



BREVE DISCUSSÃO DA MECÂNICA QUÂNTICA: HISTÓRIA E FORMALISMO MATEMÁTICO



Bathista, A. L. B. S., Nogueira, J. S.

Departamento de Física – Universidade Federal de Mato Grosso
Av. Fernando Corrêa, CEP 78060-900, Cuiabá-MT
andrelbbs@hotmail.com

RESUMO

O presente trabalho, traz informações básicas da Mecânica Quântica e alguns experimentos e apontamentos que foram de interesse coletivo para estudantes de Física, Química e áreas afim.

I INTRODUÇÃO

A mecânica quântica foi construída na década de 20 para lidar com o átomo, os físicos consideravam-na como um instrumento provisório destinado ao fracasso fora dos domínios do átomo, entretanto a mecânica quântica prosperou e ultrapassou os mais fantásticos sonhos de seus inventores [1]. Atualmente, devido a aceitação dos Postulados Quânticos e suas extensivas aplicações em cursos de graduação como física e química e em muitos Centros Científicos, vem proporcionando maior divulgação de experimento clássicos da Mecânica Quântica, bem como seus inventores. Um dos meios de divulgação é a Internet, que nos favorece diversas fontes de trabalhos diretos ou correlacionados à Mecânica Quântica, sendo estes: revistas, fascículos e até mesmo jornais científicos.

1.1 CONCEITOS PRELIMINARES

Para explicar a mecânica dos átomos e dos sistemas nucleares, foram desenvolvidas, a partir de 1900, diversas teorias. Estas teorias foram se enquadrando a uma denominação comum: “Mecânica Quântica”(MQ).

Assim, MQ é um conjunto de teoria dos sistemas atômicos e nucleares. Este conjunto não é unitário, mas sim uma sucessão de diversas teorias, umas complementares das outras. Estas teorias surgiram e desenvolveram-se da Física Clássica, particularmente da mecânica newtoniana e da teoria eletromagnética de Maxwell.

Demonstrando-se que os conceitos clássico e eletromagnético eram suficientes para explicação do mundo macroscópico, mas, incapazes para uma explicação adequada e coerente do mundo microscópico,

i.e., atômico-nuclear e também molecular, nasceram à chamada “Antiga teoria dos quanta” ou Mecânica Quântica Antiga. Esta mecânica compreende as teorias de Planck (1900), Einstein (1905), Bohr (1913) e De Broglie (1924).

A antiga MQ embora explicasse muitos fenômenos até então incompreendidos, falhava em sua base lógica para outros fenômenos. E assim Heisenberg (1925), desenvolveu a “Mecânica das Matrizes”, que não implica em nenhum modelo atômico, pois é um edifício puramente matemático. Quase simultaneamente, Schrödinger (1926) baseando-se

nas idéias de De Broglie, desenvolveu a “Mecânica ondulatória”. Esta mecânica tem um aspecto mais físico, embora algo impreciso. Esta imprecisão foi desaparecendo com a aplicação das teorias de Pauli (1924) e Dirac (1926). As teorias de Heisenberg até Dirac, são conhecidas como “Mecânica Quântica Moderna”. Esquemáticamente, temos:

MQ	MQA	teoria dos quanta de Planck teoria atômica de Bohr dualismo de De Broglie
	MQM	mecânica das matrizes de Hiesenberg mecânica ondulatória de Schöndiger teoria do Spin de Pauli teoria da energia positiva e negativa de Dirac

Juntamente com estes físicos e químicos, representantes da MQ, figura outro grande número de cientista que, experimentalmente, deram confirmação a cada uma destas teorias, assim como aplicaram teoricamente a muitos fenômenos Físicos-Químicos[2-3].

Primeiramente estaremos considerando a visão matemática, que a mecânica quântica possui com uma linguagem acessível para estudantes de ciências e assim uma breve discussão da MQA (Planck→ de Broglie) e MQM (Pauli→ Dirac). tratando historicamente os fatos ocorridos e descrevendo alguns passos tomados pelos pesquisadores da MQ, explanando o formalismo matemático.

1.2 O FORMALISMO MATEMÁTICO DA MECÂNICA QUÂNTICA

Na mecânica quântica a forma de se estabelecer relações numéricas e representação física de eventos são de modelos não convencionais como o de costureiro da física e química. Às vezes tendo tratamento até filosófico de problemas.

OPERADORES : em muitos processos matemáticos um elemento tem que se submeter a um conjunto de operações quase sempre complicadas, mas que se repetem muitas vezes, a fim de aplicar a outros elementos diferentes para correlacioná-los. O conjunto de operações e transformações métricas são representadas por símbolos (\hat{A} , ∇^2 , \square , Ψ) que se denominam operadores de transformação. Este conjunto de operações de transformação pode ser representado também por uma matriz, a qual tem propriedades intrínsecas da teoria de matrizes. Veja abaixo a representação de operadores e matrizes respectivamente.

$$\psi' = \hat{A}\psi \quad [1]$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad [2]$$

Estes operadores são denotados usando letras com acento circunflexo, como por exemplo \hat{O} . Existe em princípio, um operador para cada informação que se deseja sobre o sistema, sendo os mais importantes os operadores que fornecem a energia, chamados de operadores Hamiltonianos que são denotados pelo símbolo H . Os operadores, por serem ordens ou instruções matemáticas, devem ser aplicadas pela direita nas funções desejadas por exemplo a função de onda Ψ ou usando a chamada representação de Dirac $|\Psi\rangle$. Se $\hat{O} = d/dx$, ou seja a ordem matemática é “derive com relação a x”, e $\Psi = f(x)$, podemos ver claramente que $\hat{O}|\Psi\rangle$ ($df(x)/dx$) não é o mesmo que $|\Psi\rangle\hat{O}$, ou $f(x)d/dx$ [4]. Como em alguns

casos é necessário trabalhar com combinações lineares de funções de onda, os operadores também devem ser lineares, i.e.:

$$\hat{O}(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle) = \hat{O}|\Psi_1\rangle + \hat{O}|\Psi_2\rangle \quad [3]$$

Quando aplicamos o operador na função de onda pode acontecer dois eventos. No caso mais simples a operação sobre Ψ fornece a própria função Ψ multiplicada por uma constante a , ou seja:

$$\hat{O}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle \quad [4]$$

Neste caso a função de onda Ψ é dita ser autofunção do operador \hat{O} com autovalor a . O outovalor obtido corresponde à propriedade que se deseja medir, de forma que, quando se fizer uma medição desta propriedade em um conjunto de sistemas idênticos, sempre será obtido o mesmo valor a . Mas é óbvio que as medições realizadas usando os operadores devem fornecer valores reais e não números complexos. Apresentando esta condição o operador é dito Hermitiano, o que matematicamente corresponde a expressão:

$$\langle\Psi_i|\hat{O}|\Psi_j\rangle = (\langle\Psi_j|\hat{O}|\Psi_i\rangle)^* \quad [5]$$

A equação [5] garante que se $\hat{O}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ e que $\hat{O}|\Psi^*\rangle = a^*|\Psi^*\rangle$, então $a = a^*$, o que só acontece se a for um número real, ou seja, se não contiver o número i na sua expressão.

O segundo tipo de resultado que pode ser esperado quando se aplica um operador em uma função de onda é que a função de onda seja alterada pelo operador, como mostrado na equação 6:

$$\hat{O}|\Psi_1\rangle = b|\Psi_2\rangle \quad [6]$$

Agora a função não é autofunção do operador, e o valor b corresponde a uma única medição da probabilidade desejada em um só sistema dentro de um universo de sistemas idênticos. Neste caso, cada vez que se fizer a medição experimental da propriedade seria obtida uma resposta diferente, sendo portanto necessário calcular o valor médio das medições, também chamado de valor esperado, $\langle b \rangle$, para ter um resultado confiável da medição. O valor médio é calculado exatamente como se calculam os valores médios em estatística:

$$\langle b \rangle = \frac{\langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad [7]$$

O principal problema agora é definir matematicamente os operadores e as funções de onda. Os

operadores são obtidos através dos comutadores dos operadores.

