infinito (Figura 5) e mostre que existem regiões (dentro da caixa) onde esta probabilidade é zero.

4

Explique com base no Princípio da Incerteza por que uma partícula sujeita a um potencial de oscilador harmônico não pode ter energia total igual a zero.

Referências

CRUZ-GARRITZ, Diana; CHAMIZO, Jose A.; GARRITZ, Andoni. **Estructura atomica**: um enfoque químico. Wilmington, Delaware: Editora Addison-Wesley Iberoamericana, 1991.

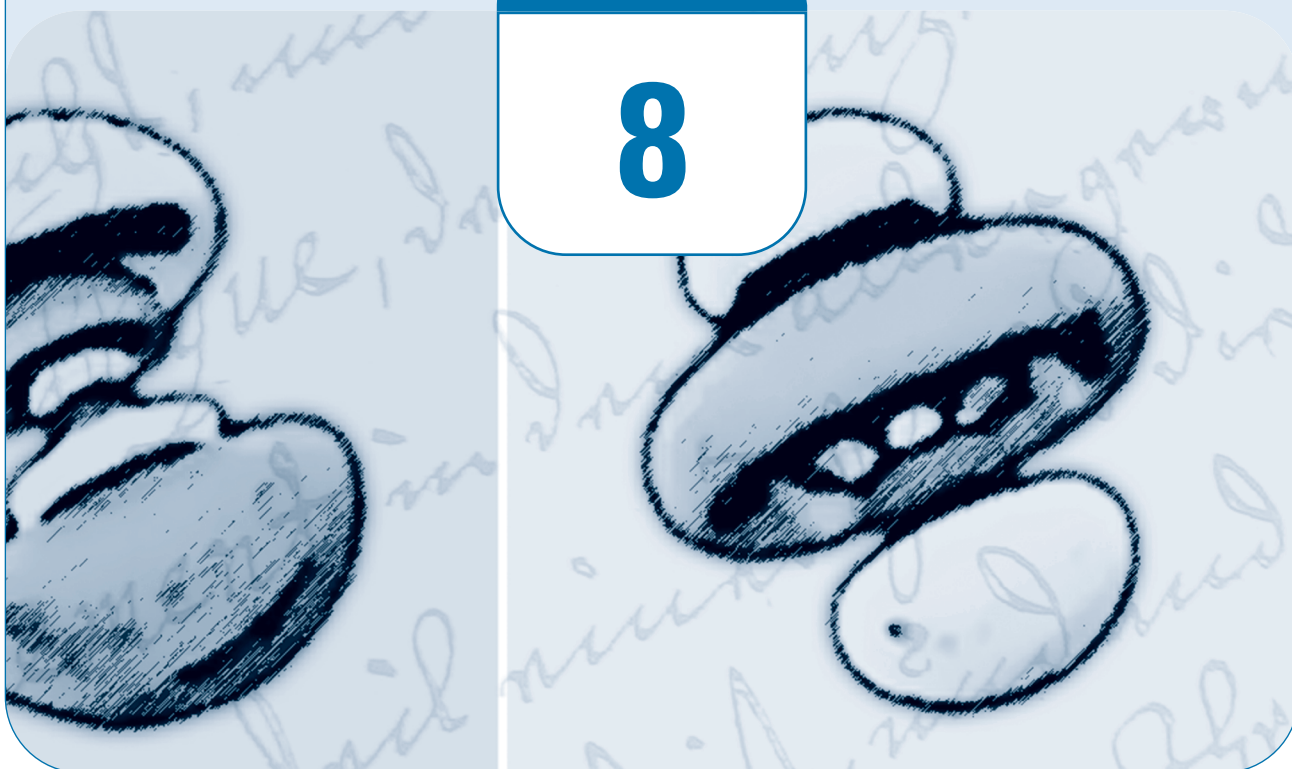
EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois, 1979.

YOUNG, Hugh D.; FREEDMAN, Roger A. **Física IV**: ótica e física moderna: Sears e Zemansky. 12. ed. São Paulo: Editora Pearson Education, 2009.

O átomo de hidrogênio

Aula

8



Apresentação

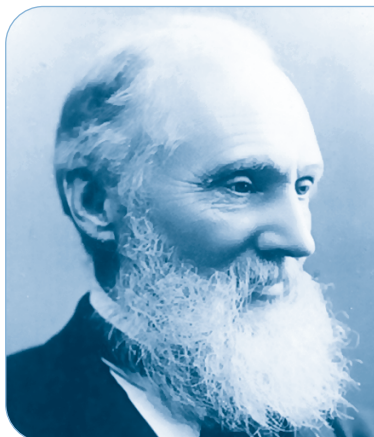
O átomo de hidrogênio é o sistema atômico mais simples que existe. O modelo de Bohr-Sommerfeld, (aula 4 - Os Espectros Atômicos e o Modelo de Bohr) fazendo uso de postulados e considerações semiclássicas, explicava diversos aspectos deste sistema, como a energia de seus níveis, raio do átomo (com a mesma ordem de grandeza das estimativas da época) e seu espectro atômico. O modelo, entretanto, não previa a probabilidade das transições dos elétrons entre os níveis de energia, tampouco os espectros dos átomos com mais de um elétron; ao postular órbitas eletrônicas bem definidas, entrava claramente em desacordo com o Princípio da Incerteza.

Nesta aula, vamos aplicar a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio. Verificaremos que suas soluções estão de acordo com as observações experimentais, comprovando a validade da teoria quântica de Schrödinger. O átomo de hidrogênio nos servirá de protótipo para estudarmos sistemas mais complexos.

Objetivos

- 1 Aplicar a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio.
- 2 Usar o método da separação de variáveis para buscar as soluções desta equação.
- 3 Obter a quantização da energia e do momento angular para o átomo de hidrogênio.
- 4 Entender as funções de onda do átomo de hidrogênio e suas propriedades.

Introdução



“Quando você pode medir algo sobre o qual está falando e expressá-lo em números, você sabe alguma coisa sobre ele”. William Thomson, o Lorde Kelvin (1824-1907).

Em nossos estudos, vimos que as observações experimentais da quantização da energia e da natureza dual da luz e da matéria fizeram surgir um novo paradigma na Física do início do século XX e modificaram de forma singular e irreversível a nossa visão do mundo.

Voltando nossa atenção para a dualidade onda-partícula e lembrando que as radiações eletromagnéticas têm uma equação de onda associada à sua propagação, percebemos que as partículas materiais também deveriam satisfazer a uma equação de onda. Mas as partículas materiais possuem uma energia de repouso (massa) não nula e, por isto, a equação de onda das partículas materiais deveria ter forma diferente da equação de onda das radiações eletromagnéticas. Esta equação de onda para partículas materiais foi desenvolvida por Erwin Schrödinger (1887-1961) em 1926 (ver Aula 7 – A Equação de Schrödinger), e está para a Física Quântica como a segunda lei de Newton para a Física Clássica.

Ao analisarmos o comportamento de um sistema quântico, devemos aplicar a equação de Schrödinger ao sistema e determinar suas soluções, que, com as condições de contorno apropriadas, fornecem-nos as funções de onda e os níveis de energia do sistema. A manipulação matemática apropriada da função de onda nos permite calcular todas as características mensuráveis do sistema.

Embora historicamente o átomo de hidrogênio tenha sido o primeiro sistema abordado por Schrödinger quando estabeleceu sua equação, não começamos nossos estudos aplicando-a ao átomo de hidrogênio. Primeiramente a aplicamos a alguns sistemas unidimensionais simples e constituídos de uma única partícula; foram eles: uma partícula livre, uma partícula em uma caixa e o oscilador harmônico. Fizemos isto porque, apesar de o átomo de hidrogênio ser o átomo mais simples, ele é um sistema tridimensional formado por duas partículas (próton e elétron) cujo potencial, que representa a interação elétron-próton, não é constante.

Mesmo não sendo um sistema muito simples, o átomo de hidrogênio é o átomo mais simples e pode ser resolvido exatamente. Da aplicação da equação de Schrödinger para o

átomo de hidrogênio, e sem usar nenhum postulado, podemos obter a quantização de seu momento angular e de sua energia e a forma exata do espectro atômico, provando que a mecânica desenvolvida por Schrödinger descreve muito bem este sistema. Além disso, as soluções obtidas para o átomo de hidrogênio servem como protótipo ou ponto de partida para obtermos as soluções aproximadas para outros átomos, cujas soluções analíticas são impossíveis de serem obtidas pelo grande número de partículas que constituem esses sistemas.

Assim, nesta aula vamos estudar o procedimento para se resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, examinar as soluções obtidas e descrever suas características. Na próxima aula usaremos esses resultados para descrever o método analítico aproximado para se resolver a equação de Schrödinger para átomos de muitos elétrons.

A equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio

Na aula anterior, aplicamos a equação de Schrödinger para sistemas unidimensionais e constituídos por uma só partícula sujeita a um potencial constante na região de interesse. Para uma partícula de massa m sujeita a um potencial unidimensional qualquer, a equação de Schrödinger independente do tempo pode ser escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad \text{Eq. (1)}$$

O mundo é tridimensional. Assim, a forma geral da equação de Schrödinger independente do tempo em coordenadas cartesianas é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad \text{Eq. (2)}$$

onde o termo entre parênteses é o laplaciano ∇^2 escrito em coordenadas cartesianas (lembre-se das disciplinas de Cálculo III e de Eletromagnetismo).

Analisando o átomo de hidrogênio, vemos que, embora seja o sistema atômico mais simples, é formado por duas partículas, elétron e próton, e o potencial a que estas partículas estão sujeitas não é constante: ele depende da distância entre as partículas. A rigor, temos que analisar o movimento do elétron e o movimento do próton em torno do centro de massa do sistema. Mas, como a massa do próton é muito maior que a do elétron, podemos tratar o átomo de hidrogênio como sendo o elétron movendo-se em torno do núcleo e levar em conta o movimento do núcleo, substituindo a massa do elétron pela massa reduzida do sistema:

$$\mu = \frac{m_e M_N}{m_e + M_N}, \quad \text{Eq. (3)}$$

onde m_e é a massa do elétron e M_N é a massa do núcleo.

Um elétron, movendo-se no campo elétrico de um núcleo positivamente carregado, está sujeito a potencial dado por:

$$V(r) = -\frac{kZe^2}{r}, \quad \text{Eq. (4)}$$

onde k é a constante de Coulomb, e é a carga do elétron e Z é o número atômico do núcleo ($Z = 1$ para o átomo de hidrogênio) que foi incluído na discussão para que possamos aplicar os resultados a sistemas semelhantes, como o átomo de hélio ionizado (He^+).

Como a energia potencial $V(r)$ depende apenas da distância radial $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, é mais fácil resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio em coordenadas esféricas. Usando a forma do Laplaciano em coordenadas esféricas, podemos reescrever a Equação 2 como:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi + V(r)\psi = E\psi. \quad \text{Eq. (5)}$$

Embora a Equação 5 pareça um pouco complicada, como o potencial só depende da coordenada radial, ela pode ser resolvida usando o método da separação de variáveis. Esse método consiste em procurar, para uma equação diferencial como a Equação 5, soluções do tipo:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)f(\theta)g(\phi), \quad \text{Eq. (6)}$$

onde a função R depende apenas da coordenada radial, f depende apenas de θ e g depende apenas de ϕ .

Substituindo a forma de ψ dada pela Equação 6 na Equação 5, obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} fg \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} Rg \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{df}{d\theta} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{Rf}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 g}{d\phi^2} + V(r)Rfg = ERfg. \quad \text{Eq. (7)}$$

Multiplicando a Equação 7 por $-2\mu r^2/\hbar^2 Rfg$ e rearrumando os termos da equação resultante, obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \\ & = - \left[\frac{1}{f(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{g(\phi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 g}{d\phi^2} \right]. \end{aligned} \quad \text{Eq. (8)}$$

O primeiro membro da Equação 8 depende apenas da variável r , e o segundo membro da Equação 7 depende apenas de θ e ϕ . Assim, os dois lados da equação devem ser iguais à mesma constante, que, por conveniência matemática (para que as soluções encontradas tenham uma forma mais simples), vamos chamar de $l(l+1)$. Desta forma, as equações a serem resolvidas são:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1). \quad \text{Eq. (9)}$$

$$\left[\frac{1}{f(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{g(\phi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 g}{d\phi^2} \right] = -l(l+1). \quad \text{Eq. (10)}$$

Podemos notar que a Equação 10, a equação angular, não depende da forma do potencial; portanto, sua solução será a mesma para qualquer potencial que dependa apenas da coordenada radial. Assim, a dependência com o potencial está apenas na equação radial. Vamos resolver estas equações em separado para estudarmos as soluções da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio.

A equação angular e a quantização do momento angular

Considerando a equação angular (Equação 10), podemos separá-la em outras duas equações mais simples de se resolver. Para isto, vamos reescrevê-la na seguinte forma:

$$\frac{1}{g(\phi)} \frac{d^2 g}{d\phi^2} = -l(l+1) \sin^2 \theta - \frac{\sin \theta}{f(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right). \quad \text{Eq. (11)}$$

O lado esquerdo da equação diferencial escrita acima depende apenas de ϕ , enquanto o lado direito depende apenas de θ . Portanto, ambos devem ser iguais à mesma constante, que vamos chamar de $-m^2$. A justificativa para usarmos $-m^2$ e não simplesmente uma constante qualquer (m ou C , por exemplo) é a conveniência de podermos escrever a solução da Equação 11 em termo de m e não de uma raiz imaginária da constante escolhida. Ou seja, é apenas uma conveniência matemática que não altera em nada o significado físico das soluções obtidas.

Separando estas equações e resolvendo-as, encontramos como soluções, para o produto das funções $f_{lm}(\theta)g_m(\phi)$, uma família de funções que aparece com frequência em problemas físicos e são chamadas de **harmônicos esféricos**.

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = f_{lm}(\theta)g_m(\phi), \quad \text{Eq. (12)}$$

com:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

Vale lembrar que embora seja simples resolver a equação para $g_m(\phi)$, a equação para $f_{lm}(\theta)$ não é trivial; por isso, resolvemos deixar estes detalhes matemáticos e a forma

geral dos harmônicos esféricos para um curso mais avançado. Observe ainda que existe uma relação entre l e m : para cada valor de l são permitidos apenas valores inteiros de m no intervalo $-l \leq m \leq +l$. Na Tabela 1 temos as funções harmônicos esféricos para alguns valores de l e m .

Tabela 1 – Harmônicos esféricos: $Y_{lm}(\theta, \phi)$.

$l = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$l = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8}}\pi \cdot \text{sen } \theta \cdot e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4}}\pi \cdot \cos \theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8}}\pi \cdot \text{sen } \theta \cdot e^{-i\phi}$
$l = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32}}\pi \cdot \text{sen}^2 \theta \cdot e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8}}\pi \cdot \text{sen } \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8}}\pi \cdot \text{sen } \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32}}\pi \cdot \text{sen}^2 \theta \cdot e^{-2i\phi}$

O número l é chamado de **número quântico orbital** ou **número quântico de momento angular**, e está associado à quantização do momento angular do elétron. Se calcularmos os autovalores do operador momento angular do elétron num átomo, encontramos que estes autovalores são dados em termos de $\sqrt{l(l+1)}\hbar$, para $l = 0, 1, 2, \dots$. Embora não estejamos obtendo explicitamente, a quantização do momento angular é uma consequência direta da resolução da parte angular da equação de Schrödinger.

Já o número m é chamado de **número quântico magnético orbital**, e está associado à projeção do momento angular em relação ao eixo em torno do qual o vetor momento angular do elétron precessa.

Na Figura 1 temos uma ilustração sobre as orientações possíveis do momento angular \vec{L} do elétron e os valores possíveis de L_z para o caso em que $l = 2$.

