

## NOTAS DE AULA – PARTE II

Romis Ribeiro de Faissol Attux e Cristiano Cordeiro Cruz

## Capítulo 4 – Propriedades Ondulatórias da Matéria

No capítulo 3, estudamos fenômenos cuja explicação dependeu essencialmente de uma análise do caráter “corpúscular” da radiação eletromagnética: fomos então introduzidos à noção de dualidade. Uma questão natural pode emergir: tal dualidade é exclusiva da radiação?

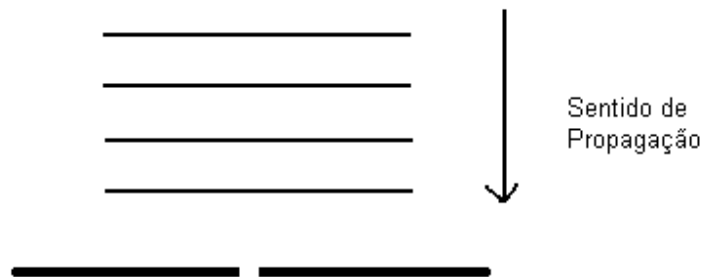
Na realidade, com alguma ousadia, não seria difícil questionar: se, como vimos, a luz pode exibir um caráter de “partícula”, não poderá, por outro lado, a matéria exibir um caráter de “onda”? Classicamente, vemos a radiação como sendo composta por ondas e a matéria como formada por “bolinhas” em número imenso. Como lidar, do ponto de vista conceitual, com a dualidade em ambas as frentes? Parte da resposta já foi dada no capítulo 3, e não sem produzir uma revolução. A outra parte da questão seria a gota d’água que firmaria de vez os alicerces da nova física e prepararia o terreno para os trabalhos magistrais de Heisenberg e Schrödinger.

Antes, porém, de penetrarmos nesse novo mundo, convém revisar brevemente alguns tópicos relacionados à teoria ondulatória clássica.

### 4.1 – Revisão de Ondas Clássicas

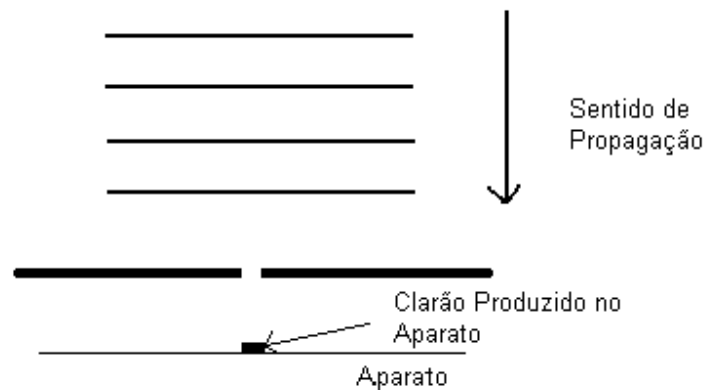
Como já tivemos a oportunidade de discutir em mais de uma ocasião, ondas eletromagnéticas estão ligadas a campos elétricos e magnéticos oscilantes. Trata-se de uma decorrência imediata das equações de Maxwell, a qual recebeu significativo suporte experimental através das experiências de Hertz.

Particularmente, serão de muito interesse para nós as interpretações ondulatórias de dois fenômenos: a interferência e a difração. Suponha que uma onda plana (formada por frentes de onda planas), incida sobre um aparato composto por uma única fenda, como na Fig. 4.1.



**Figura 4.1**

Poderíamos esperar que a luz fosse produzir um simples clarão “concentrado”, como mostrado na Fig. 4.2.



**Figura 4.2**

No entanto, não é necessariamente um comportamento desse tipo que a teoria ondulatória prevê. A ocorrência de um fenômeno denominado *difração* eventualmente produz um padrão muito mais complexo: de fato, é possível que surjam máximos e mínimos de luminosidade no aparato. Em termos simples, o fenômeno é tão mais “sensível” quanto menor for a fenda. Um resultado útil é que, para que se observem os máximos e mínimos, faz-se necessário usar uma fenda com abertura da ordem do comprimento de onda da luz.

Um resultado que ajuda a explicar a difração é o *princípio de Huygens*, que afirma que cada parte da fenda age como uma fonte de ondas. Assim, a luz proveniente de uma parte da fenda pode interferir com a luz proveniente de outra parte, o que termina por gerar um padrão de alternância entre zonas claras e escuras. Sob esse enfoque, completamente ligado à idéia ondulatória da luz, é possível buscar uma análise quantitativa das características do padrão exibido no aparato.