Se tivermos uma função de onda descrita por

$$\Psi = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(xp_x - Et)} \quad [8]$$

que pode ser aplicada a descrever qualquer partícula de massa m e velocidade V_x que apresente comportamento ondulatório, sendo portanto uma equação geral e não só referente ao fóton. Agora utilizando-se dum operador para derivá-la em relação à x , e considerando que a energia E e o momento P_x da partícula associada à onda são constantes, temos:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{2\pi i p_x}{h} \Psi \quad [9]$$

rearranjando temos:

$$-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi \quad [10]$$

analisando a equação [10] vemos que a função de onda Ψ é uma autofunção do operador $-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$ com autovalor p_x , ou seja, que o operador extrai o valor de momento da função de onda $-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$. Isto significa que, para obter operadores podemos escrever a expressão clássica da quantidade que nos interessa, e substituir os termos referentes a componente em x do momento, p_x , por

$-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$. Por analogia, para as componentes em y e z a

substituição deve ser por $-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial y}$ e $-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z}$

respectivamente. Já onde existem coordenadas (x,y,z) ou tempo (t) não é necessário fazer nenhuma modificação para converter a expressão em um operador. Esta metodologia pode ser expressada em forma de tabela.

Tabela 1: substituições para a construção de operadores.

Termo na expressão clássica	Termo no operador	Símbolo do operador
X	X	\hat{X}
Y	Y	\hat{Y}
Z	Z	\hat{Z}
P_x	$-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$	\hat{p}_x
P_y	$-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial y}$	\hat{p}_y
P_z	$-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z}$	\hat{p}_z
T	t	\hat{t}

Tabela 2: Exemplos do operador Hamiltoniano para o movimento de uma partícula de massa m em diferentes campos de força definidos pela função (operador) potencial V .

		Operador
(a) Partícula livre		$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$
(b) barreira de potencial		$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (x < 0; x > 0)$ $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \quad (0 < x < a)$
(c) Oscilador harmônico		$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} Kx^2$

Tabela 3: Exemplos do operador para átomos e moléculas.[4.A]

	Operador H
(a) Átomos de um elétron	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$
(b) Átomos de muitos elétrons	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{j=1}^n \frac{Ze^2}{r_j} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{r_{ij}}$
(c) moléculas	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_\beta \sum_i \frac{Z_\alpha e^2}{r_{i\alpha}} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_\alpha \sum_{\beta>\alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{r_{\alpha\beta}}$

COMUTADORES: Em 1926, Born, Heisenberg e Jordan apresentaram na *Zeitschrift für Physik* a mecânica quântica, desenvolvida por Born em 1924, e Heisenberg, em 1925, sob o ponto de vista matricial [5]. Nesse trabalho, eles apresentaram as relações de comutações para o momento angular \vec{L} para um sistema de muitas partículas:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= \frac{\hbar}{2\pi i} L_z, \\ [L_z, L_x] &= \frac{\hbar}{2\pi i} L_y, \\ [L_y, L_z] &= \frac{\hbar}{2\pi i} L_x. \end{aligned} \quad (11)$$

Hoje em alguns cursos de MQ, podemos ver que esses comutadores podem ser visto da forma apresentada acima.

Mas qual será a idéia de comutação ?, comutar significa ‘*Realizar diversas funções*’. Imaginemos uma situação na qual temos dois operadores Hermitianos \hat{O} e

\hat{E} que comutam entre si, ou seja $\hat{O}\hat{E} - \hat{E}\hat{O} = \mathbf{0}$ (o comutador também é representado como $[\hat{O}, \hat{E}] = \mathbf{0}$). Suponhamos ainda que existe um conjunto de funções de onda Ψ_i que são autofunções do operador \hat{O} , com autovalores diferentes entre \mathbf{a}_i , i.e., sem degenerescência[♦].

$$\hat{O}|\Psi_i\rangle = a_i|\Psi_i\rangle$$

neste caso qual seria a relação do operador \hat{E} com este conjunto de funções?. Se operarmos pela esquerda com \hat{E} teremos que

$$\hat{E}\hat{O}|\Psi_i\rangle = \hat{E}(a_i|\Psi_i\rangle) = a_i(\hat{E}|\Psi_i\rangle) \quad (12)$$

e pela condição de comutação:

$$\hat{E}\hat{O} = \hat{O}\hat{E} \rightarrow \hat{E}\hat{O}|\Psi_i\rangle = \hat{O}(\hat{E}|\Psi_i\rangle) \quad (13)$$

de (A) e (B) temos que

$$\hat{O}(\hat{E}|\Psi_i\rangle) = a_i(\hat{E}|\Psi_i\rangle) \quad (14)$$

A equação (14) nos mostra explicitamente que $\hat{E}|\Psi_i\rangle$ é uma autofunção do operador \hat{O} , com o autovalor \mathbf{a}_i . Como Ψ_i é a única função com autovalor \mathbf{a}_i , devido ‘a não degenerescência dos sistema, a única forma da equação (14) ser verdadeira é quanto a função $\hat{E}|\Psi_i\rangle$ seja um múltiplo de Ψ_i , i. e.,

$$\hat{E}|\Psi_i\rangle = d_i|\Psi_i\rangle \quad (15)$$

Em outras palavras, a função $|\Psi_i\rangle$ também é autofunção do operador \hat{E} . Este resultado na forma de teoria seria: ‘*Se dois operadores Hermitianos \hat{O} e \hat{E} comutam, então existe um conjunto de funções que são autofunções dos dois operadores*’. Este teorema é extremamente importante pois mostra que as únicas propriedades de um sistema que podemos medir simultaneamente e com precisão são aquelas para as quais a função de onda representando o estado do sistema é a autofunção dos seus respectivos operadores, ou seja, para medir precisa e simultaneamente duas ou mais propriedades de um sistema, seus respectivos operadores devem comutar. De fato, este resultado é uma forma de expressão do Princípio de Incerteza de Heisenberg, pois indica que só é possível conhecer simultaneamente com precisão as propriedades de um sistema cujos operadores comutam. Claramente, de acordo com a formulação mais conhecida deste Princípio, os operadores referentes à posição e ao momento de um elétron em um átomo não comutam.

[♦] Degenerescência: significa os estados excitados que um dado sistema pode apresentar quando colocado sob um campo magnético forte.

OBSERVÁVEIS: As propriedades (E, P, X_i)^{*} que formam um observável têm duas características importantes:

1) Podem excluir-se mutuamente, ou 2) Constituem um conjunto completo, i.e., incluem entre si todos os possíveis resultados da medição do observável (E, P, X_i).

Em MQ, pode-se distinguir dois tipos importantes de relações entre observáveis. Analisemos dois observáveis, q e r são compatíveis se as propriedades (E, P, X_i) de todos os pares (q_i, r_j) – q_i representa qualquer propriedade do observável q , r_j qualquer propriedade de r – forem compatíveis ou de mútua exclusão. Sendo o último caso, o par de propriedades que não correspondem a qualquer situação fisicamente real ou previsível.

No entanto, para que dois observáveis q e s sejam incompatíveis basta que, entre todos os pares de propriedades (q_i, s_j) exista um que seja incompatível.

Um exemplo de incompatibilidade é o momento linear (P) e a posição (x_i). A energia de uma partícula livre (energia cinética) e a sua quantidade de movimento são também observáveis compatíveis. Neste caso, os pares de propriedades formados por uma propriedade de cada um destes observáveis ou são compatíveis ou excluem mutuamente; a exclusão mútua aplica-se a situações fisicamente absurdas, por exemplo quando, uma das propriedades for nula e a outra diferente de zero porque a energia cinética e a quantidade de movimento estão relacionadas entre si através de uma dependência funcional, $K = p^2/(2m)$. [6]

VALOR ESPERADO: se considerarmos, uma partícula e onda associada, a função $\Psi_{(r,t)}$ e se essa função não se anula num intervalo entre r e $r + dr$, na medida de sua posição há uma probabilidade finita dessa partícula ser encontrada. Não podemos, atribuir a coordenada um valor bem definido, no entanto, é possível especificarmos uma posição média da partícula.

Imaginemos a medida da posição da partícula no instante t , a probabilidade de encontrá-la entre r e $r + dr$ é dada pela equação.

$$P_{(r,t)} = \Psi^*_{(r,t)}\Psi_{(r,t)} \quad (16)$$

onde $P_{(r,t)}$ é a probabilidade de encontramos a partícula. Repetindo essa experiência a uma certa frequência no mesmo instante e registrando os valores de $P_{(r,t)}$, podemos usar a média dos valores observados para caracterizar a posição da partícula no instante t .