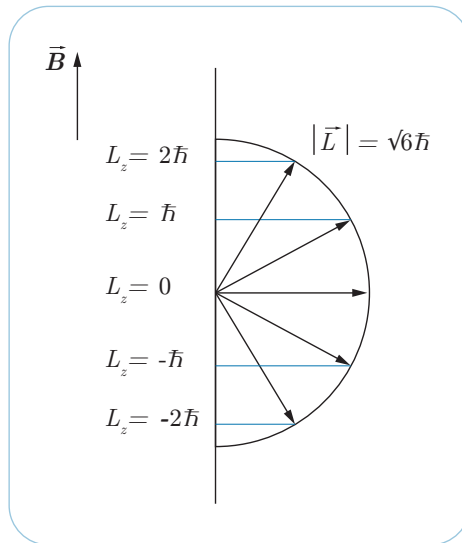


Figura 1 – Projeções permitidas para o momento angular orbital \vec{L} para o caso $l = 2$.

Observe que o momento angular nunca aponta na direção de z , já que a maior componente possível de $L_z = m\hbar$ é sempre menor que o módulo do vetor $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$.

Os resultados aqui apresentados levam em conta apenas a parte angular da equação de Schrödinger, e são válidos qualquer que seja a forma do potencial $V(r)$.



Atividade 1

Considere um sistema que tem um momento angular caracterizado pelo número quântico $l = 2$. Determine:

- os valores possíveis de L_z ;
- o módulo de \vec{L} .

A quantização da energia e as soluções da equação radial

Os resultados que apresentamos até agora se aplicam a qualquer sistema que seja esfericamente simétrico, ou seja, no qual a energia potencial só depende de r . A equação radial (Equação 9), no entanto, depende explicitamente da forma do potencial. Assim, para resolvê-la, vamos substituir a expressão do potencial coulombiano a que o elétron está sujeito (Equação 4) na equação radial. Assim,

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{Zke^2}{r} \right] = l(l+1), \quad \text{Eq. (13)}$$

que pode ser rearranjada na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[-\frac{Zke^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r). \quad \text{Eq. (14)}$$

A Equação 14 pode ser resolvida usando-se métodos convencionais de resolução de equações diferenciais. Não vamos entrar em detalhes desta resolução, mas é importante lembrarmos que sua solução está associada a um outro número quântico, que é denominado **número quântico principal** e representado pela letra n ; ele está ligado à energia do átomo e relacionado ao número quântico l . Na verdade, é possível mostrar que, para que as soluções da Equação 14 sejam bem comportadas, apenas alguns valores de energia são permitidos. Estes valores são dados por:

$$E_n = - \left(\frac{kZe^2}{\hbar} \right)^2 \frac{\mu}{2n^2} = - \frac{Z^2 E_1}{n^2}, \quad \text{Eq. (15)}$$

onde $E_n = \mu k^2 e^4 / 2 \hbar^2 \approx 13,6 \text{ eV}$ e o número quântico principal pode assumir os valores 1, 2, 3..., com a restrição adicional de que deve ser maior que l , ou seja, $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Esses valores de energia são idênticos aos encontrados pelo modelo de Bohr e, por isso, também são idênticos aos valores observados no seu espectro atômico. Isso se constituiu no primeiro triunfo da mecânica de Schrödinger.

As funções radiais, encontradas resolvendo-se a Equação 14, são dadas por:

$$R_{nl}(r) = \frac{a_0}{r} e^{-r/a_0} \mathcal{L}_{nl} \left(\frac{r}{a_0} \right), \quad \text{Eq. (16)}$$

onde $\mathcal{L}_{nl}(r/a_0)$ são funções especiais denominadas polinômios de Laguerre e $a_0 = \hbar^2 / \mu k e^2$ é o raio de Bohr. A Tabela 2 mostra as funções radiais do átomo de hidrogênio para $n = 1, 2$ e 3.

Tabela 2 – Funções radiais do hidrogênio $R_{nl}(r)$.

$n = 1$	$l = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$
$n = 2$	$l = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$
	$l = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
$n = 3$	$l = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$
	$l = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0} \right) e^{-r/3a_0}$
	$l = 2$	$R_{32} = \frac{4}{8\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$

Por motivos históricos, diz-se que todos os estados com um mesmo número quântico principal n formam uma camada. As camadas são identificadas pelas letras K, L, M, \dots , que designam os estados para os quais $n = 1, 2, 3, \dots$. Da mesma forma, diz-se que todos os estados valores dados de n e l formam uma subcamada. Com base nas práticas iniciais da espectroscopia, as letras s, p, d, f, g, h, \dots são usadas para designar as subcamadas para as quais $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$. Estas letras aparentemente estranhas vêm da descrição das linhas espectrais no início da espectroscopia: s - *sharp* (nítida); p - *principal* (principal); d - *diffuse* (difusa); f - *fine* (fina). Após s, p, d e f , as letras subsequentes seguem a ordem alfabética a partir de f (g, h, i, j, \dots).

A Tabela 3 mostra um resumo das regras que determinam os valores permitidos dos números quânticos n, l e m .

Tabela 3 – Valores permitidos para os números quânticos.

Número quântico	Valores permitidos
n	1, 2, 3, ...
l	0, 1, 2, ..., $n - 1$
m	$-l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$

Estados com números quânticos que violam as regras dadas pela Tabela 3 não podem existir, pois não satisfazem as condições de contorno para a função de onda do sistema. Por exemplo, um estado $2d$, que teria $n = 2$ e $l = 2$, não pode existir, pois o maior valor permitido para l é $n - 1$ que, neste caso, vale 1.



Atividade 2

Quantos estados orbitais possíveis existem para o nível $n = 4$ do átomo de hidrogênio?



Atividade 3

Para um átomo de hidrogênio, determine o número de estados orbitais correspondentes ao número quântico principal $n = 2$ e calcule as energias desses estados.

Quando uma linha espectral do átomo de hidrogênio ou de outro átomo é observada em alta resolução, verifica-se que existe uma **estrutura fina** para esta linha espectral, ou seja, a suposta linha é constituída por duas ou mais linhas muito próximas. Como foi visto na Aula 4 ([Os espectros atômicos e o modelo de Bohr](#)), a proposta de Sommerfeld para complementar o modelo de Bohr explicava os resultados experimentais para a estrutura fina do hidrogênio, mas esta concordância não ocorria para outros átomos, pois o número de linhas observadas em outros átomos era maior que o previsto por Sommerfeld.

Para explicar a estrutura fina, Wolfgang Pauli (1900-1958) sugeriu em 1925 que, além dos números quânticos n , l e m , o elétron possuía um quarto número quântico que podia assumir apenas dois valores. Samuel Goudsmidt (1902-1978) e George Unlenbeck (1900-1988) propuseram que este número quântico estava associado à componente z de um momento angular intrínseco do elétron e o denominou **número quântico de spin**, que é representado por m_s . Já falamos do spin do elétron na Aula 4.

Para descrever o momento angular intrínseco do elétron, é conveniente (mas incorreto!) pensar no elétron como girando em torno de seu próprio eixo ao orbitar o núcleo atômico. A direção na qual o vetor momento angular do spin do elétron pode apontar é quantizada e só pode ter duas direções, que são interpretadas como: um spin para cima e associada a um número quântico de spin $m_s = +1/2$; e um spin para baixo e associada com um número quântico de spin $m_s = -1/2$.

O número quântico de spin dobra o número de estados permitidos pelos números quânticos n , m e l .

O elétron não pode ser considerado como girando fisicamente. Apesar dessa dificuldade conceitual, toda evidência experimental apoia o fato de que o elétron tem alguma propriedade intrínseca que é consistente com um momento angular e que pode ser descrita pelo número quântico de spin.

É importante que você perceba que os números quânticos usados para descrever o estado do elétron no átomo de hidrogênio em nossa aula (n , m , l e m_s) são os mesmos números quânticos que aparecem na Química para descrever os estados dos elétrons em um átomo (lembre-se da disciplina Arquitetura Atômica e Molecular).



Atividade 4

Considerando agora também o número quântico de spin, determine, para o átomo de hidrogênio, os estados orbitais correspondentes ao número quântico principal $n = 2$.

As funções de onda para o átomo de hidrogênio

As funções de onda $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ que satisfazem a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio são funções complicadas de r , θ e ϕ . Agora queremos escrever algumas destas funções e estudar as suas propriedades mais importantes.

De acordo com estudado até aqui, podemos escrever a função de onda completa para o átomo de hidrogênio como:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)f_{lm}(\theta)g_m(\phi). \quad \text{Eq. (17)}$$

Podemos ver que a função de onda completa depende dos números quânticos n , l e m , enquanto a energia (Equação 15) depende apenas do valor de n . E pelas regras que determinam os valores permitidos para os números quânticos, mostradas na Tabela 3, vemos que, exceto para o estado fundamental, existem várias funções de onda correspondentes à mesma energia.

Vamos examinar algumas destas funções de onda e estudar suas propriedades.

Estado fundamental

A função de onda mais simples para o átomo de hidrogênio é a que descreve o seu estado fundamental, e é designada por ψ_{100} . Esta função de onda depende apenas da coordenada radial e, pelas Tabelas 1 e 2, vale:

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}. \quad \text{Eq. (18)}$$

A função de onda dada pela Equação 18 tem simetria esférica, aproxima-se de zero $r \rightarrow \infty$ quando e permanece finita quando $r \rightarrow 0$. Vale ressaltar que todas as funções de onda com $n = 1$ têm simetria esférica.

Devemos lembrar que a probabilidade de encontrarmos um elétron em qualquer região é igual à integral de $|\psi|^2$ sobre a região, onde $|\psi|^2$ é a densidade de probabilidade da função de onda. Para o estado fundamental do átomo de hidrogênio, a densidade de probabilidade vale:

$$|\psi_{100}(r)|^2 = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right) e^{-2r/a_0}. \quad \text{Eq. (19)}$$

A probabilidade de encontrar o elétron em um elemento de volume dV é $|\psi|^2 dV$. É conveniente definirmos uma **função densidade de probabilidade radial** $P(r)$ como a probabilidade por unidade de distância radial de encontrar o elétron em uma casca esférica de raio r e espessura dr . O volume dessa casca é igual à sua área superficial $4\pi r^2$ multiplicada pela espessura dr da casca, de forma que:

$$P(r)dr = |\psi(r)|^2 dV = |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr$$
$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2. \quad \text{Eq. (20)}$$

Substituindo a Equação 19 em 20, obtém-se a densidade de probabilidade radial para o átomo de hidrogênio em seu estado fundamental:

$$P_{100}(r) = \left(\frac{4r^2}{a_0^3} \right) e^{-2r/a_0}. \quad \text{Eq. (21)}$$

Uma representação gráfica da função $P_{100}(r)$ em função de r é apresentada na Figura 2. O pico da curva corresponde ao valor mais provável de r . Para esse estado em particular, o pico ocorre para $r = a_0$.

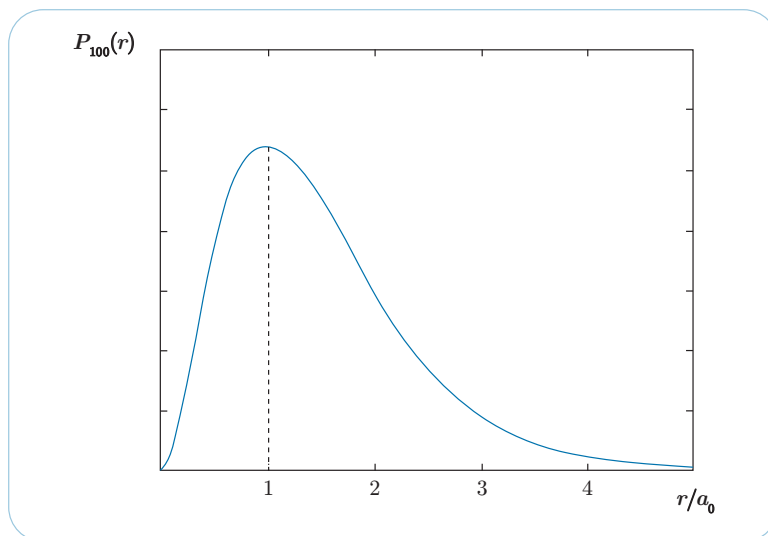


Figura 2 – Densidade de probabilidade radial para o estado fundamental do átomo de hidrogênio.

A simetria esférica da função distribuição é mostrada na Figura 3, onde podemos visualizar seu caráter tridimensional.

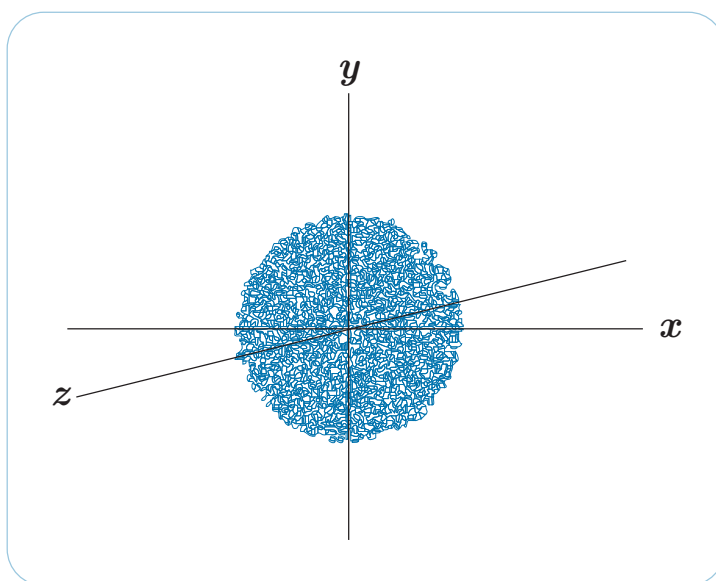


Figura 3 – Distribuição esférica da carga eletrônica do átomo de hidrogênio em seu estado fundamental.



Atividade 5

Calcule, a partir da função de probabilidade radial, o valor mais provável r de para um átomo de hidrogênio em seu estado fundamental.

Dica – o valor mais provável de r ocorre onde $P(r)$ é máxima.

Como você pôde perceber, o valor mais provável de r para o átomo de hidrogênio em seu estado fundamental ($1s$) é igual ao raio de Bohr, a_0 . Embora o modelo quântico difira do modelo de Bohr, já que o elétron tem uma probabilidade finita e diferente de zero de estar a qualquer distância do núcleo, a distância mais provável é a mesma que o raio orbital do modelo de Bohr.

Estados excitados

Usando as Tabelas 1 e 2, podemos escrever as funções de onda para os estados excitados do átomo de hidrogênio e a partir delas calcular a probabilidade radial de cada estado. A forma das probabilidades radiais para os primeiros estados excitados do átomo de hidrogênio são mostradas na Figura 4. A partir desta figura, podemos perceber que os valores mais prováveis para cada orbital s ($1s, 2s, 3s, \dots$) coincidem com o valor calculado pelo modelo de Bohr para o raio da respectiva órbita.

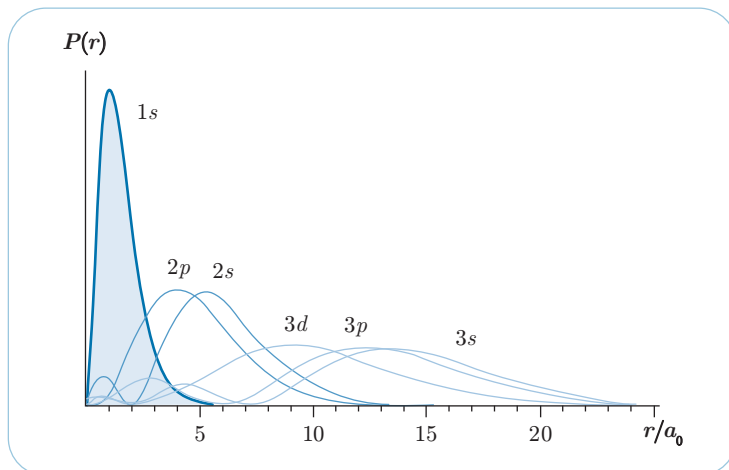


Figura 4 – Função probabilidade radial em função de r/a_0 para vários estados do átomo de hidrogênio. Gráfico adaptado do encontrado no sítio da internet: <<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/HFrame.html>>.

Na Figura 5 são mostradas as formas espaciais dos orbitais de alguns destes estados excitados.

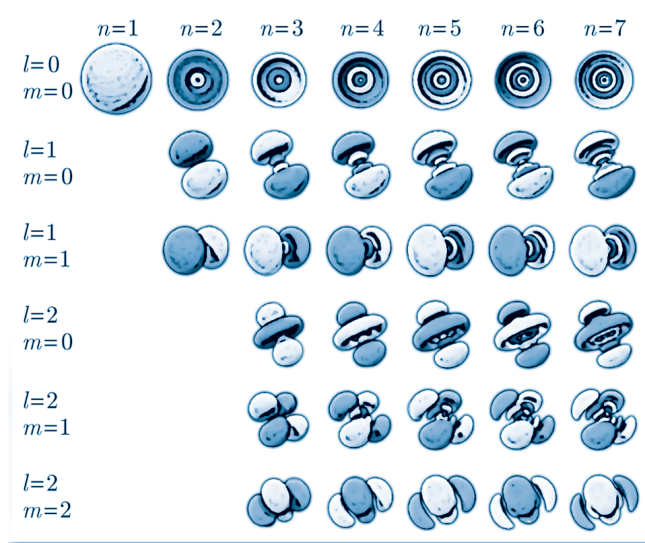


Figura 5 – Forma espacial dos orbitais de vários estados do átomo de hidrogênio.

Concluindo, podemos perceber que as soluções da equação de Schrödinger aplicada ao átomo de hidrogênio descrevem muito bem este átomo, prevendo a energia das raías de seu espectro e, inclusive, a degenerescência de cada uma destas raías. Além disso, pelo fato do comportamento do elétron ser descrito em termos de sua função de onda, a mecânica de Schrödinger está levando em conta a natureza dual dos elétrons, e, por termos obtido probabilidades para as posições do elétron no átomo ao invés de uma órbita fixa, esta descrição do átomo de hidrogênio está de acordo com o Princípio da Incerteza.

Na próxima aula, vamos usar os resultados aqui obtidos para estudar os átomos de muitos elétrons.

Resumo

Nesta aula, estudamos a forma tridimensional da equação de Schrödinger independente do tempo e a aplicamos ao átomo de hidrogênio. Usando o método da separação de variáveis, buscamos a forma geral das funções de onda e níveis de energia do átomo de hidrogênio, apresentando os quatro números quânticos que definem o elétron de um átomo qualquer. Por fim, calculamos a densidade de probabilidade radial do elétron no estado fundamental e mostramos a sua forma para alguns estados excitados.

Autoavaliação

1

Qual a principal vantagem de se usar o método da separação de variáveis para resolver uma equação diferencial como a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio?

2

O que acontece com a frequência das linhas espectrais do átomo de hidrogênio quando o número quântico principal referente a seu nível de energia vai para infinito, ou seja, n torna-se muito grande?

3

Calcule o momento angular orbital para um estado p do átomo de hidrogênio.

4

Se desconsiderarmos o spin do elétron, apresente comparativamente as descrições (resultados obtidos) pelos modelos de Bohr e de Schrödinger para o átomo de hidrogênio para:

- a)** a localização do elétron;
- b)** a energia total do elétron;
- c)** o momento angular total do elétron.

5

Considere um átomo de hidrogênio em seu primeiro estado excitado, cuja função de onda é dada por:

$$\psi_{200}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left[2 - \frac{r}{a_0}\right] e^{-r/2a_0} .$$

Determine:

- a)** A função de probabilidade radial $P(r)$ do elétron neste estado excitado;
- b)** O valor mais provável para a posição do elétron.

Referências

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. **Física moderna**: origens clássicas e fundamentos quânticos. São Paulo: Editora Campus, 2006.

EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois, 1979.

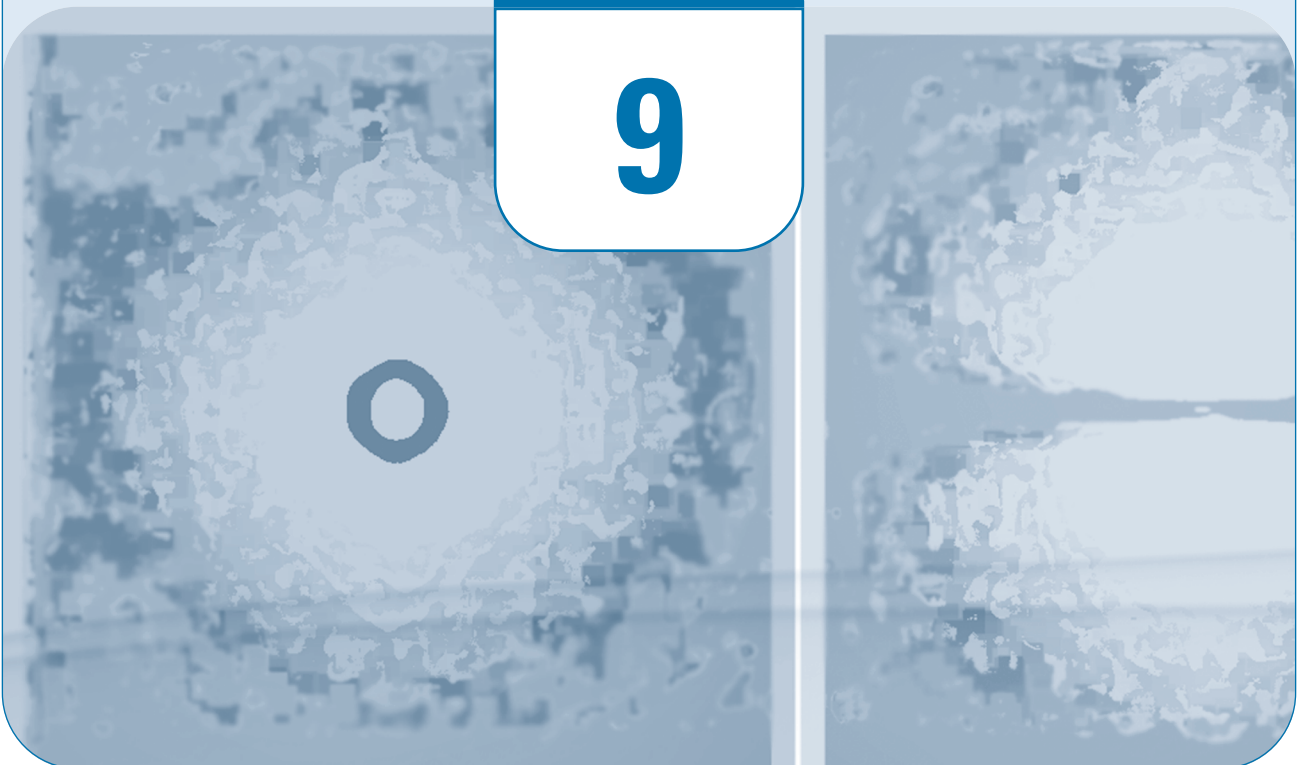
SERWAY, Raymond A.; JEWETT JÚNIOR, John W. **Princípios de Física**: óptica e física moderna. São Paulo: Editora Thomson, 2005. v 4.

TIPLER, Paul A.; LIEWELLYN, Ralph A. **Física moderna**. 3. ed. São Paulo: Editora LTC, 2001.

Átomos com muitos elétrons

Aula

9



Apresentação

Nesta aula, mostraremos que para resolver a equação de Schrödinger para sistemas com muitos elétrons é necessário adotar métodos aproximados, porque as interações entre os elétrons tornam extremamente complicado obter uma solução exata do problema. Além disto, discutiremos porque a equação de Schrödinger sozinha não é suficiente para explicar a natureza eletrônica dos átomos; constataremos que é necessário adicionar um princípio fundamental, descoberto por Wolfgang Pauli: o princípio de exclusão de Pauli.

Objetivos

- 1** Aplicar a equação de Schrödinger e deduzir a fórmula do potencial eletrostático para átomos com muitos elétrons.
- 2** Entender a aproximação de Hartree para tratar átomos com muitos elétrons.
- 3** Compreender por que o princípio de exclusão de Pauli é fundamental para a Física Quântica.



Introdução

Como você deve estar lembrado, nem Bohr e nem Sommerfeld tiveram êxito em obter uma teoria quântica válida para átomos com muitos elétrons. Quando Schrödinger, em 1926, apresentou sua mecânica ondulatória, havia uma grande quantidade de resultados experimentais acumulados que indicavam um forte caráter periódico das propriedades atômicas e que sugeriam a existência de uma periodicidade em nível de estrutura atômica. Foi a Física Quântica que veio dar uma explicação de primeiros princípios para o comportamento periódico dos átomos, e isto 57 anos depois do descobrimento por Mendeleev. Este grande feito, mais que nenhum outro, validou a Física Quântica.

Na aula anterior, analisamos a estrutura atômica do átomo de hidrogênio neutro. Agora, passaremos a estudar átomos com muitos elétrons.

Em geral, quando um átomo está em seu estado normal (eletricamente neutro), ele tem Z elétrons e Z prótons, onde Z é o número atômico do átomo. A carga elétrica total deste átomo é zero, porque as cargas dos elétrons e dos prótons possuem o mesmo módulo, mas sinais opostos.

Podemos aplicar a equação de Schrödinger para um átomo com muitos elétrons. Contudo, quanto maior o valor de Z , mais complexa a análise do átomo, pois cada um dos Z elétrons interage não somente com o núcleo, como também com os demais elétrons. A função de onda e a energia potencial são funções de $3Z$ coordenadas, e a equação contém derivadas de segunda ordem em relação a todas essas variáveis. Como você pode ver, a solução matemática deste tipo de problema é extremamente complexa; daí que até hoje esse problema ainda não foi resolvido completamente nem para o caso mais simples, que é o átomo de hélio neutro, que possui apenas dois elétrons.

Átomos com mais de um elétron

Um átomo neutro é um sistema que contém Z elétrons e uma carga nuclear Ze . A fim de estudar este sistema de muitos elétrons, retornaremos a utilizar algumas características fundamentais do átomo de hidrogênio apresentadas na aula anterior. A energia potencial Coulombiana e as funções de onda para estados estacionários do átomo de hidrogênio são

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}; \quad \Psi_{nlm_l m_s} = \psi_{nlm_l m_s}(\vec{r}) \exp(-iE_n t/\hbar). \quad \text{Eq. (1)}$$

O tratamento exato da teoria de Schrödinger torna-se mais complicado quando se aplica a átomos com mais de um elétron. Veja, por exemplo, o caso do átomo de hélio, que tem apenas dois elétrons, como mostrado na Figura 1.

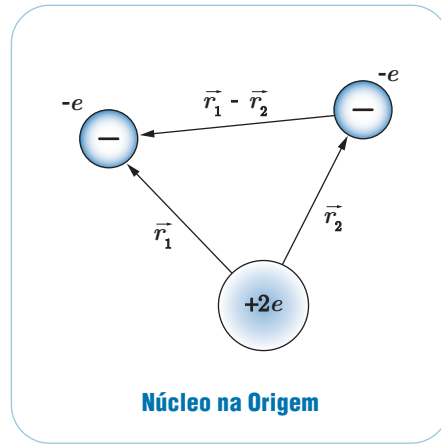


Figura 1 – Interações Coulombianas em um átomo de hélio.

A energia potencial Coulombiana, neste caso, contém dois termos de atração elétron-núcleo e um termo de repulsão elétron-elétron:

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_1} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad \text{Eq. (2)}$$

A função de onda associada a este sistema de dois elétrons com energia total E obedece à equação de Schrödinger, independentemente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi + V\Psi = E\Psi, \quad \text{Eq. (3)}$$

onde m é a massa do elétron e os operadores diferenciais ∇_1^2 e ∇_2^2 referem-se aos dois conjuntos de variáveis espaciais em coordenadas esféricas $(r_1, \theta_1, \varphi_1)$ e $(r_2, \theta_2, \varphi_2)$. Como a contribuição elétron-núcleo para o potencial V tem uma forma central, ele não torna complicada a solução para a função de onda Ψ . Entretanto, a contribuição elétron-elétron para o potencial não tem uma forma central; portanto, o método de separação de variáveis que usamos na aula anterior para o átomo de hidrogênio não pode ser aplicado aqui para obter uma solução exata.

O caso geral de um átomo com Z elétrons envolve uma função de onda $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z)$ com Z coordenadas radiais independentes. Esta função de onda para a energia E satisfaz a equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \dots + \nabla_Z^2) \Psi + V\Psi = E\Psi, \quad \text{Eq. (4)}$$

onde a energia potencial Coulombiana contém termos centrais atrativos e não-centrais repulsivos para todos os elétrons.



Atividade 1

Tomando como modelo o átomo de hélio, escreva a fórmula da energia potencial para um átomo neutro com Z elétrons.

A aproximação de Hartree

Ao longo de muitos anos, vários métodos foram propostos para resolver aproximadamente o problema de muitos elétrons. Embora as interações entre elétrons sejam mais fracas que as interações com o núcleo, num átomo típico com muitos elétrons o seu efeito resultante é muito forte, exceto se o elétron estiver muito próximo do núcleo.

Em uma primeira aproximação, deixemos de lado as repulsões entre elétrons, tal que a função de onda e a energia total do sistema possam ser encontradas a partir das atrações Coulombianas entre os elétrons e o núcleo do átomo. Isto significa que estamos considerando os elétrons como se fossem independentes uns dos outros; deste modo, ao invés de ter que resolver uma equação de Schrödinger muito complicada, teremos que resolver Z equações de Schrödinger de elétrons independentes, uma equação para cada elétron.

Outra simplificação adicional desta aproximação: pode-se notar que cada elétron é blindado do núcleo por outros $Z - 1$ elétrons, tal que cada elétron deve experimentar uma atração nuclear atribuída a uma carga nuclear efetiva menor que Ze . Para levar em conta este detalhe, supomos que cada elétron se move num potencial resultante

$$V_{res}(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} Z_{ef}(r). \quad \text{Eq. (5)}$$

Como para um elétron muito afastado do núcleo atômico – Figura 2(a) – o potencial resultante deve ser parecido com o potencial de Coulomb, devido a uma carga efetiva $+e$, que representaria a carga nuclear $+Ze$ blindada pela carga $-(Z-1)e$ dos demais elétrons, teríamos $Z_{ef}(r) \rightarrow 1$ para grandes distâncias do núcleo atômico. O segundo desenho, ilustrado na Figura 2(b), mostra que para um elétron muito próximo do núcleo o comportamento do potencial é parecido com o potencial de Coulomb, devido a uma carga nuclear $+Ze$. Assim, $Z_{ef}(r) \rightarrow Z$ nas proximidades do núcleo.

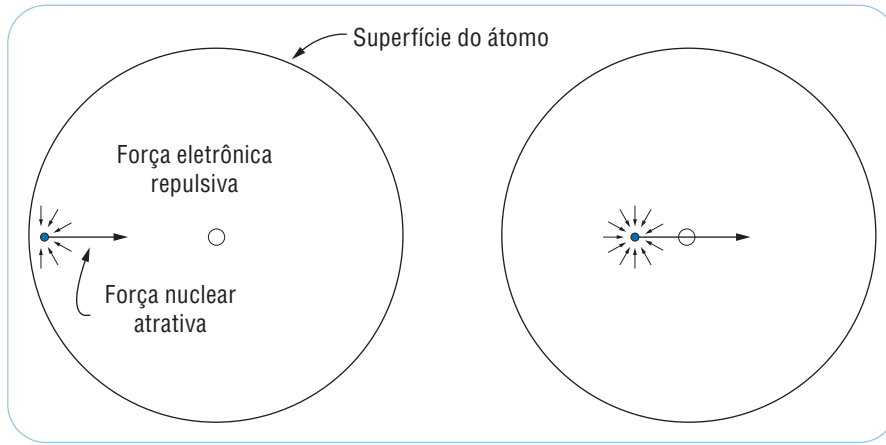


Figura 2 – Ilustração do potencial eletrostático resultante.

A dinâmica do elétron é controlada pela energia potencial resultante central $V_{res}(r_i) = f(r_i)/r_i \neq C/r_i$. O vetor posição \vec{r}_i é definido em coordenadas esféricas $(r_i, \theta_i, \varphi_i)$ para o i -ésimo elétron independente. Assim, a equação de Schrödinger para um elétron é

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \psi_i(\vec{r}_i) + V_{res}(r_i) \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i), \quad \text{Eq. (6)}$$

e pode ser resolvida para obter as funções de onda $\Psi_i(\vec{r}_i)$ de energia E_i para cada elétron.