Este valor é representado por $\langle r \rangle$, valor esperado da coordenada r . Veja abaixo como podemos demonstrar matematicamente este cálculo.

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} r P_{(r,t)} dr \quad (17)$$

$$\text{como: } P_{(r,t)} = \Psi^*_{(r,t)}\Psi_{(r,t)},$$

substituímos (16) em (17) temos que:

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} r \Psi^*_{(r,t)}\Psi_{(r,t)} dr \quad (18)$$

FLUXO DE PROBABILIDADE

A probabilidade de encontramos uma partícula numa certa posição x e num tempo t é dado por

$$P_{(r,t)} = \Psi^*_{(r,t)}\Psi_{(r,t)}$$

Sendo o fluxo qualquer grandeza que varia o tempo.

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = \frac{\partial}{\partial t} [\Psi_{(x,t)}\Psi^*_{(x,t)}] \quad (19)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = \Psi^*_{(x,t)} \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) + \Psi_{(x,t)} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}(x,t) \quad (20)$$

$$\text{como: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{(x)}\Psi_{(x,t)} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

consideramos que ela esteja livre de $V(x)$.

Parte real:

$$\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (21)$$

Parte imaginária:

$$\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \quad (22)$$

Substituindo (21) e (22) em (20)

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = \Psi^*_{(x,t)} \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \Psi_{(x,t)} \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*_{(x,t)} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi_{(x,t)} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right]$$

$$S_{(x,t)} = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^*_{(x,t)} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right] \quad (23)$$

Sendo S o fluxo de probabilidade [7]

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = -\frac{\partial S}{\partial x}(x,t) \text{ ou}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial S}{\partial x}(x,t) = 0 \quad (24)$$

Sendo esta a equação da continuidade.

* E= energia, P= momento, e X₁= posição.

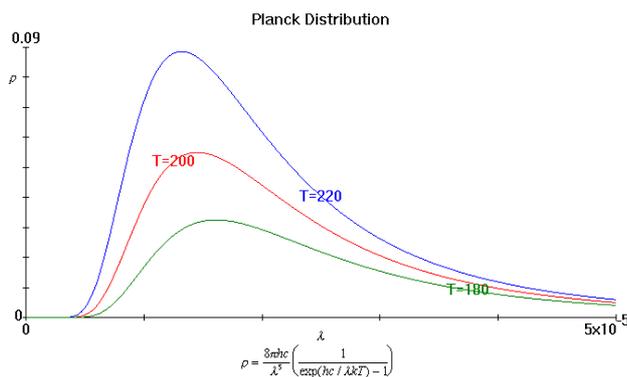
2 MECÂNICA QUÂNTICA ANTIGA

2.1 MAX PLANCK: A RADIAÇÃO TÉRMICA

No dia 14 de Dezembro de 1900, numa reunião da Sociedade Alemã de Física, Max Planck (1858-1947) apresenta seu artigo *Sobre a Teoria da Lei de Distribuição de Energia no Espectro Normal* que veio a merecer pouca atenção, mas onde já se introduzia sua constante h . Tal artigo se ocupava basicamente de relacionar o comportamento dos elétrons nas paredes do corpo negro* com a radiação eletromagnética na cavidade. Uma das preocupações básicas de Planck era mostrar que a distribuição da energia em função da temperatura que se mostrava em conflito com a teoria clássica poderia ser explicada se assumisse que a energia radiante não é emitida continuamente por um corpo aquecido, mas apenas em parcelas discretas ou quanta de valor hf com dimensão de energia *versus* tempo.

Max Planck postulou que os átomos da parede da cavidade radiante funcionavam como osciladores eletromagnéticos com frequência característica de radiação e que emitem e absorvem a energia eletromagnética da cavidade. A partir da situação de contorno do domínio que analisava, Planck foi levado a fazer duas hipóteses:

- 1) A energia dos osciladores eletromagnéticos satisfaz a relação $E = nhf$, Sendo: $n = n^\circ$ quântico principal do elemento constituído da parede, $h =$ constante de Planck = $6,629 \times 10^{-34}$ Js e $f =$ a frequência do oscilador
- 2) Os osciladores apenas irradiam quanta ao mudarem de um seus estados estacionários para outro.



Figura#: Figura gerada no Software Chemical principles, onde a variável T pode ser dimensionada, mostrando a distribuição de Planck.

Fundamentando-se nestas hipóteses Planck deduziu sua lei teórica de radiação[8-9-10]

* Corpo negro é um corpo que absorve toda a radiação incidente sobre ele, i.e., ele não é capaz de refletir a radiação incidente

$$U_f = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{f^3}{e^{(hf/kt)} - 1} \quad (2.1-1)$$

partindo-se da segunda hipótese apresentada, se os osciladores obedecem ao princípio da equipartição de energia, seu conjunto de também pode ser tratado como um sistema termodinâmico, obedecendo em particular ao princípio da entropia segundo a definição de Boltzmann

$$S = k \cdot \log W \quad (2.1-2)$$

determinando a probabilidade do estado considerado aqui (a distribuição por n osciladores de uma energia total U). Se cada oscilador recebe uma quantidade de energia ΔU , digamos uma *quantidade discreta* para facilitar o cálculo segundo esquema de Boltzmann, ou seja, vamos supor que $U = m \Delta U$ admitindo pois que a energia total U se distribui por m quantidades de energia ΔU . Por outro lado representamos por u a energia média dos osciladores de frequência f . De fato teremos

$$n = \frac{U}{u} \text{ e } m = \frac{U}{\Delta U} \quad (2.1-3)$$

afinal, o que pretendemos calcular é a energia média dos osciladores n_T em função da temperatura. Então, utilizando-se do formalismo matemático de Boltzmann, podemos retomar de acordo com a teoria clássica, deveremos ver o que sucede quando admitimos que ΔU pode ser tão pequeno quando se quiser, ou seja, deveremos procurar o valor de u quando se faz tender ΔU para o limite de zero. Possuindo a fórmula de Boltzmann podemos dizer que a distribuição das m pequenas porções de energia ΔU pelos n osciladores tem uma probabilidade[10.A] W dada por

$$W = \frac{(n+m)!}{n!m!} \quad (2.1-4)$$

de acordo com a fórmula de Stirling* temos $\log N! = N(\log N - 1)$. Podemos escrever

$$\begin{aligned} \log W &= \log(n+m)! - \log n! - \log m! \\ &= (n+m)[\log(n+m) - 1] - n(\log n - 1) - m(\log m - 1) \\ &= (n+m) \log(n+m) - n \log n - m \log m \\ &= n \left[\left(1 + \frac{m}{n}\right) \log\left(1 + \frac{m}{n}\right) - \frac{m}{n} \log \frac{m}{n} \right] \end{aligned} \quad (2.1-5)$$

mas, dados os valores de m e n podemos agora escrever

* fórmula bem conhecida da análise combinatória

$$\log W = n \left[\left(1 + \frac{U}{n\Delta U}\right) \log \left(1 + \frac{U}{n\Delta U}\right) - \frac{U}{n\Delta U} \log \frac{U}{n\Delta U} \right] \quad (2.1-6)$$

sendo que a energia de um sistema pode-se escrever $dU = Tds$ [10.A, 10.B] e pela lei de Boltzmann temos $S = k \log W$ vem $dU = kT d(\log W)$ donde se tira

$$\frac{1}{kT} = \frac{d}{dU} (\log W) \quad (2.1-7)$$

como conhecemos a expressão de $\log W$ em função da energia U (2.1-6), podemos escrever, fazendo $\frac{U}{n\Delta U} = A$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{kT} &= \frac{d}{dU} (\log W) \\ &= n \left[(1+A) \frac{1}{1+A} + \frac{1}{n\Delta U} \log(1+A) - \frac{1}{n\Delta U} \log A - A \frac{1}{A} \right] \\ &= n \left[1 + \frac{1}{1+A} \log(1+A) - \frac{1}{n\Delta U} \log A - 1 \right] \\ &= \frac{1}{\Delta U} [\log(1+A) - \log A] \end{aligned}$$

disto podemos deduzir que

$$e^{\frac{\Delta U}{kT}} = (1+A) : A \quad (2.1-8)$$

explanando a energia média u em função da temperatura T .