O índice i atua sobre todos os Z elétrons; a função de onda total do sistema pode ser escrita na forma do produto

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_Z(\vec{r}_Z), \quad \text{Eq. (7)}$$

com a energia total do sistema sendo simplesmente a soma das energias de cada elétron:

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_Z. \quad \text{Eq. (8)}$$

Desde que o potencial resultante $V_{res}(r)$ não dependa das coordenadas angulares θ e φ , ele não afeta as equações diferenciais para $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$; assim, as funções angulares da função de onda $\psi_i(\vec{r}_i)$ são exatamente aquelas que calculamos na aula anterior para o problema do átomo de hidrogênio. É comum utilizar um índice α para denotar o conjunto completo de números quânticos $(n, l, m_l, m_s = \uparrow, \downarrow)$ para um elétron; assim, podemos representar a função de onda associada na forma

$$\psi_{i,\alpha}(\vec{r}_i) = R_{nl}(r_i) Y_{lm_l}(\theta_i, \varphi_i) (\uparrow \text{ ou } \downarrow). \quad \text{Eq. (9)}$$

A função radial $R_{nl}(r_i)$ satisfaz uma equação diferencial como no caso do átomo de hidrogênio, exceto que agora a energia potencial Coulombiana deve ser substituída pela função efetiva $V_{ef}(r)$, tal que

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{nl}(r)] + V_{ef}(r) [rR_{nl}(r)] = E_{nl} [rR_{nl}(r)], \quad \text{Eq. (10)}$$

onde

$$V_{ef}(r) = V_{res}(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1), \quad \text{Eq. (11)}$$

E_{nl} são os autovalores de energia que dependem da escolha do potencial resultante $V_{res}(r)$. A dependência da energia com n e l é uma previsão geral da teoria quântica de Schrödinger; a dependência só com n para o átomo de hidrogênio só ocorreu porque ali tínhamos apenas um elétron.

A determinação do potencial $V_{res}(r)$ - Equação 5 - é feita autoconsistentemente, isto é, iterativamente. Inicialmente é escolhido um $Z_{ef}(r)$ que satisfaz os limites $Z_{ef}(r) \rightarrow 1$ para grandes distâncias do núcleo e $Z_{ef}(r) \rightarrow Z$ para pequenas distâncias, e se calcula a função de onda total do sistema. Com a função de onda, obtém-se a distribuição de probabilidade $|R_{nl}|^2$ resultante para o sistema, e esta determina uma distribuição de cargas para cada elétron a partir do qual se obtêm potenciais eletrostáticos clássicos. A média desses potenciais sobre o estado do átomo gera uma nova energia potencial resultante $V_{res}(r)$; se este potencial é suficientemente próximo do potencial usado inicialmente, o cálculo chegou ao seu fim e temos determinada a função de onda e energia do sistema. Caso contrário, o procedimento é repetido, usando agora como potencial resultante inicial o potencial que acabamos de obter. Este método é chamado de método de Hartree, em homenagem a Douglas Rayner Hartree, que o idealizou em 1928. Posteriormente ele foi melhorado por V. Fock e John Clarke Slater, vindo a ser rotulado de método Hartree-Fock.



Atividade 2

Pesquise na *web* pelo menos outros 3 métodos, além dos de Hartree e Hartree-Fock, propostos para tratar sistemas com muitos elétrons. Liste os nomes dos métodos e seus principais inventores/autores.

O princípio de antissimetria

Para entender a estrutura atômica de átomos com muitos elétrons, precisamos de uma regra adicional, conhecida como princípio de exclusão de Pauli. Para saber por que esse princípio é necessário, vamos considerar o estado fundamental de um átomo com muitos elétrons. Nos estados de um único elétron no modelo de aproximação central, existe um estado com energia mais baixa (correspondente ao estado $n = 1$ do átomo de hidrogênio). Poderíamos esperar que no estado fundamental de um átomo complexo todos os elétrons estivessem no estado com energia mais baixa. Caso isso fosse verdade, deveríamos observar uma variação gradual das propriedades físicas e químicas quando examinássemos os átomos à medida que o número de elétrons fosse aumentando.

Essa variação gradual não é observada. Em vez disso, as propriedades dos elementos variam fortemente de um elemento para o outro seguinte, cada elemento distinguindo-se em suas características. Por exemplo, os elementos flúor, neônio e sódio têm 9, 10 e 11 elétrons, respectivamente, por átomo. O flúor tende a formar compostos nos quais cada átomo de flúor ganha um elétron extra. O sódio tende a formar compostos nos quais cada átomo de sódio perde um elétron. O neônio não forma absolutamente nenhum composto. Tais observações mostram que, no estado fundamental de um átomo complexo, os elétrons não podem ocupar todos simultaneamente os estados com energias mais baixas. Mas por quê?

A chave para a solução desse enigma, descoberta por Wolfgang Pauli em 1925, denomina-se princípio de exclusão. Esse princípio afirma:



Dois elétrons não podem ter os mesmos valores para os quatro números quânticos

$$(n, l, m_l, m_s = \uparrow, \downarrow).$$

Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958).

Consideremos a equação de Schrödinger para o átomo de hélio, que possui dois elétrons, escrita como

$$\hat{H}_{12}\psi(1, 2) = E\psi(1, 2). \quad \text{Eq. (12)}$$

Nesta expressão, \hat{H}_{12} caracteriza o operador Hamiltoniano, e os índices 1 e 2 caracterizam as coordenadas espaciais e temporal dos dois elétrons. Partindo do pressuposto que as partículas 1 e 2 são idênticas, ao realizarmos a operação de troca $1 \rightarrow 2$, concluímos que, pelo fato das partículas serem idênticas, então a descrição matemática do sistema não deve se alterar.

Então, matematicamente, a condição acima pode ser escrita na forma

$$\hat{H}_{12}\psi(1, 2) = \hat{H}_{21}\psi(1, 2) = \hat{H}_{21}\psi(2, 1). \quad \text{Eq. (13)}$$

Chegamos, portanto, à conclusão que **o operador Hamiltoniano $H(1,2)$ de duas partículas idênticas é simétrico frente à operação de troca $1 \rightarrow 2$** , que as funções $\Psi(1,2)$ e $\psi(2,1)$ são autofunções do operador Hamiltoniano \hat{H}_{12} e denominamos o valor de energia E de autovalor. Dizemos, ainda, que o sistema em foco é **degenerado** e que uma combinação linear do tipo

$$\Psi(1, 2) = A\psi(1, 2) + B\psi(2, 1) \quad \text{Eq. (14)}$$

é também solução do operador Hamiltoniano \hat{H}_{12} , com o mesmo autovalor E . E como as partículas 1 e 2 são indistinguíveis, todas as quantidades físicas mensuráveis associadas ao sistema de duas partículas 1 e 2 devem também permanecer inalteradas frente à **operação de troca $1 \leftrightarrow 2$** . E, como na teoria de Schrödinger todas as quantidades fisicamente mensuráveis do sistema devem ser proporcionais ao módulo ao quadrado da função de onda, resulta, então, a condição:

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2. \quad \text{Eq. (15)}$$



Atividade 3

Mostre que a condição dada pela Equação 15 implica que:

$$A = \pm B \equiv \pm 1 \quad \text{Eq. (16)}$$

Desta forma, existem somente duas soluções possíveis para o sistema de duas partículas idênticas, uma solução simétrica

$$\Psi_{\text{simétrica}}(1, 2) = \psi(1, 2) + \psi(2, 1) = \Psi_{\text{simétrica}}(2, 1) \quad \text{Eq. (17)}$$

e uma solução antissimétrica

$$\Psi_{\text{anti-simétrica}}(1, 2) = \psi(1, 2) - \psi(2, 1) = -\Psi_{\text{anti-simétrica}}(2, 1). \quad \text{Eq. (18)}$$

Um aspecto importante a ser assinalado é que o caráter de simetria de uma função de onda é uma constante de movimento. Assim, um par de partículas idênticas será descrito por uma função de onda com simetria bem definida.

Quando consideramos um conjunto extenso de partículas idênticas, estas devem ser descritas por métodos da chamada mecânica estatística, que estabelece que existem dois tipos de partículas idênticas, aquelas que obedecem à estatística de Bose-Einstein e aquelas que obedecem à estatística de Fermi-Dirac. Estudaremos essas estatísticas e suas principais propriedades na Aula 11 (Estatísticas quânticas).

Os resultados desta área do conhecimento indicam que partículas de Bose-Einstein (**bósons**) devem ser descritas por soluções simétricas da equação de Schrödinger, enquanto que partículas de Fermi-Dirac (**férmions**) devem ser descritas por soluções antissimétricas da equação de Schrödinger.

Elétrons, por serem férmions, devem, portanto, ser descritos por soluções antissimétricas da equação de Schrödinger. No caso em que dois elétrons ocupassem em um dado sistema estados físicos idênticos, isto é, $1 = 2$, então teríamos, como solução da equação de Schrödinger,

$$\Psi_{anti-simétrica}(1, 1) = \psi(1, 1) - \psi(1, 1) = 0. \quad \text{Eq. (19)}$$

Daí a conclusão a que chegamos é, sintetizada no Princípio de Exclusão de Pauli:

Em um sistema quântico, dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado físico simultaneamente.

Não devemos confundir o princípio de exclusão com a repulsão elétrica entre dois elétrons. Embora ambos tendam a manter dois elétrons separados, são efeitos de caráter completamente diferente. Dois elétrons podem sempre se aproximar quando fornecemos uma energia suficiente para superar a repulsão entre esses elétrons; contudo, não existe nenhuma força capaz de fazer com que dois elétrons ocupem um estado com os quatro números quânticos iguais.

O princípio de exclusão de Pauli ajuda a explicar uma grande variedade de fenômenos físicos. Um destes fenômenos é a “rigidez” da matéria: o princípio proíbe que elétrons idênticos sejam ‘espremidos’ uns contra os outros, e por isso nossas observações cotidianas do mundo macroscópico mostram que objetos materiais colidem, ao invés de atravessar uns aos outros, e que somos capazes de ficar em pé sobre o solo sem nele afundar. Outra consequência deste princípio é a periodicidade das propriedades físicas e químicas dos átomos e a maneira como estes partilham elétrons na formação da grande variedade de moléculas encontradas na natureza.

A partir do princípio de exclusão, podemos deduzir as características mais importantes da estrutura e das propriedades químicas dos átomos com muitos elétrons, inclusive a tabela periódica dos elementos. Maiores detalhes sobre este assunto são encontrados nas Aulas 4, 5, 6 e 7 da disciplina **Arquitetura Atômica e Molecular**.

Resumo

Nesta aula, aplicamos a equação de Schrödinger para átomos com muitos elétrons e mostramos que o potencial eletrostático de tais sistemas torna impossível obter suas funções de onda e energias exatas. Apresentamos, então, o método proposto por Hartree para tratar, de forma aproximada, sistemas com muitos elétrons. Enfim, justificamos que para entender a estrutura atômica de átomos com muitos elétrons precisamos, além da equação de Schrödinger, de uma regra adicional, conhecida como princípio de exclusão de Pauli.

Autoavaliação

1

Por que é tão complicado resolver a equação de Schrödinger para um átomo neutro com mais de um elétron?

2

Pesquise mais sobre o método de Hartree e descreva quais as principais virtudes e defeitos deste método.

3

Por que o princípio de exclusão de Pauli é essencial para a Física Quântica?

Referências

CRUZ, Diana; CHAMIZO, José A.; GARRITZ, Andoni. **Estructura atômica**: um enfoque químico. Ed. Addison-Wesley Iberoamericana. 1991.

EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois S.A., 1979.

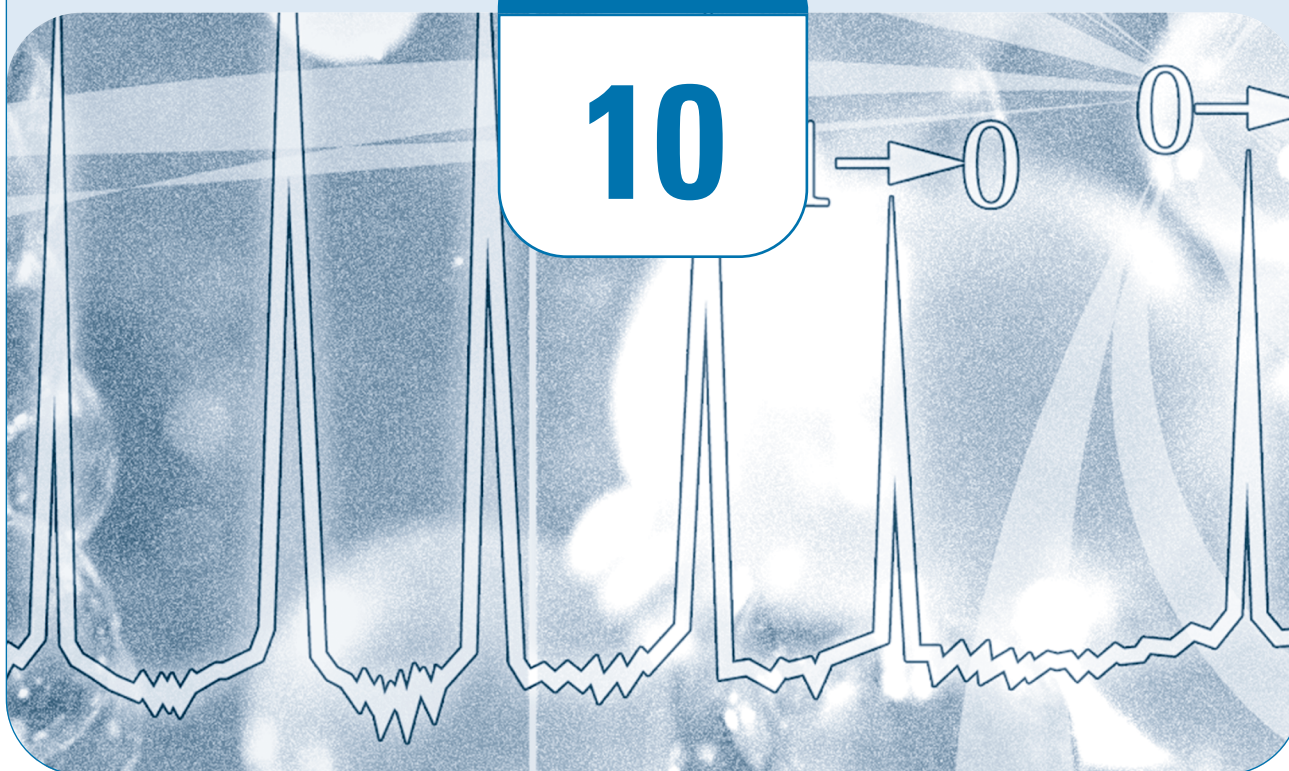
LIMA, Carlos R. A. **Notas de aulas de estrutura da matéria**. [20-?]. Capítulo 10.

YOUNG, Hugh D.; FREEDMAN, Roger A. **Física IV**: ótica e física moderna: Sears e Zemansky. 12. ed. São Paulo: Editora Pearson Education, 2009.

Moléculas e espectroscopia molecular

Aula

10

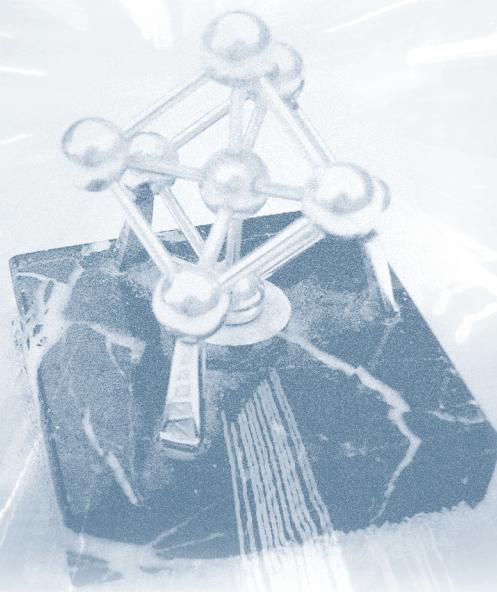


Apresentação

Na aula passada aprendemos sobre a natureza de átomos com muitos elétrons. Agora iremos além: discutiremos sobre a natureza das moléculas. Mostraremos como átomos ligados em moléculas possibilitam que elas tenham espectros de emissão e absorção muito mais complexos do que os de átomos isolados. Será discutida também a física da espectroscopia vibracional e da espectroscopia rotacional, bem como algumas de suas aplicações.