$$u = U : n \text{ e } A = \frac{U}{n\Delta U}$$

completando a expressão (2.1-8)

$$e^{\frac{\Delta U}{kT}} = \left(1 + \frac{u}{\Delta U}\right) : \frac{u}{\Delta U} = \frac{\Delta U}{u} + 1$$

ou melhor

$$u = \frac{\Delta U}{\frac{\Delta U}{kT} - 1} \quad (2.1-9)$$

agora com observamos oportunamente, temos de introduzir neste cálculo a condiçã de ΔU pode ser tão pequeno quanto se queira, i.e., temos de calcular

$$\lim_{\Delta U \rightarrow 0} u$$

mas, se fizermos, $\Delta U = 0$, na expressão (2.1-9), obteremos a forma indeterminada $\frac{0}{0}$. Podemos

“levantar” esta (pela regra de l’Hôpital) substituindo os dois termos da fração pelas respectivas derivadas (em relação a ΔU), escrevendo

$$\lim_{\Delta U \rightarrow 0} u = \lim_{\Delta U \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{d\Delta U} (\Delta U)}{\frac{d}{d\Delta U} (e^{\frac{\Delta U}{kT}} - 1)} = \frac{1}{\frac{1}{kT}} = kT$$

obtemos afinal o valor admitido por Rayleigh como mera aplicação do princípio da equipartição da energia. A fórmula estabelecida por este autor não está de acordo com os resultados experimentais. Foi então que Planck, em 1900, emitiu ousadamente a hipótese de que as quantidades de energia muito pequenas, definidas apenas para tirar partido da teoria de Boltzmann, deviam ser conservadas na fórmula (2.1-9), embora por razões incompreensíveis, que ele reportou a uma limitação ou indeterminação de ordem probabilística, recusando-se a aceitar uma realidade física mais profunda. Mais de 10 anos depois, em 1911, numa conferência, Planck ainda afirmava: “...para a probabilidade termodinâmica existem certas regiões elementares absolutamente determinadas – e é assim que eu gostaria de resumir o conteúdo próprio do que chamam *hipótese dos quanta*...cuja a significação profunda devemos procurar”. Explicitando a dificuldade que a hipótese dos quanta enfrentou e isto mesmo já depois da sua feliz transposição or Einstein à explicação das particularidades do efeito fotoelétrico.

Contudo, verifica-se uma concordância perfeita da fórmula de Planck com as curvas experimentais quando o “quantum” ΔU tinha o valor $\Delta U = hf$, em que f é a frequência da radiação e h a constante de Planck ($h = 6,624 \times 10^{-34}$ Joules x segundos) [10.B]. tem-se então, agora inteiramente de acordo com a experiência, a fórmula de Planck

$$u = \frac{hf}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1} \quad (2.1-10)$$

A constante de Planck domina os cálculos da Física Atômica desde o século passado a este atual, mas sua grandeza não pode ser explicada. Como outras constantes universais, como por exemplo a velocidade da luz para o qual ainda não se sabe encontrar explicação. O imenso alcance da teoria do *quanta* de Planck só se tornou perceptível quando, em 1905, Einstein, um dos poucos contemporâneos de Planck a dar-lhe importância, aplicou a noção de *quantum* para explicar novas realidades [10.C-10.D].

2.2 O ÁTOMO DE BOHR (1885-1962)

Segundo a teoria clássica do eletromagnetismo, de James Clerk Maxwell, físico escocês, uma carga

elétrica em movimento acelerado emite energia na forma de ondas eletromagnéticas. O elétron em movimento circular estaria sujeito à aceleração centrípeta e iria emitir energia até cair no núcleo. O sistema atômico entraria em colapso e a matéria estaria comprometida na sua estrutura básica, assim havia uma contradição no modelo atômico de Rutherford porque, isso na verdade não ocorre.

Após o modelo nuclear de Rutherford ter sido proposto, Niels Bohr (1913) propôs uma série de postulados, que romperam a excelência da teoria clássica, explicavam a estrutura espectral e evitavam o problema da estabilidade. Neste período formulou de forma mais precisa a teoria quântica do átomo; assimilou que os princípios quânticos eram irracionais do ponto de vista da mecânica clássica. Estabeleceu no chamado *princípio da correspondência* as circunstâncias em que deveriam concordar a mecânica clássica e as novas teorias[11].

Bohr propôs que:

1 Os elétrons se deslocam em órbitas selecionadas pela exigência de que o momento angular seja um múltiplo de $h/2\pi$, i.e., para órbitas circulares de raio r , a velocidade v do elétron tem que ser dada por

$$mvr = \frac{nh}{2\pi}$$

E que, além disso, os elétrons nessas órbitas não irradiam, apesar de sua aceleração. Dizia-se que eles estavam em estados estacionários.

2 os elétrons podem efetuar transições descontínuas de uma órbita permitida para outra e a variação de energia, $E-E'$, aparecerá como radiação de frequência

$$\nu = \frac{E - E'}{h}$$

Um átomo pode absorver radiação por meio da transição dos seus elétrons para uma órbita de energia mais alta.

As consequências destes postulados são deduzidas muito facilmente para átomos de um elétron como o hidrogênio, o hélio uma vez ionizado, e assim por diante, desde que se trate com órbitas circulares.

Analisando os postulados de Bohr, o primeiro postulado do modelo atômico expressa a existência do núcleo atômico e ele pode concluir que, como as órbitas são circulares em torno do núcleo fixo, o elétron está sobre a ação de uma força centrípeta. Que além disso, estaria também sobre a ação de uma força elétrica que são iguais em módulo; $F_c = F_e$, onde F_e é a força elétrica coulombiana de interação entre as cargas, pela relação:

$$F_e = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2.2-1)$$

onde e é a carga do elétron, Z o número atômico e r a distância entre as cargas. E a força centrífuga que age sobre a partícula é dado pela equação:

$$F_c = \frac{mv^2}{r} \quad (2.2-2)$$

onde m é a massa da partícula, v , velocidade desta e r o raio da órbita. E para que o elétron se mantenha estável em sua órbita é necessário que a força eletrostática entre o elétron e o núcleo seja exatamente equilibrada pela força centrífuga, devido ao movimento circular:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (2.2-3)$$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = mv^2 \quad (2.2-4)$$

Bohr postulou que o momento angular, mvr , é

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

onde h é a constante de Planck e n é denominado número de Bohr. O momento angular deve ser igual um múltiplo inteiro de $h/2\pi$, o qual substituído na eq (2.2-4) temos que

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{Ze^2 \pi m} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.2-5)$$

o seguinte postulado dizia respeito a emissão de radiação eletromagnética de um elétron, que se move inicialmente sobre uma órbita, tendo energia E_i e transita descontínuamente para uma dada órbita inicial sendo E_f a energia da órbita final. A energia total da partícula é dada pela equação $E = K + V$, onde V é a energia potencial da partícula e K é a sua energia cinética. A energia potencial é dada por

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.2-6)$$

ela é negativa porque a força coulombiana é atrativa. A energia cinética do elétron K , pode ser calculada a partir da equação:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.2-7)$$

se considerarmos a equação (2.2-4) e isolamos a velocidade e quadrarmos temos que

$$v^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 rm} \quad (2.2-8)$$

depois substituímos em (2.2-7) obtemos

$$K = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (2.2-9)$$

comparando (2.2-9) e (2.2-6),

$$E = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

e utilizando-se de (2.2-5) em valor de r temos a energia

$$E = -\frac{Z^2 e^4 m}{8\epsilon^2_0 h^2 n^2} \quad (2.2-10)$$

desta forma pode-se calcular a energia de ligação do átomo de hidrogênio a partir dessa equação[11.A].

O sucesso da teoria de Bohr com átomos hidrogenóides deu grande ímpeto a que se efetuasse pesquisa adicional sobre o “átomo de Bohr”. Apesar de alguns sucessos extraordinários, conseguidos por Bohr e outros, estava claro que a teoria era provisória.[12]

3 MECÂNICA QUÂNTICA MODERNA

PRINCÍPIO DE INCERTEZA DE HEISENBERG

Com a nova maneira de pensar o elétron ora como onda, ora como partícula revolucionava todas as concepções de modelos então existentes. O que foi decisiva a contribuição de W. Heisenberg (1901-1976), que, em 1927, apresentou na *Zeitschrift für Physik*, o qual propôs, depois de ler Heidegger, uma modelo baseado na *incerteza de se localizar*,[5] ao mesmo tempo, a posição e a velocidade de um elétron em um átomo, passando do conceito de *órbita definida* para o conceito probabilístico de orbital[10]. Segundo este trabalho a posição (x) e a velocidade (v) de um elétron, de massa m , em uma órbita atômica não pode ser medidas simultaneamente. Esse princípio é hoje traduzido pela expressão:

$$\Delta x \Delta(mv) \geq h$$

$$\Delta x \Delta p \geq h$$

O estado do sistema é descrito por uma função de onda, em termos da qual pode ser calculada a probabilidade da partícula ser encontrada em alguma região do espaço, ou então com velocidade (ou momento) dentro de uma certa faixa. Essa função de onda tem uma

amplitude maior nas regiões do espaço onde é mais provável encontrar a partícula. Segundo Bohr, as medidas de posição e momento são excludentes, e satisfazem ao princípio da complementaridade[13]. O Princípio de Incerteza pode ser facilmente demonstrado, se tratar-mos uma partícula em movimento com uma onda associada,

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} \quad (3.1)$$

No caso em que esta partícula esteja deslocando-se livre e colocando-se um anteparo perpendicular a sua trajetória, a onda difrata-se.

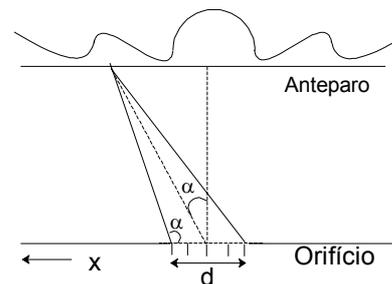


Figura 3.1: difração da onda associada a uma partícula em movimento

A metade da onda sobre o anteparo está sob um ângulo α , definido por:

$$\text{sen } \alpha = \frac{\lambda}{d} \quad (3.2)$$

A componente da velocidade no eixo x admite os valores compreendidos entre, $-v \text{sen } \alpha$ e $+v \text{sen } \alpha$, introduzindo assim uma incerteza no momento Δp da partícula, segundo o eixo x .

$$\Delta p = 2p \text{ sen } \alpha = \frac{2p\lambda}{d} \quad (3.3)$$

como

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.4)$$

$$\Delta p = \frac{2h}{d} \quad (3.5)$$

onde d é a incerteza relativa à coordenada x e encontraremos

$$\Delta p = \frac{2h}{\Delta x} \quad (3.6)$$

ou

$$\Delta p \cdot \Delta x = 2h \quad (3.7)$$

Quanto maior for a incerteza de Δx ou Δp , maior será o produto $\Delta x \Delta p$, e então

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq h \quad (3.8)$$

Esta expressão mostra que quanto maior for a precisão na determinação da posição Δx , maior será a incerteza do momento Δp [14].

4 DUALISMO DE DE BROGLIE

Depois da apresentação dos modelos de órbitas elípticas por Sommerfeld e Pauli. Bohr e Einstein tinham consciência da fragilidade do modelo. Era necessário buscar novas saídas. A mecânica quântica oferecia excelente instrumento matemático que implicava uma revisão profunda do conceito básico de causalidade e determinismo em física. O primeiro cientista a dar um passo revolucionário nesse sentido foi um aristocrata francês, príncipe Louis de Broglie (1892-1986). Sua hipótese sobre o dualismo da matéria, que todo o movimento de um corpo está associado a uma onda, assim como a luz comporta-se como onda-partícula abriu um novo caminho para se pensar o elétron: a *onda-partícula* [5-15].

Para colocar sua hipótese em forma matemática, De Broglie expressou o comprimento de onda λ de uma partícula em função de sua quantidade de movimento (momento): $P = mv$.

Sabemos da relatividade, que a relação massa-energia vale $E = mc^2$ e, portanto, a massa associada a um fóton, cuja velocidade é da luz, c , vale $m = P/c^2$, então:

$$P = mc = \frac{E}{c^2} c \therefore P = \frac{E}{c} \quad \text{com} \quad E = h\nu$$

Obtém-se

$$P = \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \rightarrow P = \frac{h}{\lambda}$$

Esta expressão relaciona uma grandeza característica de onda (λ) com uma característica de partícula (P).

Segundo as idéias clássicas de Newton, uma onda era uma perturbação se propagando, e uma partícula, um objeto material localizável. Todavia, fótons e elétrons não são entidades clássicas não se devendo aplicar-lhes tais idéias. Um fóton não é nem uma onda nem uma partícula; é uma entidade que tem as características de onda e de partícula [16].

Depois do conhecimento de De Broglie, foi desenvolvida por vários físicos notáveis, como

Heisenberg, Schrödinger, Born, Pauli e Dirac, que elaboraram a Mecânica Quântica [17].

5 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Em 1926, o físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) publicou quatro trabalhos nos *Annales de Physique Leipzig*, [5] nos quais desenvolveu a sua famosa Mecânica Quântica Ondulatória, cujo resultado principal é a equação para as órbitas estacionárias dos elétrons atômicos, a igualmente famosa equação de Schrödinger:

$$\nabla^2 \Psi_{(x,y,z)} + \frac{\hbar^2}{2m} [E - V_{(x,y,z)}] \Psi_{(x,y,z)} = 0$$

em relação ao trabalho de Bohr, o trabalho de Schrödinger foi bem mais completo. Uma vez que prevê também o seguinte:

- *As autofunções são correspondentes a cada autovalor.*
- *Prevê o cálculo da probabilidade de um determinado estado.*
- *Prevê o cálculo da probabilidade de transição de um estado para outro.*
- *Calcula os momentos angulares orbitais.*

Podemos aplicar a equação de Schrödinger para calcularmos o átomo de ^1H temos que resolvermos um problema de dois corpos. Neste caso, podemos reduzir o sistema de dois corpos a um sistema de um corpo, considerando a massa reduzida do sistema:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (5.1)$$

- Historicamente foi o primeiro sistema que Schrödinger tratou, onde os autovalores de energia são os mesmos que previstos por Bohr.

O caráter tridimensional trás alguma dificuldade no tratamento matemático, se consideramos o sistema de coordenadas cartesiano.

No átomo de ^1H o núcleo é massivo e o elétron tem massa reduzida μ dada pela eq. (5.1) De tal maneira que gira em torno do núcleo estacionário.

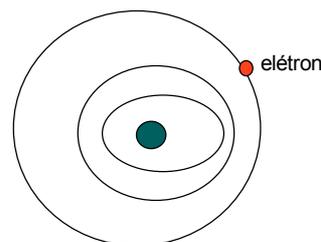


Figura 1: representação do átomo de hidrogênio

O potencial de interação (coulombiano) do elétron com o próton é dado pela relação

$$V_{(x,y,z)} = -\frac{Z.e^2}{4\pi\epsilon_0(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \quad (5.2)$$

Onde e^- = carga do elétron, Z = carga do núcleo (para o ^1H , $Z = 1$)

A eq. De Shroedinger dependente do tempo para este sistema é a seguinte relação, conforme mostrado abaixo:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{x^2} + \frac{\partial^2}{y^2} + \frac{\partial^2}{z^2} \right] \Psi_{(x,y,z,t)} + V_{(x,y,z)} \Psi_{(x,y,z,t)} = i\hbar \frac{\partial \Psi_{(x,y,z,t)}}{\partial t} \quad (5.3)$$

)

ou numa notação mais compacta: onde se consideramos o operador laplaciano

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{x^2} + \frac{\partial^2}{y^2} + \frac{\partial^2}{z^2} \quad (5.4)$$

Assim a eq. de Shroedinger pode ser reescrita assim:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi + V\Psi = i\hbar \partial \Psi / \partial t \quad (5.5)$$

Cuja solução é dada:

$$\Psi_{(x,y,z,t)} = \varphi_{(x,y,z)} e^{-iEt/\hbar} \quad (5.6)$$

Onde $\varphi_{(x,y,z)}$ é a função onda independente do tempo dada pela resolução da eq. De Shroedinger independente do tempo a seguir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi_{(x,y,z)} + V_{(x,y,z)} \Psi_{(x,y,z)} = E\Psi_{(x,y,z)} \quad (5.8)$$

ou

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{x^2} + \frac{\partial^2}{y^2} + \frac{\partial^2}{z^2} \right] \Psi_{(x,y,z)} + V_{(x,y,z)} \Psi_{(x,y,z)} = E\Psi_{(x,y,z)} \quad (5.9)$$

E o laplaciano em coord. Esféricas é dado assim:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad [5.12]$$

A eq. De Schroedinger em coordenadas esféricas fica assim após aplicarmos o operador laplaciano esférico: Eq. (5.8)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi_{(r,\theta,\phi)} + V_{(r,\theta,\phi)} \Psi_{(r,\theta,\phi)} = E\Psi_{(r,\theta,\phi)} \quad [5.13]$$

- Para resolvermos a eq. Acima é melhor escreve-la em coordenadas esféricas e usar o método de separação de variáveis

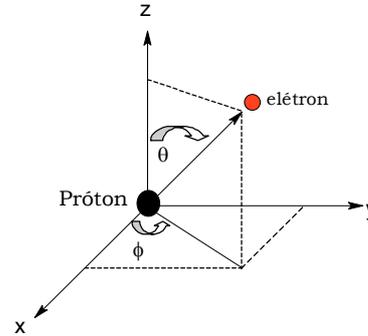


Figura 2: representação da interação coulômbiana entre o próton e o elétron, aplicando as notações de coordenadas esféricas para resolver a equação de Schrödinger.