Objetivos

- 1** Revisar o conceito de “molécula” e ligações químicas.
- 2** Entender uma figura de espectro de radiação em termos das unidades de frequência, comprimento e número de onda.
- 3** Compreender a física da espectroscopia rotacional e vibracional.



Introdução

Nas aulas anteriores e na disciplina **Arquitetura Atômica e Molecular**, estudamos os átomos e suas propriedades. Os átomos são estruturas compostas por um único núcleo, rodeado por uma nuvem eletrônica. Entretanto, tais estruturas isoladas são exceções na natureza; geralmente encontramos átomos agrupados que constituem moléculas ou que formam estruturas mais complexas que chamamos de matéria condensada (líquida ou sólida).

A Química é uma ciência que, basicamente, dedica-se ao estudo de moléculas. São as forças de atração entre os átomos, denominadas de ligações químicas, que determinam os agrupamentos desses átomos. As ligações químicas, que incluem interações covalentes, iônicas, metálicas e de van der Waals estão bem descritas nas Aulas 8, 9, 10, 11 e 12 da disciplina **Arquitetura Atômica e Molecular**. Todas essas forças têm, tipicamente, natureza eletromagnética, mas também envolvem alguns efeitos quânticos.

A forma mais simples de manifestação molecular é do íon hidrogênio diatômico H_2^+ , que consiste de dois prótons e um único elétron. Na sequência de complexidade, temos a molécula de hidrogênio H_2 , que contém um elétron a mais do que o H_2^+ . Os átomos da molécula H_2 são unidos por uma ligação covalente na qual os dois núcleos compartilham os dois elétrons igualmente. Já, por exemplo, no caso de uma molécula de cloreto de sódio ($NaCl$), a estrutura é mantida por uma ligação iônica na qual um dos átomos retira para si um elétron do outro. Átomos com camadas fechadas, como os da última coluna da tabela periódica, atraem-se por uma força fraca conhecida como força de van der Waals para formar moléculas de gases nobres.

Um ponto em comum com os átomos é que as moléculas possuem energias quantizadas determinadas pelo estado quântico-mecânico de seus átomos. Estas energias são determinadas pelos movimentos de rotação e vibração dos átomos em relação aos outros. Dessa maneira, do mesmo modo que as transições entre os níveis de energia eletrônicos dos átomos conduzem aos espectros atômicos, as transições entre os níveis de energia de rotação e de vibração das moléculas conduzem aos espectros moleculares.

Assim como no caso dos átomos, a espectroscopia é o processo experimental apropriado para compreender a estrutura das moléculas.

As regiões do espectro eletromagnético

Quando um raio de luz proveniente do Sol passa por um prisma, a luz branca é separada em seus constituintes coloridos ou espectro. A luz visível é uma forma de energia, que pode ser descrita por duas teorias: a teoria ondulatória e a teoria corpuscular. Como vimos nas aulas anteriores, nenhuma das duas teorias pode, sozinha, descrever completamente todas as propriedades da luz. Algumas propriedades são mais bem explicadas pela teoria ondulatória, e outras propriedades são mais bem explicadas pela teoria corpuscular.

A teoria ondulatória mostra que a propagação da luz envolve campos magnéticos e elétricos. Estes dois campos formam a onda eletromagnética. O espectro de luz visível é uma pequena parte da radiação ou **espectro eletromagnético**.

Relembre que uma onda tem uma frequência característica f e um comprimento de onda λ , e ambas estão relacionadas com a velocidade da luz, representada pela letra c na equação

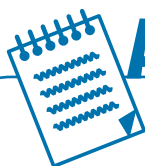
$$c = \lambda f. \quad \text{Eq. (1)}$$

Também aprendemos que a teoria quântica diz que a luz de uma dada frequência ν são feixes de pacotes de energia, que chamamos de fótons, de valor:

$$E = hf. \quad \text{Eq. (2)}$$

Desta forma, uma propagação ondulatória de energia pode ser caracterizada pelo comprimento ou frequência das ondas que a formam.

Devido ao fato da energia eletromagnética, quando classificada em termos da unidade de frequência (hertz), conduzir a números muito grandes, é comum se expressar a radiação em termos do número de onda, que é definido como o número de ondas de luz por centímetro; portanto, tem a unidade cm^{-1} .



Atividade 1

Usando a Equação 1, mostre que a relação entre as unidades de frequência, comprimento de onda e número de onda é, respectivamente,

$$3 \times 10^{15} Hz \Leftrightarrow 100 nm \Leftrightarrow 10^5 cm^{-1}.$$

Podemos usar o resultado que você acabou de obter para organizar os diferentes tipos de radiação eletromagnética em um diagrama conhecido como espectro eletromagnético, como mostrado no lado esquerdo da Figura 1. O espectro está dividido em regiões ou bandas cujas denominações estão relacionadas com a forma com que as radiações podem ser produzidas ou detectadas.

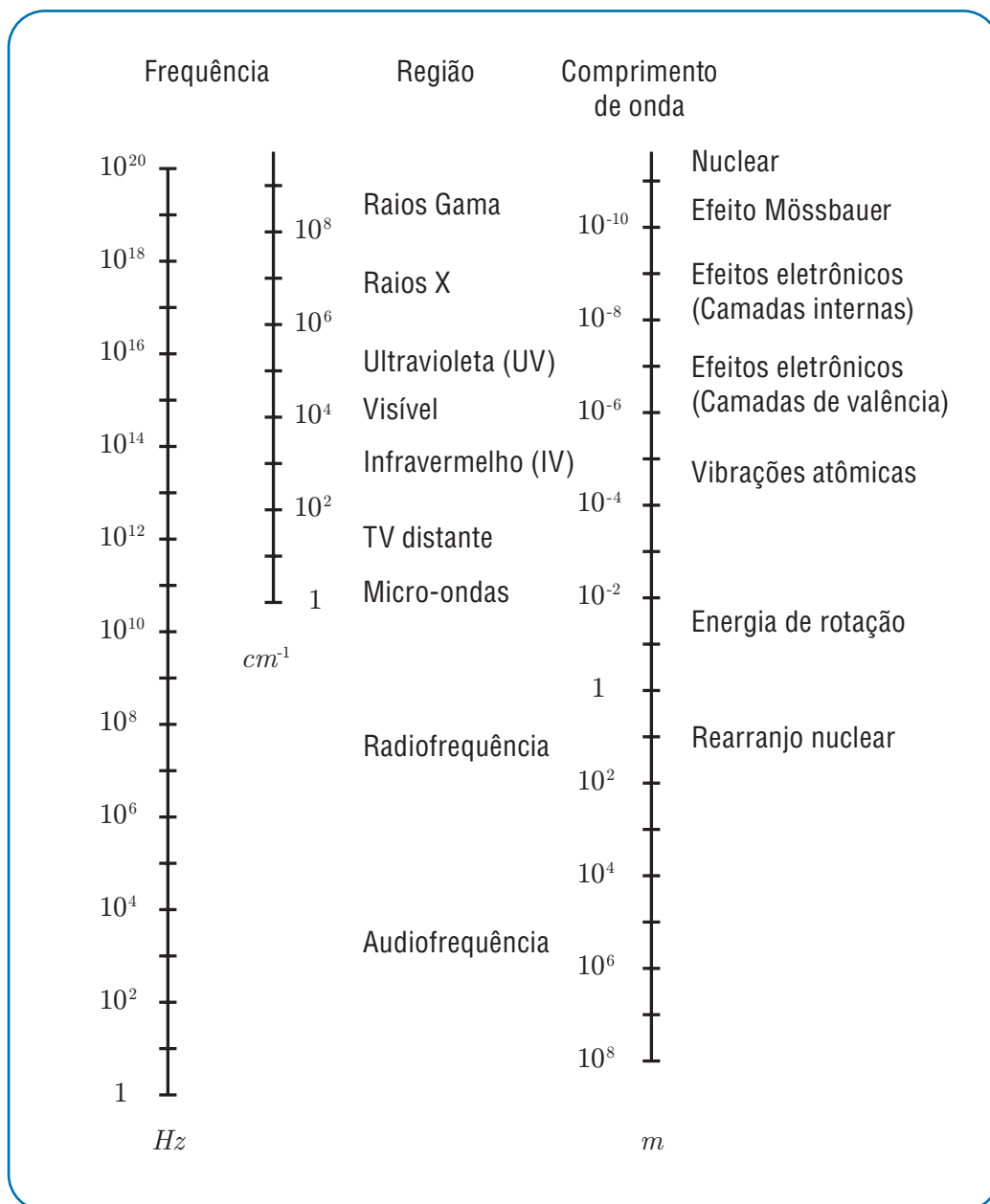


Figura 1 – Espectro eletromagnético. Da esquerda para a direita, na escala de frequência, número de onda e comprimento de onda.

Espectroscopia vibracional

Os átomos em uma molécula nunca estão imóveis, mesmo a baixas temperaturas. De fato, em um sólido em temperaturas próximas do zero absoluto, os átomos estão em contínuas oscilações em torno de uma posição de equilíbrio.

A amplitude das oscilações é apenas da ordem de 10^{-11} a 10^{-12} metros, enquanto suas frequências vibracionais correspondem à região das radiações infravermelhas.

Todas as moléculas, compostas por dois ou mais átomos ligados quimicamente, podem interagir com radiação eletromagnética e apresentar vibrações envolvendo ligações químicas, seja através do aumento da distância média de ligação, seja através da deformação de ângulos específicos formados pelos átomos.

Para entender esse fenômeno da maneira mais simples, podemos usar o modelo de duas partículas de massas m_1 e m_2 , ligadas por uma mola de constante k , segundo o esquema da Figura 2. Esse modelo é interessante, uma vez que podemos associá-lo a moléculas diatômicas, tais como gases do tipo oxigênio e nitrogênio (O_2 e N_2), que compõem aproximadamente 99% da atmosfera terrestre. Nesse modelo, a mola refere-se à ligação química entre os dois átomos (as duas partículas) que formam a molécula.

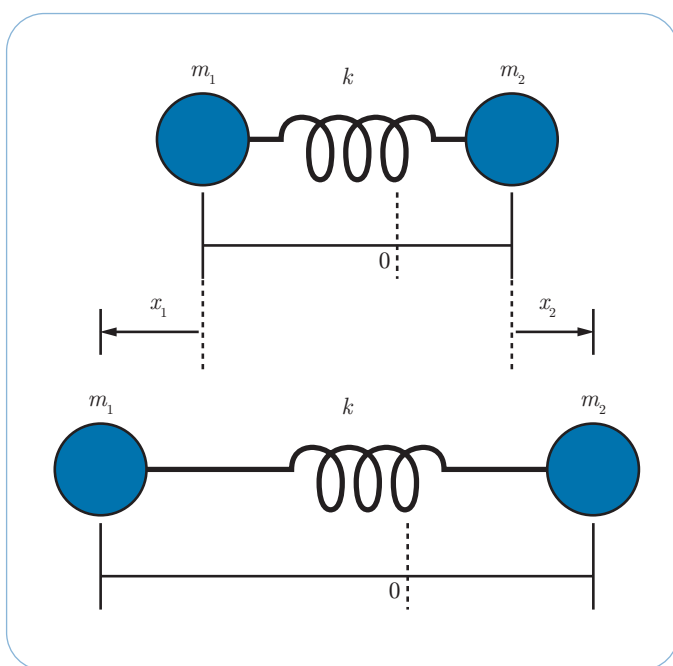


Figura 2 – Duas partículas de massa m_1 e m_2 ligadas por uma mola de constante k .



Atividade 2

Usando como referência a Figura 2, aplique as leis de Newton da Mecânica para duas partículas de massa m_1 e m_2 ligadas por uma mola de constante k e mostre que as equações de movimento são:

$$\begin{aligned}m_1 a_1 - k(x_2 - x_1) &= 0 \\m_2 a_2 + k(x_2 - x_1) &= 0\end{aligned}\quad \text{Eq. (3)}$$

onde x_1 e x_2 são, respectivamente, os deslocamentos das partículas 1 e 2 em relação às suas posições de equilíbrio. **Dica:** Considere deslocamentos das massas para a direita como tendo sinal positivo e para a esquerda como tendo sinal negativo.

Dividindo a primeira das equações acima por m_1 e a segunda por m_2 e então tomando a diferença entre elas, você obterá

$$a_2 - a_1 + k \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) (x_2 - x_1) = 0. \quad \text{Eq. (4)}$$

Uma vez que as forças que agem sobre as duas massas são determinadas pela deformação da mola e esta depende da diferença entre os deslocamentos sofridos por cada uma delas, introduzimos a coordenada relativa

$$X = x_2 - x_1. \quad \text{Eq. (5)}$$

em termos da qual podemos escrever a equação desse sistema.

Derivando duas vezes a equação acima, obtemos

$$\frac{d^2 X}{dt^2} = \frac{d^2 x_2}{dt^2} - \frac{d^2 x_1}{dt^2} = a_2 - a_1. \quad \text{Eq. (6)}$$

Introduzindo agora a massa reduzida μ , definida como

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad \text{Eq. (7)}$$

ou

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \text{Eq. (8)}$$

chegamos à seguinte equação:

$$\frac{d^2 X}{dt^2} + \frac{k}{\mu} X = 0. \quad \text{Eq. (9)}$$

A equação acima é formalmente idêntica à equação diferencial que descreve o oscilador harmônico simples. Ela tem, portanto, a mesma solução, bastando substituir a coordenada x pela coordenada relativa X e a massa m pela massa m reduzida μ do sistema. Uma vez obtida a massa reduzida e a constante de mola, a frequência angular de oscilação desse sistema pode ser imediatamente calculada da mesma forma que para o oscilador harmônico simples.

Assim, uma molécula diatômica apresenta apenas um modo vibracional, que será definido em função das massas dos dois átomos e também da constante k . É interessante discutir a constante k , pois ela está relacionada ao grau de interação entre os dois átomos, ou seja, ela pode ser relacionada com a medida de quão forte ou fraca é a ligação química entre os dois átomos. Quanto mais forte for uma ligação química, maior será o valor de k . Outro fato interessante de observar é que, uma vez que sabemos qual o valor da frequência de oscilação f de uma vibração molecular, podemos calcular qual é a energia referente a esse movimento através da equação de Planck (Equação 2).

A vibração dos átomos no interior de uma molécula apresenta energia coerente com a região do infravermelho. As linhas espectrais detectadas nesta região são o objeto das técnicas espectroscópicas denominadas de espectroscopia de infravermelho e espectroscopia Raman.

A espectroscopia vibracional também fornece informações valiosas sobre as estruturas de moléculas, especialmente quando combinamos as ferramentas complementares das espectroscopias de absorção de infravermelho e Raman.

A espectroscopia que utiliza a parte de micro-ondas do espectro eletromagnético tem se mostrado útil na observação do universo ao nosso redor. Observatórios astronômicos têm identificado moléculas específicas existentes no espaço interestrelar, como H_2O , HCN , H_2S , C_2H_2 , e até C_2H_5OH – todas com espectros de micro-ondas (ou seja, rotacional) observadas por “telescópios” de micro-ondas. Este conhecimento apoia a ideia de que substâncias químicas do nosso planeta estão presentes não apenas aqui, mas em todo o Universo.

Espectroscopia rotacional

A espectroscopia rotacional tem origem nas rotações quantizadas de moléculas no espaço tridimensional. Como esta espectroscopia só é aplicável para moléculas menores na fase gasosa, deteremo-nos à espectroscopia de moléculas diatômicas.

As moléculas diatômicas têm espectro rotacional relativamente simples, uma vez que podem girar em apenas duas dimensões (uma “rotação” ao redor do eixo internuclear não será observada) e o comportamento da rotação é o mesmo em ambas as direções (Figura 3). Observe que existem apenas duas maneiras de a molécula girar, e as duas rotações são iguais, exceto que os eixos rotacionais estão a um ângulo de 90° .