Onde r é o raio vetor posição do elétron

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (5.10)$$

θ é o ângulo polar, o qual cresce a partir do eixo z para o plano xy

$$\theta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (5.11)$$

e ϕ é o ângulo azimutal, o qual cresce de x para y .

$$\phi = \arctg \frac{y}{x}$$

$$\text{onde temos } \begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

Nota importante: Podemos escrever a função de onda $\Psi_{(r,\theta,\phi)}$ Como um produto de três funções tal que

1. A primeira $R(r)$ dependência em r (radial afastamento do elétron)
2. A segunda $\Theta(\theta)$ dependência em θ (mostra a posição polar do elétron)
3. A outra função $\Phi(\varphi)$ mede a posição azimutal do elétron na sua trajetória

A eq. (5.13) pode ser reescrita (veja notação da derivada e o que deriva parte constante fica fora da derivada)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1\Theta\Phi}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{1R\Phi}{r^2 \sin\theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{1R\Theta}{r^2 \sin^2\theta} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \right] + V_{(r,\theta,\phi)} R\Theta\Phi = ER\Theta\Phi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1\Theta\Phi}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{1R\Phi}{r^2 \sin\theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{1R\Theta}{r^2 \sin^2\theta} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \right] + V(r) R\Theta\Phi = ER\Theta\Phi \quad [5.13-A]$$

Substituindo o potencial $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ e dividindo por $R\Theta\Phi$ a eq. (5.13) fica :

$$\left[\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2$$

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \text{ (constante)} \quad [5.14]$$

$$\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = -m^2 \text{ (constante)} \quad [5.15]$$

Multiplicando por $r^2 \sin^2\theta$ todos os membros fica

$$\left[\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = 0$$

Ou

$$\left[\frac{r^2 \sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{r^2 \sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) + \frac{r^2 \sin^2\theta}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = 0$$

Isolando os termos em φ (passando ao segundo membro)

$$\left[\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$$

Note : do lado Direito a eq. Depende só de φ e do lado esquerdo a dependência é em θ e r

Como temos uma igualdade a constante de separação ($-m^2$) deve ser a mesma para ambas as equações.

$$\left[\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \text{ (constante)} \quad (5.14) \\ \left[\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dR}{dr}) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}) = -m^2 \text{ (constante)} \quad (5.15) \end{array} \right\}$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \quad \text{ou} \quad \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2 = 0 \quad \text{cujas raízes } \lambda = \pm im$$

logo a solução é $\Phi(\varphi) = Ne^{\pm im\varphi}$ (5.16)

que é a solução particular, sendo m número quântico magnético

$\Phi(\varphi)$ é a função onda átomo de ^1H que contém toda a dependência em função do Potencial φ . Onde φ varia de 0 a 2π

Normalizando a função $\Phi(\varphi)$

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Phi \rangle &= 1 \\ \langle \Phi | \Phi \rangle &= \int_0^{2\pi} N^* e^{im\varphi} N e^{-im\varphi} d\varphi = 1 \\ \langle \Phi | \Phi \rangle &= N^2 \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} e^{-im\varphi} d\varphi = 1 \quad (5.17) \end{aligned}$$

$$\text{ou } N^2 [2\pi] = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\text{logo a função vale } \Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (5.18)$$

como $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow$ ela é única

$$e^{im\varphi} = e^{im\varphi} e^{im2\pi} \Rightarrow 1 = e^{2\pi im} \Rightarrow 1 = \cos 2\pi m + i \text{sen} 2\pi m$$

veja que satisfaz se $m = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \dots$ $m =$ inteiro (número quântico magnético)

escolhe a solução $\lambda = im$ (movimento de giro elétron sentido horário).

Assim temos até o momento

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} R(r) \Phi(\varphi) \quad (5.19)$$

Tomando a eq. (5.15) veja la atrás

$$\left[\frac{\text{sen}^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\text{sen}^2 \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \text{sen}^2 \theta \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -m^2$$

Dividindo por $\text{sen}^2 \theta$ fica

$$\left[\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} \quad (5.16)$$

Separando os termos da $R(r)$ da função $\Theta(\theta)$ fica

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} - \frac{1}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \quad (5.17)$$

devido a igualdade a constante de separação é a mesma

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} - \frac{1}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \quad (18)$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = l(l+1) \quad (5.19)$$

Ou

$$-\frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} - \frac{1}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \quad (5.20)$$

Divide a (5.19) por r^2 e arrumando fica

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R = l(l+1)R$$

ou

$$(5.21)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2\mu^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) + l(l+1) \right] R = 0$$

Esta é a eq. Radial – cujas soluções são as funções de Laguerre

Apresentaremos a solução que é:

Solução particular:

$$R_n(r) = -\left(\frac{2}{na}\right)^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^l L_{n+1}^{2l+1}(\xi) \quad (5.22)$$

$$\text{Sendo } L_{n+1}^{2l+1}(\xi) = \left\{ \frac{(n-l-1)!}{[2n(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} \cdot \sum_{p=0}^{n-l-1} (-1)^{p+1} \frac{[(n+l)!]^2 \xi^p}{(n-l-1-p)!(2l+1+p)! p!}$$

$$\text{Com } \xi = \frac{2r}{na}$$

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ m &= l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned}$$

$$\text{Se } n=1 \quad l=0 \quad R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} 2e^{-r/a}$$

Veja que se $n=2 \quad l=1$ temos dois $l=0$ e $l=1$ Nota $a = \frac{\hbar^2}{mq^2}$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a}$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} \frac{r}{a\sqrt{3}} e^{-r/2a}$$

A outra equação :

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{me^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0$$

A solução desta equação são as funções associadas de Legendre. Os harmônicos esféricos – são soluções das equações diferenciais: $\Phi(\varphi) \cdot \Theta(\theta)$ representadas por

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left[\frac{2l+1(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^m(\theta) e^{im\varphi}$$

$$\text{onde} \quad P_l^m(\theta) = \sin^{|m|} \theta \frac{d^{|m|} P_l(\xi)}{d(\cos \theta)^{|m|}}$$

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l [(\xi^2 - 1)^l]}{d\xi^l}$$

$$\text{onde} \quad \xi = \cos \theta$$

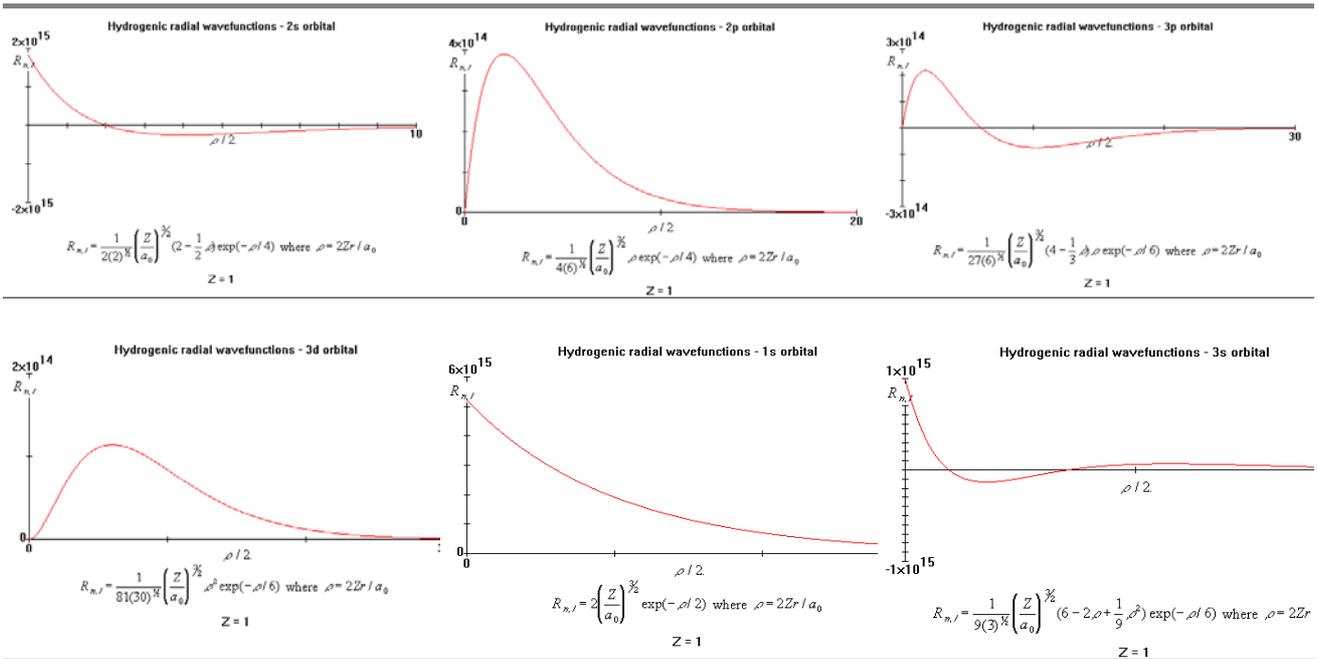
A solução geral para o átomo de Hidrogênio é : $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) e^{-(i/\hbar)Et}$

Que pode ser escrita assim:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = -\left(\frac{2}{na}\right)^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) \left\{ \frac{(n-l-1)!}{2n[n+l]!} \right\}^{1/2} \sum_{p=0}^{n-l-1} (-1)^{p+1} \frac{[(n+l)!]^2 \xi^p}{(n-l-1-p)!(2l+1+p)! p!} Y_{lm}(\theta, \varphi) e^{-(i/\hbar)E_n t}$$

$$\text{Com} \quad \xi = \frac{2r}{na}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ número quântico principal
 $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ número quântico de momento angular
 $m = l, l-1, \dots, -l-1, l$ número quântico magnético



NÚMEROS QUÂNTICOS

Cada conjunto de n, l, m define uma função de onda – que é um estado eletrônico do átomo.

- $n = 1$ camada k
- $n = 2$ camada l
- $n = 3$ camada m
- $n = 4$ camada n
- $n = 5$ camada o

As funções de onda de cada camada são chamadas de orbitais.

- a) para cada valor de n , há $n-1$ valor de l
- $n = 1$ $l = 0$
 - $n = 2$ $l = 1$
 - $n = 3$ $l = 2$

n define o estado de energia

- b) para cada valor de l há $(2l+1)$ valor de m . $-l < m < l$

$l = 0$ $m = 0$

$l = 1$ $\begin{cases} m = -1 \\ m = 0 \\ m = 1 \end{cases}$

- c) para cada valor de n há n^2 autofunções. Exemplo, se $n = 3$, há 9 autofunções

$l = 2$ $-l < m < l$ $\begin{cases} m = -2 \\ m = -1 \\ m = 0 \\ m = 1 \\ m = 2 \end{cases}$

$l = 1$ $-l < m < l$ $\begin{cases} m = -1 \\ m = 0 \\ m = 1 \end{cases}$

$l = 0$ $m = 0$

concluindo, quando resolvemos a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, obtemos as energias para os níveis energéticos (E_n) e os orbitais atômicos ($\Psi_{n,l,m}$). Temos então um diagrama de níveis energéticos no interior do átomo, i. e., dizemos que um átomo se constitui de um sistema energético quantizado.

Foi no Annales 80, que Schrödinger estudou o efeito Stark através de sua Mecânica Quântica Ondulatória[5].

6 FUNÇÃO DE ONDA NA CONCEPÇÃO DE MAX BORN

Born (1928) deu um passo a esta dificuldade propondo uma interpretação estatística das funções de ondas do elétron, à qual, devido às inúmeras vantagens apresentadas, tem sido amplamente aceita. Born supôs

que as ondas não têm existência real, e assim, as define como ondas de probabilidade.

O produto $\Psi\Psi^*$ ou $|\Psi|^2$ em um ponto representa a probabilidade de encontrar o elétron, ou um outro corpúsculo qualquer, em um ponto x, y, z , num dado instante t e igualdade

$$|\Psi|^2 dx dy dz = |\Psi|^2 dv$$

representando a probabilidade de encontrar o mesmo elétron em um elemento de volume dv , e também o número de elétrons dentro do mesmo volume. Esta interpretação teve um pleno acordo com as condições de Schrödinger[2].

Em processos vibratórios o conhecimento da amplitude é importante como o conhecimento da frequência própria; analogamente, é de se esperar que, em mecânica ondulatória, esteja ligado um importante significado físico à função de onda Ψ ou antes, ao quadrado do seu módulo, visto ser evidente que o valor instantâneo da própria função oscilatória não pode desempenhar qualquer papel em virtude da sua alta frequência. O motivo por que se toma o quadrado do módulo é que a própria função de onda (devido ao coeficiente imaginário da derivada em ordem ao tempo da equação diferencial) é uma quantidade complexa, enquanto as grandezas suscetíveis de interpretação física devem evidentemente ser reais.[13]

Suponhamos que no estado caracterizado pela função de onda Ψ_1 se efetua uma medição que conduz com certeza a um determinado resultado, e que o mesmo fazendo o estado no estado Ψ_2 , conduz ao resultado 2. Admite-se então a combinação linear de Ψ_1 e Ψ_2 , o que significa que toda função de forma $C\Psi_1 + C\Psi_2$ (C_1 e C_2 , constantes) representa um estado em que a mesma medição pode dar um resultado 1 ou o resultado 2. Podendo afirmar, que se conhecemos a dependência dos estados com respeito ao tempo, dependência a qual é dada pela função $\Psi_1(x,t)$ e em outro, por $\Psi_2(x,t)$, pode-se notar que qualquer combinação linear destas dá também a possível dependência de um estado do tempo. Estas afirmações constituem o conteúdo do princípio de superposição dos estados – um princípio positivo fundamental de mecânica quântica[19].

7 POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA DA FUNÇÃO DE ONDA

- I) A todo sistema corresponde uma função de onda $\Psi(x,t)$.
- II) A seguinte correspondência existe entre as variáveis dinâmicas e os seguintes:

Variáveis	Operadores
x, y, z, t	x, y, z, t
$F(x,t)$	$F(x,t)$

$P_x, P_y, \text{ ou } P_z$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \text{ ou } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
E	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$

III) $\Psi(x,t)$ (onde x representa x, y, z) e suas derivadas primeiras, devem ser finitas e unívocas.

IV) $\Psi(x,t)$ deve ser normalizada*, isto é.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{(x,t)} \Psi_{(x,t)} dv = 1$$

$$dv = dx dy dz$$

ou simplesmente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dv = 1$$

ou mais simplesmente

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

V) A cada observável corresponde um operador \hat{A} . O valor médio $\langle \hat{A} \rangle$ ou valor esperado deste operador é definido como.

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dv$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* A \Psi dv$$

ou

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$$

porém, se Ψ não for normalizada, então $\langle A \rangle$ é definido como[20]

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi^* | A | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

* quando tem-se uma função = 1, a probabilidade é 100% de encontrar a partícula em uma faixa, isso significa que esta função está normalizada.

8 PRINCÍPIO DE PAULI MQ

Wolfgang Pauli, nasceu em Viena a 25 de Abril de 1900. Físico Austríaco, foi assistente de Niels Bohr. No campo da física quântica propôs o *princípio de exclusão* que propiciou novo avanço teórica à explicação estatística do átomo.