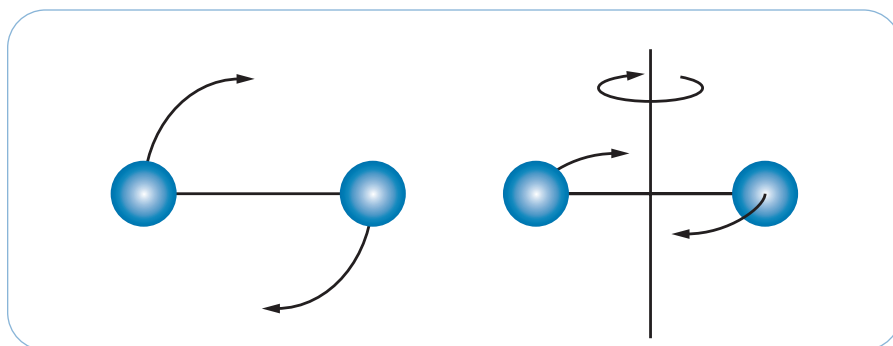


Figura 3 – Uma molécula diatômica tem apenas dois movimentos definidos, e estes são equivalentes entre si.

O movimento rotacional de uma molécula diatômica pode ser visualizado como a rotação de um rotor rígido em torno de seu centro de massa, como ilustra a Figura 3. O momento angular \vec{J} associado à rotação é um vetor que passa pelo centro de massa e se situa sobre o eixo de rotação, perpendicularmente ao eixo internuclear. A rotação em torno do próprio eixo internuclear é desprezível.

Classicamente, a energia de rotação do rotor rígido é

$$E = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{(I\omega)^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}, \quad \text{Eq. (10)}$$

onde I é o momento de inércia da molécula diatômica, que é definido com base na sua massa reduzida μ e na distância internuclear R_0 :

$$I = \mu R_0^2. \quad \text{Eq. (11)}$$

ω é o módulo do vetor velocidade angular de rotação e $\vec{L} = I\vec{\omega}$ é o vetor momento angular clássico. No caso em questão, $\vec{L} = \vec{J}$ é o vetor momento angular total da molécula diatômica, isto é,

$$E_{rot} = \frac{J^2}{2I}. \quad \text{Eq. (12)}$$

Do ponto de vista quântico, desde que o momento angular total seja uma grandeza quantizada, segue que a energia rotacional E_{rot} é quantizada e dada por

$$E_{rot} = \frac{j(j+1)}{2I}, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad \text{Eq. (13)}$$

Assim, conhecendo-se as distâncias entre as linhas dos espectros rotacionais, podemos obter as distâncias de ligação em moléculas simples na fase gasosa. Um exemplo típico de um espectro rotacional é dado na Figura 4. Observe o decréscimo no espaçamento energético com o aumento do número quântico rotacional j no ramo à direita, e o correspondente acréscimo no ramo à esquerda.

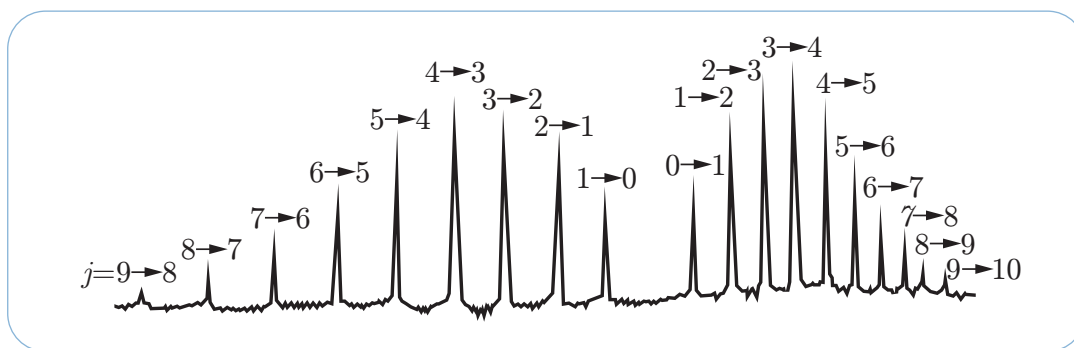


Figura 4 – Espectro rotacional típico de uma molécula diatômica.

O fator não ideal mais importante na espectroscopia rotacional talvez seja o fato de as moléculas não serem rotores rígidos. Considera-se, por exemplo, que as moléculas têm certas distâncias de ligações específicas e imutáveis, o que não é real. À medida que as moléculas têm números quânticos j cada vez maiores (correspondendo a energias cada vez maiores), elas se distorcem ligeiramente, mas o suficiente para alterar os níveis de energia perceptivelmente em relação aos valores ideais. Esse efeito é chamado de distorção centrífuga.

Considere a molécula diatômica na Figura 5(a). Conforme ela gira com o número quântico j relativamente baixo, a ligação química é forte o suficiente para manter um comprimento de ligação razoavelmente constante.

Entretanto, como a Figura 5(b) mostra, com um j maior, a molécula em rotação é distorcida à medida que os átomos em rotação sofrem um tipo de força centrífuga, como nós sentiríamos em um carrossel girando rapidamente. Essa força contribui para um leve alongamento da distância de ligação.

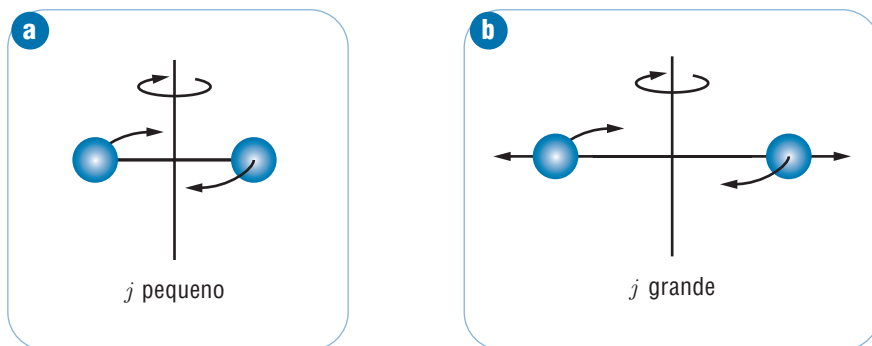


Figura 5 – Conforme o número quântico rotacional aumenta, uma distorção centrífuga causa extensão da ligação e, portanto, altera o espectro rotacional.

As distâncias de ligação aparecem no denominador da equação que define as constantes rotacionais, usadas para definir o momento de inércia I .

Dessa forma, este alongamento da ligação serve para diminuir a energia total do estado rotacional, e as linhas do espectro rotacional ficam separadas por uma distância menor entre as linhas adjacentes.



Atividade 3

Por que os átomos não têm espectro rotacional?

Espectroscopia molecular

Não levando em conta a energia devida ao movimento de translação, podemos expressar a energia total de excitação de uma molécula com uma boa aproximação como a soma das energias de excitações parciais dos níveis eletrônico, vibracional e rotacional:

$$E = E_{el} + E_{vib} + E_{rot}, \quad \text{Eq. (14)}$$

onde os subscritos el , vib e rot significam **eletrônica**, **vibracional** e **rotacional**, respectivamente. A energia rotacional só é relevante para o caso de moléculas em fase gasosa, pois só neste caso elas estão livres para girar.

Sendo a energia eletrônica muito maior do que a vibracional, e esta muito maior do que a rotacional, é possível, numa primeira aproximação, que estes níveis sejam considerados separadamente, isto é, cada tipo de espectro pode ser estudado independentemente das interações entre eles.

A Figura 6 ilustra os níveis vibracionais e rotacionais em dois estados eletrônicos I e II de uma molécula e duas possíveis transições entre eles. A transição A é uma transição rotacional-vibracional que ocorre no mesmo estado eletrônico I, e a transição B é uma transição rotacional-vibracional que envolve os estados eletrônicos I e II.

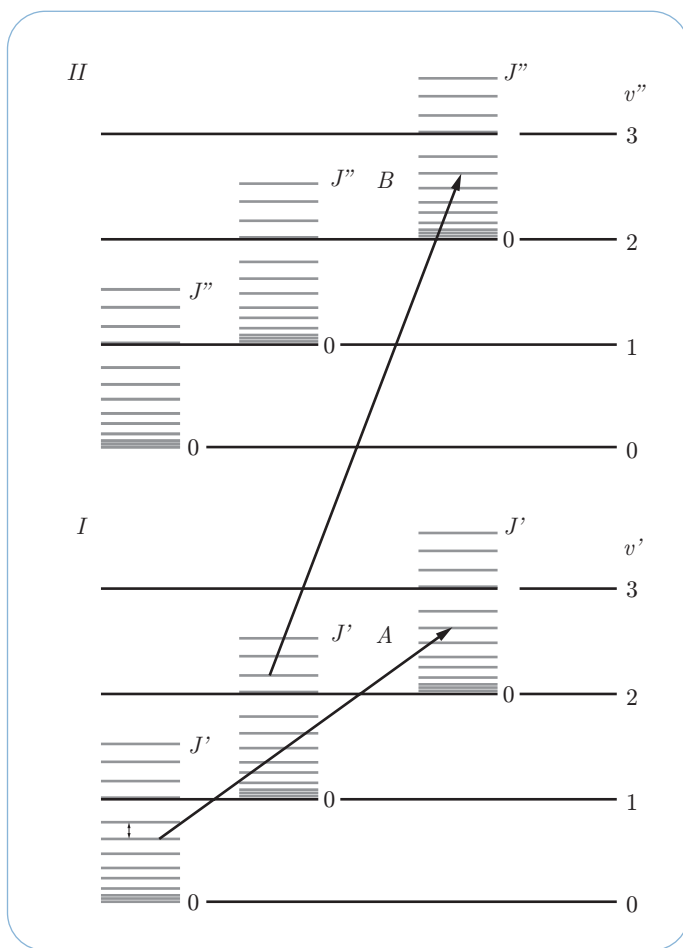


Figura 6 – Níveis vibracionais (v) e rotacionais (J) de dois estados eletrônicos I e II de uma molécula.

Uma vez que todos os espectros se devem às transições entre estados de energia, podemos também dividir o espectro eletromagnético em várias regiões, as quais são associadas aos diferentes tipos de energia molecular, como posto no lado esquerdo da tabela da Figura 1, mostrada no início desta aula.

Embora as fronteiras apresentadas não sejam precisas, uma radiação cuja frequência corresponda a uma região em particular possui a ordem de grandeza apropriada para realizar o processo molecular indicado. A Figura 1 permite classificar, de acordo com os processos envolvidos, a espectroscopia molecular em diversos ramos de atividade ou técnicas analíticas.

Em energias acima de $3 \times 10^3 \text{ Hz}$ (região de raios γ), a troca de energia envolve o rearranjo de partículas nucleares. No intervalo de energia de 3×10^{16} a $3 \times 10^{18} \text{ Hz}$ (região de raios X), as trocas de energia envolvem elétrons internos da molécula. No intervalo de energia de 3×10^{14} a $3 \times 10^{16} \text{ Hz}$ (regiões visível e ultravioleta), as trocas de energia envolvem transferência de elétrons de valência de um orbital para outro. O estudo das transições de elétrons de valência ou de transferência de elétrons num mesmo estado orbital, por exemplo, está no âmbito da espectroscopia eletrônica, particularmente no visível.

No intervalo de energia de 3×10^{12} a $3 \times 10^{14} \text{ Hz}$ fica a região do infravermelho. Estas energias estão associadas às vibrações moleculares, e o estudo do assunto é denominado espectroscopia vibracional.

No intervalo de energia de 10^9 a $3 \times 10^{11} \text{ Hz}$ (região de micro-ondas), as trocas de energia envolvem transições entre níveis rotacionais das moléculas.

O intervalo de energia de 3×10^6 a 10^9 Hz se situa a região de radiofrequência, onde as trocas de energia correspondem às inversões de spin de um núcleo ou elétron. Estas técnicas são chamadas de espectroscopia de ressonância magnética nuclear e de espectroscopia de ressonância de spin eletrônico.

Outra técnica espectroscópica não mencionada na Figura 1 é a espectroscopia Raman. Este tipo de espectroscopia estuda o efeito do espalhamento da radiação, com o qual se obtém informação a respeito das energias dos níveis vibracionais e rotacionais das moléculas. A informação obtida é muitas vezes complementar àquelas obtidas nas regiões do infravermelho e de micro-ondas, mas o espalhamento Raman da luz ocorre nas regiões do visível e ultravioleta do espectro eletromagnético.

Resumo

Nesta aula, apresentamos uma discussão sobre o conceito de “molécula” e ligações químicas do ponto de vista da Física. Reescrevemos o espectro de radiação em termos do número de onda, a unidade mais usada na espectroscopia, e usamos uma molécula diatômica como modelo para entender a origem da espectroscopia vibracional e da espectroscopia rotacional.

Autoavaliação

1

A energia de vibração do estado fundamental do HCl é cerca de dez vezes maior do que a do $NaCl$. Mostre que isto é aceitável, considerando os fatores que determinam esta grandeza.

2

A separação entre linhas espectrais num espectro puramente rotacional do HCl é $6,35 \times 10^{11} \text{ Hz}$. Use essa informação para encontrar o espaçamento internuclear R_0 dessa molécula.

3

Usando a Figura 6, desenhe uma seta indicando uma transição puramente rotacional.

4

Usando a Figura 6, desenhe uma seta indicando uma transição puramente vibracional entre os estados eletrônicos I e II.

Referências

CRUZ, Diana; CHAMIZO, José A.; GARRITZ, Andoni. **Estructura atômica**: um enfoque químico. Ed. Addison-Wesley Iberoamericana. 1991.

EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois S.A., 1979.

LIMA, Carlos R. A. **Notas de aulas de estrutura da matéria**. Capítulo 10.

YOUNG, Hugh D.; FREEDMAN, Roger A. **Física IV**: ótica e física moderna: Sears e Zemansky. 12. ed. São Paulo: Editora Pearson Education, 2009.

Estatísticas quânticas

Aula

11



Apresentação

Os objetos com os quais lidamos no nosso cotidiano são formados por um número muito grande de partículas atômicas. Tratar as propriedades macroscópicas de um sistema em termos das propriedades individuais destes constituintes é inviável. Já a distribuição estatística clássica, que é utilizada para estudar as propriedades de um sistema, não leva em consideração as características ondulatórias das partículas que constituem o sistema.

Em diversas situações, as propriedades ondulatórias dos constituintes materiais de um sistema são importantes e cruciais à descrição adequada do sistema. Assim, nesta aula vamos apresentar e estudar as distribuições estatísticas que podem ser utilizadas para se analisar um sistema formado por um número muito grande de partículas quânticas.

Objetivos

- 1 Perceber a importância da Física Estatística para a descrição das propriedades de um sistema de muitas partículas.
- 2 Conhecer os limites da distribuição de Boltzmann na descrição de sistemas de partículas.
- 3 Conhecer e entender as funções de distribuição quânticas e compará-las à distribuição clássica.
- 4 Discutir algumas aplicações das estatísticas quânticas.



Introdução

Nas aulas anteriores, vimos que a descrição completa de um sistema é obtida aplicando-se a equação de Schrödinger a cada um dos seus constituintes. Também vimos que esta equação só pode ser resolvida exatamente para um sistema de uma ou, no máximo, duas partículas (átomo de hidrogênio). Para sistemas constituídos por mais de duas partículas, podemos descrever suas propriedades apenas de forma aproximada.

Por outro lado, sabemos que os corpos e sistemas de nosso cotidiano possuem dimensões muito maiores que as dimensões atômicas. Esses sistemas são constituídos, em geral, por um número muito grande de átomos e, portanto, é inviável descrever um sistema macroscópico a partir do comportamento de seus átomos individuais.

Entretanto, podemos estimar os valores de muitas propriedades mensuráveis de um sistema macroscópico sem precisar estudar o movimento individual de seus constituintes. Para tanto, ignoramos os movimentos individuais das partículas e determinamos o comportamento provável do sistema a partir de considerações estatísticas.

Esta forma de estudar o comportamento de sistemas macroscópicos é conhecida como Mecânica Estatística, e costuma apresentar bons resultados se o número de partículas do sistema é suficientemente grande para que a teoria estatística clássica seja aplicável.