O princípio de Pauli afirma que, num átomo, não pode haver mais de um elétron por estado. Assim existem apenas dois estados, de número quântico $n = 1$: são os estados de energia de ionização máxima. Logo, há no máximo dois elétrons[20.A] nessa camada, a “camada K”. Pode-se ter apenas oito elétrons na camada $n = 2$ (ou camada L) etc. Se o átomo contém mais de dez elétrons, a terceira camada deve ser ocupada. É o princípio de Pauli que dá a explicação da *Classificação Periódica de Medelejev*.

O princípio de Pauli, é um postulado que admitimos por causa das suas conseqüência, por exemplo, a impenetrabilidade dos átomos, logo da matéria pela matéria. Como diz Feynman[21], cada vez que apoiamos a mão numa mesa e experimentamos sua resistência, verificamos o princípio de exclusão de Pauli[12].

Um exemplo típico deste princípio é de considerarmos as forças inter-iônicas que atuam em um cristal de NaCl. Existe uma força entre os íons que tende a separá-los, e sua origem provem do princípio da exclusão. Com efeito, se dois átomos se aproximam, suas camadas eletrônicas se misturam, mas como dois elétrons não podem ocupar o mesmo nível, as camadas se comprimem, aumentando assim a energia cinética dos elétrons, devido ao confinamento[23].

A Sommerfeld (1868-1951) e W. Pauli (1900-1951) prestaram contribuição ao modelo, o que lhes valeu o Prêmio Nobel de Física em 1922.

9 TEORIA DE DIRAC (1902- 1984)

Um dos maiores físicos do mundo. Seu nome era Paul Adrien Maurice Dirac. Em 1927, Dirac apresentou um trabalho da famosa **Teoria Quântica da Emissão e Absorção da Radiação**, na qual considerou a função de onda de Schrödinger Ψ como operadores. Com esse procedimento, conhecido mais tarde como **segunda quantização** ou **Quantum Electrodynamics – QED**, Dirac demonstrou que a interação eletromagnética era mediada pelo **quantum de luz** (fóton). Além do mais, ao considerar esses fótons como obedecendo à estatística de Bose-Einstein (1924), obteve os famosos coeficientes A_{mn} e B_{mn} de Einstein (1916-1917). Dirac publicou: em 1942, publicou um artigo no *Proceedings of the Royal Society*, o qual tentou eliminar os paradoxos físicos resultantes de fótons de energia negativa introduzindo uma métrica indefinida no **espaço de Hilbert**. *Principles of quantum Mechanics*.

10 ELETRODINÂMICA QUÂNTICA RICHARD PHILLIPS FEYNMAN

Tudo em Feynman era original e surpreendente. Um espetáculo de Físico, sabia arrombar cofres, violar segredos militares e tocar bongô. Ele encarava a ciência como diversão – Dick, como ele preferia tinha pouco mais de 20 anos quando foi convidado a entrar no time de feras encarregado de produzir a bomba atômica. O ano era de 1942, e Feynman já era doutor pela Universidade de Princeton, nos Estados Unidos, onde o Projeto Manhattan de construção da bomba, começou a nascer. Em pouco tempo, viria a ser um dos principais líderes teóricos da empreitada. Foi ele quem concebeu a equação que prevê a quantidade de energia liberada por uma explosão nuclear. O seu destaque como físico foi de ser um dos autores da Eletrodinâmica Quântica, que descreve as interações da radiação com a matéria. O que diferenciou Feynman de seus colegas co-autores da teoria da Eletrodinâmica Quântica era a intuição. Ele fugia da visão ortodoxa da física, segundo o qual o comportamento de um elétron, por exemplo, deve obedecer as regras rígidas. Para ele, o elétron faz o que bem entende, podendo viajar no espaço de todas as maneiras possíveis. “Pode até voltar no tempo” admitia[22].

BIBLIOGRAFIA:

- [1] COELHO, J. V. Mecânica Quântica (2000), In: 100 Anos de Mecânica Quântica, Departamento de Física, UFMT.
- [2] REY, A. B. Mecânica Quântica e Ondulatória, In: Física/Química Modernas. V. 3, SP, Ed. Fortaleza, 1970
- [3] BATHISTA, A. L. B. S., NOGUEIRA, J. S. Uma Breve Discussão da Mecânica Quântica *IX Encontro de Iniciação Científica*, Cuiabá, UFMT. 2001.
- [4] FIGUEROA VILLAR, J. D. Aspectos Quânticos da Ressonância Magnética Nuclear In: Fundamentos e Aplicações da Ressonância Magnética Nuclear. Ed: AUREMN, Rio de Janeiro, 2000.
- [4.A] ALMEIDA, W. B., SANTOS,
- [5] BASSALO, J. M. F. Nascimentos da Física (1901-1950), Belém: EDUFPA, 2000. 503 p.
- [6] TEIXEIRA DIAS, J. J. C. Química Quântica fundamentos e métodos. 1982. Ed. Fundação Calouste gulbenkian. 448 p.
- [7] MILLOMEN, W. C. C. Notas de Aula, 2001. Departamento de Física – Universidade Federal de Mato Grosso.
- [8] BAHIANA, M. Radiação de Corpo Negro. Instituto de Física/UFRJ

- [9] EISBERG, R. RESNICK, R. Física Quântica, Ed. Campus, Rio de Janeiro, **1979**. 15ª Edição.
- [10] GIBERT, A. Origens Históricas da Física Moderna, introdução abreviada. Ed Fundação Calouste Gulbenkian. 448 p.
- [10.A] PLANCK, M. Sobre a lei de Distribuição de Energia no Espectro Normal. (2000) *Rev. Brasil. de Ens. de Fís.* 22, 4, p. 538-542.
- [10.B] Priante, N. F. **Termodinâmica**. Notas de Aulas. Departamento de Física, UFMT. 2000
- [10.B] SEARS, F. W. Termodinâmica, Teoria Cinética e Termodinâmica Estatística. 1979, Ed. Guanabara Koogan, Rio de Janeiro.
- [10.C] CHASSOT, A. Ciência através dos tempos, São Paulo: Moderna, (coleção polêmica), 191p. **1994**.
- [10.D] BASSALO, J. M. F. Ver. Brasi. Do Ens. de Fís., vol. 21, 2, junho, 1999
- [11] FÍSICA DO MUNDO ATUAL, V.2, São Paulo: Honor Editorial, 264 p. **1972**
- [11.A] BATHISTA, A. L. B. S., NOGUEIRA, J. S. Da Physis à Física, O Livro Contexto Sobre a essência da matéria: O Átomo. *IX Encontro de Iniciação Científica*, Cuiabá, UFMT. 2001.
- [12] GUINIER, A. Os elementos de base dos modelos estruturais, In: *Estrutura da Matéria: do céu azul ao material plástico*. São Paulo, SP. EdUSP, 328 p. **1996**
- [13] BORN, M., Física Atômica, **1962**, 4ª Edição. Ed: Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa.
- [14] COELHO, J. V. Mecânica Quântica, Cuiabá: EdUFMT, 215 p. 1993.
- [15] MILLOMEN, W. C. Born e a Teoria Quântica (**2000**), In: 100 anos de Mecânica Quântica, Departamento de Física, UFMT
- [16] De Broglie, L. *Recherches sur la théorie des quanta*. 1963, Paris: Masson et C^{ie} editores. 128p. Réédition du text de **1924**
- [17] RAMALHO, NICOLAU, IVAN E TOLEDO. Os Fundamentos da Física, São Paulo: Moderna, 2ª Edição. V.3, 466p. **1979**
- [18] equação de schroedinger
- [19] LANDAU, L. LIFSHITZ, E. Mecânica Quântica, Teoria não relativista, **1985**. Mir, Moscou. Vol.1.
- [20] PEIXOTO, E. M. A. *Química Nova*, **1978**.
- [20.A] IVANOV, B. Classification des solides. Métaux et dielétriques, In: *Physique Nouvelle*. Moscou: MIR. 288p.
- [21] Físico americano, prêmio Nobel de 1965, autor de um livro muito conhecido de física elementar, *Lectures on Physics*.
- [22] GÊNIOS DA CIÊNCIA DO SÉCULO XX, In: Super interessante especial. **1998**, Ed. Abril.
- [23] Feynman, R. P. Fenômenos no Estado Sólido (1989), Rio de Janeiro: CBPF, 215 p.
- [24]
- [25]
- [26]
- [27]