Ao analisarmos um sistema macroscópico, estamos interessados em estudar e prever a distribuição mais provável de energia disponível às partículas que constituem o sistema. Esta distribuição da energia das partículas do sistema em um dado instante e os valores de energia assumidos por uma partícula no decorrer do tempo seguem uma distribuição estatística denominada **Distribuição de Boltzmann**.

Nesta aula, vamos apresentar a distribuição de Boltzmann e conhecer as considerações feitas a respeito do sistema e de seus constituintes para que ele siga esta distribuição. Em seguida, vamos estudar as modificações que devem ser feitas na distribuição de Boltzmann para levar em conta as propriedades quânticas das partículas do sistema, obtendo, desta forma, as distribuições estatísticas que descrevem o comportamento dos sistemas quânticos.



A Estatística Clássica: distribuição de Boltzmann

Um dos principais objetivos da Física Estatística, ao estudar um sistema constituído por um número muito grande de partículas, é determinar a forma como uma quantidade fixa de energia se distribui entre as partículas que compõem o sistema, pois a partir desta informação é possível calcular muitas das propriedades mensuráveis do sistema.

O físico Ludwig Boltzmann (Figura 1) propôs uma função de distribuição que permite calcular o número provável de partículas que ocuparão os estados de energia disponíveis de um sistema clássico constituído por um número muito grande de partículas idênticas em equilíbrio térmico. Esta função de distribuição, que passou a ser chamada distribuição de Boltzmann, é a função de distribuição mais importante da Física Estatística Clássica e é dada por:

$$f_B(E) = Ae^{-E/k_B T}, \quad \text{Eq. (1)}$$

onde A é uma constante de normalização cujo valor depende do sistema que está sendo estudado e é k_B a constante de Boltzmann, que vale:

$$k_B = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8,617 \times 10^{-5} \text{ eV/K} \quad \text{Eq. (2)}$$

e o termo $e^{-E/k_B T}$ é conhecido como fator de Boltzmann.



Figura 1 – Ludwig Boltzmann (1844-1906).

Para calcular o número de partículas com energia E , basta tomar:

$$n(E) = g(E)f_B(E) = Ag(E)e^{-E/k_B T}, \quad \text{Eq. (3)}$$

onde $g(E)$ é a função de peso ou degenerescência do estado e também é chamada densidade de estados do sistema, pois $g(E)dE$ representa o número de estados com energia entre E e $E+dE$. Temos ainda que lembrar que, classicamente, E e $n(E)$ são funções contínuas; assim, $g(E)$ e $f(E)$ e também são funções contínuas.

Para nos familiarizarmos com a função de distribuição de Boltzmann, façamos o exemplo a seguir.

Exemplo 1 – Átomos de hidrogênio no primeiro estado excitado

O primeiro estado excitado do átomo de hidrogênio E_2 está $10,2 \text{ eV}$ acima do estado fundamental E_1 . Qual é a razão entre o número de átomos no primeiro estado excitado e o número de átomos no estado fundamental quando o sistema está: **(a)** à temperatura ambiente $T = 300 \text{ K}$; **(b)** à temperatura da superfície do Sol $T = 5800 \text{ K}$?

Solução

O número de átomos em um estado de energia E é dado pela Equação 2. Assim, a razão entre o número de átomos no primeiro estado excitado e o número de átomos no estado fundamental vale:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{A g_2 e^{-E_2/k_B T}}{A g_1 e^{-E_1/k_B T}} = \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2-E_1)/k_B T}. \quad \text{Eq. (4)}$$

O peso estatístico ou degenerescência do estado g_1 , levando em conta o spin, é igual a 2. Já a degenerescência g_2 do primeiro estado excitado é igual a 8, pois é o estado com $l = 0$ e os três estados com $l = 1$, todos com dois estados de spin. Desta forma,

$$\frac{g_2}{g_1} = \frac{8}{2} = 4,$$

o que nos fornece para a Equação 4:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2-E_1)/k_B T} = 4 e^{-(E_2-E_1)/k_B T}. \quad \text{Eq. (5)}$$

a) Para $T = 300 \text{ K}$ e usando o valor da constante de Boltzmann, temos que $k_B T \approx 0,026$. Substituindo este valor $E_2 - E_1 = 10,2 \text{ eV}$ e na Equação 5, obtemos:

$$\frac{n_2}{n_1} = 4 e^{-(E_2-E_1)/k_B T} = 4 e^{-10,2/0,026} = 4 e^{-392} \approx 10^{-171} \approx 0. \quad \text{Eq. (6)}$$

Ou seja, à temperatura ambiente, praticamente todos os átomos de hidrogênio estão com seus elétrons no estado fundamental. Este resultado mostra que, devido à grande diferença de energia entre os dois estados em comparação com a energia térmica $k_B T \approx 0,026$, existem pouquíssimos átomos no primeiro estado excitado. O número de átomos nos outros estados excitados é ainda menor, o que explica porque à temperatura ambiente não conseguimos detectar radiação emitida pelo átomo de hidrogênio.

b) Para $T = 5800 \text{ K}$, $k_B T = 0,5$. Substituindo este valor $E_2 - E_1 = 10,2 \text{ eV}$ e na Equação 5, obtemos:

$$\frac{n_2}{n_1} = 4e^{-(E_2-E_1)/k_B T} = 4e^{-10,2/0,5} = 4e^{-20,4} \approx 10^{-8}. \quad \text{Eq. (7)}$$

Ou seja, na superfície do Sol, para cada mol de átomos (10^{23} átomos), cerca de 10^{15} átomos estão no primeiro estado excitado. Nestas condições, conseguiremos facilmente detectar a radiação emitida pelo átomo de hidrogênio ao passar do primeiro estado excitado para o estado fundamental.



Atividade 1

Para o hidrogênio na superfície do Sol, determine a razão entre o número de átomos no terceiro estado excitado e o número de átomos no estado fundamental.

A função de distribuição de Boltzmann, expressa na Equação 1, pode ser escrita na forma:

$$f_B(E) = \frac{1}{e^\alpha e^{-E/k_B T}}, \quad \text{Eq. (8)}$$

onde a constante de normalização A foi substituída pela constante $e^{-\alpha}$. Vamos escrever a distribuição de Boltzmann na forma da Equação 8 para compará-la mais facilmente às funções de distribuição quânticas que apresentaremos nas seções seguintes.

As Estatísticas de Bose-Einstein e Fermi-Dirac

A distribuição de Boltzmann é uma relação fundamental a partir da qual é possível deduzir muitas das propriedades de sistemas clássicos, tanto no estado gasoso como nos estados líquido e sólido. Ela é válida para os sistemas clássicos que são constituídos por partículas idênticas, mas distintas. Podemos pensar neste tipo de sistema como um enorme conjunto de bolas de sinuca de mesma massa, formato e tamanho, mas que podem ser identificadas facilmente, pois cada uma possui uma cor diferente.

Na Física Quântica, por outro lado, duas partículas idênticas cujas funções de onda se sobrepõem não podem ser identificadas.

Podemos imaginar a seguinte situação: duas partículas idênticas 1 e 2 (dois elétrons, por exemplo) passam uma pela outra a uma distância menor que o comprimento de onda de suas funções de onda e depois são detectadas. É impossível determinarmos qual das partículas é a 1 e qual delas é a 2. Ou seja, não se pode distinguir entre as quatro possibilidades representadas na Figura 2.

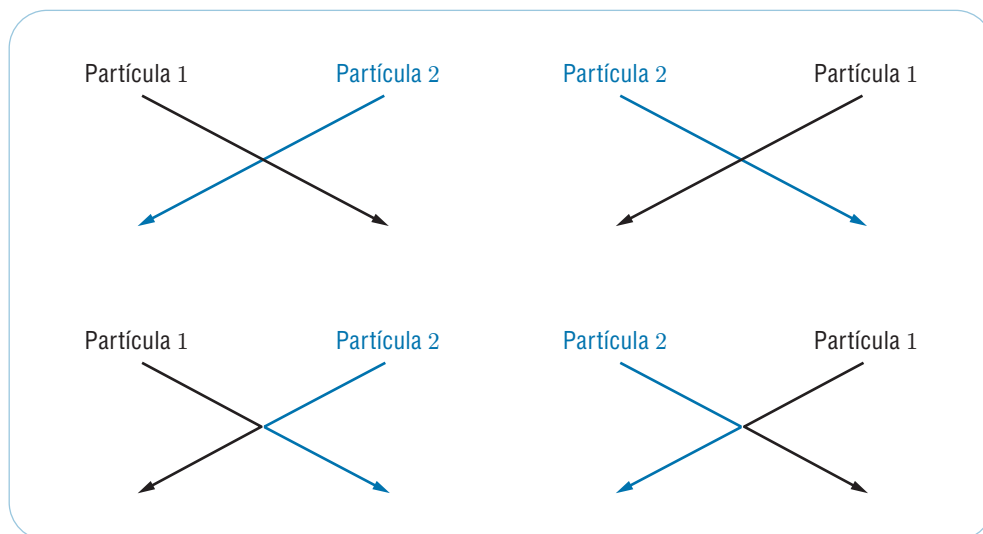


Figura 2 – Devido à natureza ondulatória das partículas, é impossível verificar qual das quatro interações aconteceu quando duas partículas quânticas se cruzaram a uma distância da ordem de seus comprimentos de onda de De Broglie.

A distribuição de Boltzmann não pode ser aplicada a sistemas constituídos por partículas indistinguíveis. No entanto, o tratamento das partículas clássicas que leva à distribuição de Boltzmann pode ser estendido a sistemas constituídos por um número muito grande de partículas idênticas e indistinguíveis.

A primeira destas análises se aplica a partículas com spin nulo ou inteiro, como os átomos de hélio ($m_s = 0$ ou spin zero) ou fótons ($m_s = 1$ ou spin 1), os quais não obedecem ao Princípio da Exclusão de Pauli (veja a Aula 9 - Átomos com muitos elétrons). Esta análise foi realizada em 1924 por Satyendra Nath Bose (1894-1974), quando este se deu conta que a distribuição de Boltzmann não explicava adequadamente o comportamento dos fótons. Pouco depois, a distribuição proposta por Bose foi aplicada por Einstein a partículas com massa de repouso diferente de zero. Esta distribuição é conhecida como distribuição de Bose-Einstein, e é dada por:

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{-E/k_B T} - 1}, \quad \text{Eq. (9)}$$

onde e^{α} é uma constante de normalização que depende do sistema estudado. As partículas que obedecem à distribuição estatística de Bose-Einstein são chamadas de **bósons**.

Depois que o spin do elétron foi descoberto e Paul Dirac (1902-1984) formulou a mecânica ondulatória relativística para partículas de spin $1/2$, ele e Enrico Fermi (1901-1954) completaram a mecânica estatística quântica calculando a função distribuição para partículas de spin fracionário, como os elétrons, que obedecem ao Princípio da Exclusão. Esta distribuição, que hoje é conhecida como distribuição de Fermi-Dirac, é dada por:

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{-E/k_B T} + 1}, \quad \text{Eq. (10)}$$

onde, novamente, é $e^{-\alpha}$ uma constante de normalização que depende do sistema estudado. As partículas que obedecem à função de distribuição de Fermi-Dirac são chamadas de **férmions**.

Comparação entre as Estatísticas Clássica e Quântica

Comparando a forma das distribuições estatísticas dadas pelas Equações 8, 9 e 10 aqui reescritas:

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{-E/k_B T}},$$

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{-E/k_B T} - 1},$$

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{-E/k_B T} + 1},$$

vemos que elas são semelhantes. A única diferença matemática entre elas é o fato de que nas distribuições de Bose-Einstein e Fermi-Dirac aparecem, respectivamente, os termos -1 e $+1$ no denominador da função. Assim, precisamos entender o significado físico destes ± 1 nestas distribuições estatísticas.

Para entender o significado desta diferença entre as distribuições, vamos considerar um sistema formado por duas partículas idênticas, 1 e 2, onde uma delas se encontra no estado m e a outra no estado n . Existem duas soluções para a equação de Schrödinger do sistema, e elas são baseadas no produto das funções de onda individuais das duas partículas:

$$\psi_{mn} = (1, 2) = \psi_m(1)\psi_n(2), \quad \text{Eq. (11)}$$

$$\psi_{mn} = (2, 1) = \psi_m(2)\psi_n(1), \quad \text{Eq. (12)}$$

onde os números 1 e 2 representam as coordenadas espaciais das duas partículas.

Se as duas partículas podem ser distinguidas (comportam-se como partículas clássicas), as Equações 11 e 12 representam soluções possíveis para o sistema. Mas se as partículas são indistinguíveis, as funções de onda do sistema devem refletir esta indistinguibilidade, ou seja, as funções de onda do sistema devem ser uma combinação simétrica ou antissimétrica dos produtos das funções individuais:

$$\psi_{BE} \equiv \psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_m(1)\psi_n(2) + \psi_m(2)\psi_n(1)], \quad \text{Eq. (13)}$$

$$\psi_{FD} \equiv \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_m(1)\psi_n(2) - \psi_m(2)\psi_n(1)], \quad \text{Eq. (14)}$$

onde o fator $1/\sqrt{2}$ é a constante de normalização.

Como vimos na Aula 9, as funções de onda de partículas que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli (férmions) são antissimétricas; e as funções que representam partículas que não obedecem a este princípio (bósons) são simétricas. Desta forma, vamos aplicar a função de onda representada na Equação 13 para os bósons e a representada na Equação 14 para os férmions, como já está indicado nestas equações, onde definimos $\psi_{BE} \equiv \psi_S$ para a função antissimétrica e $\psi_{FD} \equiv \psi_A$ para a função simétrica. Para compararmos as funções distribuições, vamos calcular a probabilidade de que as duas partículas sejam observadas no mesmo estado, o estado m , por exemplo.

Para as partículas clássicas, cuja função de onda é dada pela Equação 11 (ou 12) temos:

$$\psi_{mm}(1, 2) = \psi_{mm}(2, 1) = \psi_m(1)\psi_m(2) = \psi_m(2)\psi_m(1) \equiv \psi_B. \quad \text{Eq. (15)}$$

Assim, a densidade de probabilidade de duas partículas clássicas serem encontradas no mesmo estado m é dada por:

$$|\psi_B|^2 = \psi_B^* \psi_B = \psi_m^*(1)\psi_m^*(2)\psi_m(1)\psi_m(2). \quad \text{Eq. (16)}$$

Já para bósons, vamos fazer $m = n$ na Equação 13. Desta forma, temos:

$$\psi_{BE} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_m(1)\psi_m(2) + \psi_m(2)\psi_m(1)] = \frac{2}{\sqrt{2}}\psi_m(1)\psi_m(2), \quad \text{Eq. (17)}$$

e, portanto, a densidade de probabilidade é

$$|\psi_{BE}|^2 = \psi_{BE}^* \psi_{BE} = 2\psi_m^*(1)\psi_m^*(2)\psi_m(1)\psi_m(2) = 2\psi_B^* \psi_B. \quad \text{Eq. (18)}$$

Assim, a probabilidade de dois bósons serem encontrados no mesmo estado é duas vezes maior que no caso de partículas clássicas. Este resultado pode ser generalizado como:

A presença de um bóson em um estado quântico aumenta a probabilidade de um bóson idêntico ocupar o mesmo estado.

É como se um bóson atraísse outro bóson para o mesmo estado quântico. Portanto, o termo -1 na forma da função distribuição de Bose-Einstein está relacionado ao fato de que, em comparação com o caso das partículas clássicas, a probabilidade de encontrar vários bósons no mesmo estado quântico é maior.

Para férmions, vamos fazer $n = m$ na Equação 14, o que nos fornece:

$$\psi_{FD} \equiv \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_m(1)\psi_m(2) - \psi_m(2)\psi_m(1)] = 0. \quad \text{Eq. (19)}$$

Assim, a densidade de probabilidade de encontrarmos dois férmions no mesmo estado é nula. Para um sistema com um grande número de partículas, podemos escrever que:

A presença de um férmion em um estado quântico impede que outro férmion idêntico ocupe o mesmo estado.

É como se férmions idênticos se repelissem. Vemos, desta maneira, que o $+1$ no denominador da função de distribuição de Fermi-Dirac traduz o princípio de exclusão de Pauli.

Na Figura 3, temos um gráfico comparativo das funções de distribuição, para $\alpha = 0$, no intervalo de energia de 0 a $5k_B T$. Observe que a curva de f_{BE} está sempre acima de f_B que, por sua vez, está sempre acima de f_{FD} .

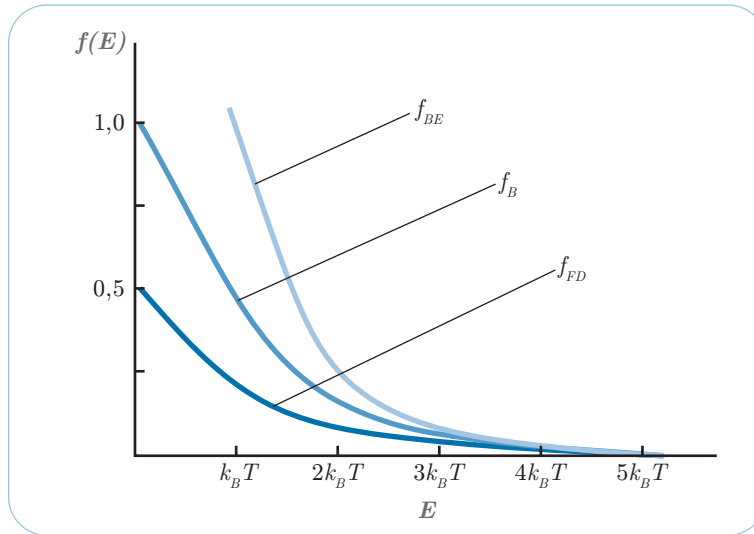


Figura 3 – Gráfico das distribuições estatísticas f_{FD} , f_B e f_{BE} em função da energia para $\alpha = 0$.

Pelo gráfico, vemos que, à medida que a energia aumenta, as distribuições de Bose-Einstein e de Fermi-Dirac tendem para a distribuição de Boltzmann, e que as três distribuições são praticamente idênticas para energias maiores que $5k_B T$. Isto ocorre porque, se a energia do sistema é muito grande, o número de estados possíveis é muito maior que o número de partículas e, para qualquer das distribuições, a densidade média de partículas por estado é muito menor que a unidade $n_{FD} \cong n_{BE} \cong n_B \ll 1$, e a probabilidade de encontrar mais de uma partícula por estado – qualquer que seja o tipo de partícula (clássica, bóson ou férmion) – é praticamente nula. Lembre-se que, no caso dos férmions, esta probabilidade seria nula a qualquer temperatura.

Podemos utilizar a estatística de Boltzmann para descrever um sistema de férmions ou de bósons sempre que a densidade média de partículas por estado for muito menor que a unidade. Mas há outra maneira simples de determinarmos se a estatística de Boltzmann é aplicável ao sistema.

No início de nossa aula falamos que, devido às características ondulatórias, as partículas não se comportam como partículas clássicas se a interação entre elas ocorrer em distâncias da ordem do comprimento de onda de De Broglie. Ou seja, se a distância média entre as partículas de um sistema é muito maior que o comprimento de onda associado a essas partículas, elas se comportam como partículas clássicas e, por isso, podemos usar a função de distribuição de Boltzmann para descrever o comportamento do sistema. Matematicamente, temos que

$$\lambda \ll \langle d \rangle, \quad \text{Eq. (20)}$$

onde $\langle d \rangle$ é a distância média entre as partículas do sistema e λ é o comprimento de onda de De Broglie associado a estas partículas, que é dado por:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}}, \quad \text{Eq. (21)}$$

onde E_c é a energia cinética da partícula.

Em um sistema termodinâmico em equilíbrio térmico, a energia cinética média dos constituintes do sistema pode ser escrita como (lembre-se da disciplina Calor e Termodinâmica):

$$E_C = \frac{3}{2}k_B T, \quad \text{Eq. (22)}$$

o que nos permite escrever o comprimento de onda associado à partícula como:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}. \quad \text{Eq. (23)}$$

Por outro lado, a distância média entre as partículas de um sistema pode ser escrita em termos do volume total do sistema e do número total de partículas como:

$$\langle d \rangle = \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3}. \quad \text{Eq. (24)}$$

Substituindo as Equações 23 e 24 na Equação 20, obtemos:

$$\frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} \ll \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3} \quad \text{Eq. (25)}$$

ou

$$\frac{N}{V} \frac{h^3}{(3mk_B T)^{3/2}} \ll 1. \quad \text{Eq. (26)}$$

Todo gás ou sistema macroscópico é formado por partículas quânticas e, a rigor, deveria ter suas propriedades macroscópicas estudadas em termos das estatísticas quânticas (estatística de Fermi-Dirac ou de Bose-Einstein). Entretanto, sob certas condições, podemos estudar o sistema com a estatística de Boltzmann, e a Equação 25 estabelece as condições nas quais podemos fazer isto. Note que, no geral, são necessárias altas temperaturas e baixas densidades para que a desigualdade da Equação 26 seja satisfeita.

Exemplo 2

Os átomos de hélio, que constituem uma fração igual a $5,25 \times 10^{-6}$ das partículas presentes na atmosfera terrestre, possuem spin nulo e, portanto, são bósons. Determine se a distribuição de Boltzmann pode ser utilizada para prever as propriedades térmicas do hélio atmosférico a uma temperatura de 273 K , sabendo que a massa do hélio vale $6,64 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Solução

Em condições normais de temperatura e pressão (CNTP), 1 mol de átomos ($6,02 \times 10^{23}$ átomos) de um gás, inclusive hélio, ocupa um volume igual a $22,4$ litros, que é igual a $2,24 \times 10^{-2} \text{ m}^3$ (lembre-se da disciplina Calor e Termodinâmica). Portanto, o número de átomos de hélio por unidade de volume na atmosfera terrestre é

$$\frac{N}{V} = \frac{6,02 \times 10^{23} \times 5,24 \times 10^{-6}}{2,24 \times 10^{-2}(\text{m}^3)} = 1,41 \times 10^{20} \text{ átomos de hélio/m}^3$$

Aplicações das Estatísticas Quânticas

Nesta seção vamos discutir qualitativamente e/ou citar algumas das aplicações mais importantes das estatísticas quânticas.

Condensado de Bose-Einstein

Para gases em condições normais, o número de estados quânticos disponíveis por partícula é muito grande e, devido à baixa densidade dos gases (grande distância média entre seus constituintes) e à massa elevada de suas partículas, a probabilidade de que duas partículas ocupem o mesmo estado quântico é muito pequena. Entretanto, à medida que a temperatura diminui, a distância média entre os átomos é reduzida e, portanto, a probabilidade de que duas partículas ocupem o mesmo estado vai aumentando.

Para a maioria dos gases e líquidos, mesmo a baixas temperaturas, o número de estados disponíveis por partícula ainda é grande, e pode-se usar a distribuição de Boltzmann para descrevê-lo, ao invés das distribuições quânticas. Entretanto, no caso do hélio líquido existe aproximadamente uma partícula para cada estado quântico, e a distribuição estatística clássica não pode ser utilizada.

Além disso, como acontece em qualquer átomo, todas as partículas (prótons, nêutrons e elétrons) que compõem o átomo de hélio (${}^4\text{He}$) são férmions. Mas, como na maioria dos átomos da tabela periódica, no ${}^4\text{He}$ estas partículas estão organizadas de tal forma que o spin total do estado fundamental é um número inteiro (zero), e, portanto, o ${}^4\text{He}$ e estes átomos de spin inteiro são bósons.

O hélio líquido pode ser tratado como um gás ideal que obedece a estatística de Bose-Einstein. Os outros materiais, apesar de serem formados por átomos que em seu estado fundamental têm spin inteiro, não podem ser tratados como um gás de bósons quando em baixas temperaturas, pois todos eles se solidificam em temperaturas muito superiores às que seriam necessárias para que átomos do fluido, em uma fração considerável, começassem a ocupar o estado fundamental de energia.

A ideia de que a distribuição estatística de Bose-Einstein descreve o comportamento do hélio líquido foi sugerida por F. London, em 1938, para explicar o comportamento anômalo do hélio em baixas temperaturas, cuja curva de densidade em função da temperatura apresentava uma descontinuidade para uma temperatura de $2,17\text{ K}$.

Em 1928, W. H. Keesom e M. Wolfke propuseram que a descontinuidade da derivada da curva nesta temperatura tinha como causa uma transição de fase. Eles usaram os termos “hélio I” para o líquido com temperatura acima de $2,17\text{ K}$ e “hélio II” para o líquido com temperatura

abaixo deste valor. Na teoria de London, conhecida como modelo dos dois fluidos, considera-se que o hélio II é formado por dois componentes: um fluido normal com propriedades semelhantes às do hélio I e um superfluido, que é um fluido com viscosidade nula e que, por isto, tem propriedades muito diferentes.

Quando a temperatura é reduzida a partir de um certo valor, a fração da fase superfluida do hélio aumenta, e a fração da fase normal diminui até que, no zero absoluto, resta apenas a fase superfluida.

Na fase superfluida, todos os átomos do hélio se encontram no estado de menor energia possível, o nível fundamental. Como estes átomos não podem ser excitados para níveis de maior energia, o superfluido não contribui para a viscosidade do líquido. Para temperaturas próximas do zero absoluto, a viscosidade do hélio é desprezível.

O estado em que todos os seus átomos ocupam o nível de menor energia é chamado de condensado de Bose-Einstein. A distribuição de densidade do condensado de Bose-Einstein é representada por uma única onda macroscópica, com amplitude e fase definida. Este estado da matéria constitui a observação macroscópica das ondas associadas a objetos materiais. A condensação de Bose-Einstein foi conseguida pela primeira vez em 1995, por C. E. Wieman e E. Cornell.

Para se conseguir condensados de Bose-Einstein para outras substâncias que não o hélio, o que se faz necessário é diminuir bastante a temperatura do material, aumentar a pressão e usar armadilhas magnéticas para aprisionar os átomos, impedindo-os de atingirem o estado sólido.

Os detalhes deste tipo de experimento podem ser encontrados em revistas de divulgação científica ou livros didáticos mais avançados, ou mesmo em algumas páginas de internet. Em nossa aula, queremos apenas lembrar que o condensado é considerado um outro estado físico da matéria, além dos estados comuns (sólido, líquido e gasoso) e plasma. Este novo estado, o condensado de Bose-Einstein, só é conseguido em situações extremas de laboratório, com os materiais à temperaturas muito próximas do zero absoluto.

Gás de fótons

Como vimos na Aula 2 (A radiação térmica e a quantização da energia), Planck propôs uma expressão empírica para explicar o espectro de radiação de um corpo negro. Pensando no modelo idealizado de corpo negro (cavidade completamente fechada, exceto por uma pequena abertura de área conhecida, através da qual a radiação pode entrar ou sair) e usando a distribuição de Bose-Einstein para tratar os fótons que existem no interior da cavidade como um gás de bósons, podemos deduzir a expressão de Planck para a distribuição de energia do espectro da radiação de corpo negro. O fato de podermos fazer tal dedução para o espectro eletromagnético de um corpo negro, ao tratar os fótons da cavidade como partículas quânticas, é mais um exemplo da dualidade onda-partícula. Tal expressão foi proposta, originalmente, tratando-se a radiação eletromagnética no interior da cavidade como ondas clássicas.

Gás de férmions

Do mesmo jeito que podemos aplicar a estatística de Bose-Einstein para um gás ideal de bósons, podemos aplicar a estatística de Fermi-Dirac para um gás ideal de férmions.

Para uma mesma temperatura, a energia média dos constituintes do gás de férmions é maior que a energia média dos constituintes do gás clássico e do gás de bósons. Isto acontece porque os férmions não podem ocupar o mesmo estado de energia e, desta forma, muito mais estados de energia serão ocupados a partir do estado fundamental.

Os principais tipos de gás de férmions são os gases de elétrons (elétrons de condução em um metal condutor, por exemplo), gases de nêutrons (nêutrons de uma estrela de nêutrons) ou gases atômicos (como o gás de ^3He a baixas temperaturas). Estes sistemas são estudados em cursos mais avançados de Física.

Conclusões da disciplina

Nesta disciplina, estudamos sobre uma das maiores revoluções do pensamento científico na história da humanidade: a Física Quântica. Seu surgimento e desenvolvimento permitiram ao homem entender e explicar diversos fenômenos ligados direta ou indiretamente às escalas atômicas da matéria e que a Física Clássica é incapaz de explicar.

Para a construção e desenvolvimento da Física Quântica surgiram novos conceitos e princípios que, inicialmente, poderiam nos parecer contraintuitivos, mas que são necessários ao entendimento e à compreensão da natureza.

Como disse Einstein, “o fato mais incompreensível na natureza é ela poder ser compreendida”, mas só podemos compreender a natureza e seus fenômenos se descobirmos as suas leis e princípios. Nossa concepção de mundo deve se adequar aos fenômenos naturais. Devemos enxergar o mundo a partir dos estudos destes fenômenos, e não querer que os fenômenos estejam de acordo com nossas ideias preconcebidas sobre a natureza e o mundo. As leis físicas são desenvolvidas a partir da observação, e nem sempre são válidas para todos os fenômenos observados na natureza.

Concluindo, o desenvolvimento da Física Quântica teve enorme importância no desenvolvimento do conhecimento humano acerca da natureza e do mundo, e foi a partir da aplicação da Física Quântica e de seu desenvolvimento que pudemos alcançar o nível tecnológico da sociedade contemporânea.

Resumo

Nesta aula, aprendemos que para estudar sistemas macroscópicos formados por um grande número de constituintes microscópicos não podemos estudar o comportamento individual de cada um de seus constituintes, mas que devemos estudar o comportamento médio destes constituintes. Classicamente, a distribuição estatística usada para estudar tais sistemas é a distribuição de Boltzmann. Mas, para levar em conta os efeitos quânticos do sistema, você observou que precisamos usar distribuições tais como a de Bose-Einstein (para partículas que não obedecem ao princípio da exclusão de Pauli) ou a de Fermi-Dirac (para as partículas que seguem o princípio da exclusão). Estudamos as propriedades destas distribuições estatísticas e discutimos algumas de suas aplicações mais importantes.

Autoavaliação

1

A distribuição de Boltzmann é utilizada para estudar o comportamento de sistemas por um número muito grande de partículas idênticas e distinguíveis (partículas clássicas). Explique em que sentido as partículas clássicas, mesmo idênticas, podem ser distinguidas em uma interação.

2

Por que precisamos separar as partículas quânticas em férmions e bósons ao estudarmos seus comportamentos estatísticos?

3

Descreva as principais diferenças entre as propriedades físicas de bósons e férmions.

4

Por que o comportamento da distribuição de Boltzmann está entre o comportamento das distribuições de Fermi-Dirac e de Bose-Einstein? Qual a relação entre elas?

5

Quais são as condições para as quais as propriedades de um sistema de partículas quânticas podem ser descritas pela distribuição de Boltzmann?

6

Considere três recipientes de mesmo volume e à mesma temperatura. Estes recipientes contêm o mesmo número de partículas; o primeiro contém partículas clássicas, o segundo férmions e o terceiro bósons. Qual destes recipientes terá a menor pressão? Qual terá a maior pressão? Justifique.

Referências

EISBERG, R. M. **Fundamentos da física moderna**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara Dois, 1979.

SERWAY, Raymond A.; JEWETT JÚNIOR, John W. **Princípios de Física: óptica e física moderna**. São Paulo: Editora Thomson, 2005. v 4.

TIPLER, Paul A.; LIEWELLYN, Ralph A. **Física moderna**. 3. ed. São Paulo: Editora LTC, 2001.

Esta edição foi produzida em setembro de 2014 no Rio Grande do Norte, pela Secretaria de Educação a Distância da Universidade Federal do Rio Grande do Norte (SEDIS/UFRN), sobre papel offset 90 g/m².

SEDIS Secretaria de Educação a Distância – UFRN | CampusUniversitário
Praça Cívica | Natal/RN | CEP 59.078-970 | sedis@sedis.ufrn.br | www.sedis.ufrn.br



Ministério da
Educação