Caso dividamos a fenda em duas partes iguais, verificamos que podemos explicar o primeiro mínimo do padrão através da hipótese de que as ondas produzidas pelas fontes de Huygens de uma das metades da fenda sofrem interferência destrutiva com as produzidas pelas fontes da outra metade. Para que haja esse tipo de interferência, é necessário que haja uma defasagem de 180 graus entre as ondas, o que ocorre caso a onda produzida por uma das fontes percorra uma distância  $\lambda/2$  maior que aquela percorrida pela onda produzida por sua “contraparte”. A partir de uma análise geométrica, mostra-se que o primeiro mínimo obedece à expressão:

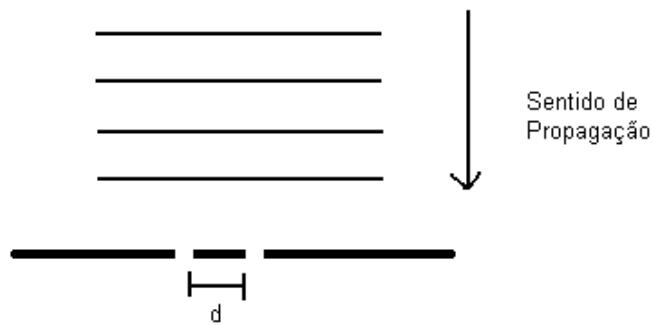
$$\text{sen}(\theta) = (\lambda/a) \quad (4.1)$$

sendo  $a$  a abertura da fenda. Analogamente, dividindo a fenda em  $2n$  partes, obtemos a equação para o  $n$ ésimo mínimo de intensidade (lembre-se de que lidamos com interferência destrutiva):

$$\text{sen}(\theta) = (n\lambda/a), \quad n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (4.2)$$

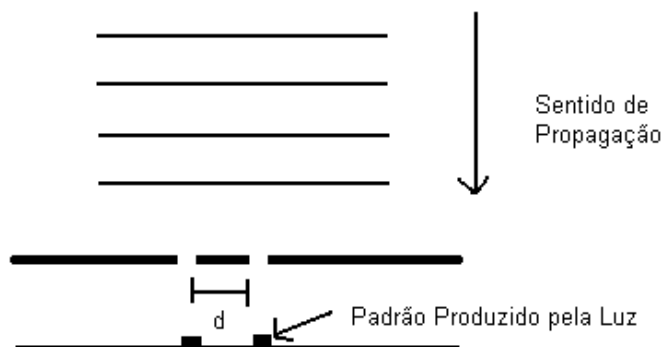
Destacamos que, se interpretássemos a luz como um feixe de “partículas clássicas”, não teríamos como fugir de um padrão idêntico ao da Fig. 4.2.

Estudemos agora um fenômeno correlato: a interferência provocada por uma fenda dupla. A Fig. 4.3 traz o aparato envolvido.



**Figura 4.3**

Novamente, poderíamos ser tentados a acreditar que o padrão observado seria:



**Figura 4.4**

No entanto, se luz de um comprimento de onda apropriado for utilizada, surgirá mais uma vez um padrão de máximos e mínimos de luminosidade. Os máximos obedecerão à seguinte fórmula geral:

$$d \cdot \sin(\theta) = m \cdot \lambda, \text{ com } m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (4.3)$$

enquanto os mínimos serão descritos por:

$$d \cdot \sin(\theta) = (m + 1/2) \cdot \lambda, \text{ com } m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (4.4)$$

A chave para obter (4.3) e (4.4) à luz do princípio de Huygens é forçar que a distância percorrida por ondas provenientes de uma das fendas seja maior que a distância percorrida por ondas vindas da outra por uma quantidade de comprimentos de onda adequada à produção de interferência construtiva (equação (4.3)) ou destrutiva (equação (4.4)). Novamente, trata-se de um fenômeno essencialmente ondulatório. Thomas Young, em 1801, realizou o experimento da dupla fenda [Halliday e Resnick, 1994] e foi capaz de explicar satisfatoriamente os resultados obtidos e de determinar com satisfatória precisão o comprimento de onda da luz por ele utilizada.

Nesta seção, procuramos abordar de maneira simples dois fenômenos clássicos cujo entendimento se dá, via de regra, a partir de conceitos inerentes à teoria ondulatória. Nada haveria de surpreendente no capítulo se, nas próximas páginas, desfilassem ante os olhos do leitor as bem-conhecidas equações de uma onda eletromagnética. Entretanto, eis que falaremos de partículas como o elétron.

## **4.2 – A Proposta de de Broglie e os Experimentos de Davisson-Germer, Thomson e de Dupla Fenda**

### **4.2.1 – A Proposta de Broglie**

Dentre os trabalhos ligados à hipótese quântica surgidos após o artigo de Einstein sobre o fóton, destacamos o de Louis Victor de Broglie. Após servir na I Guerra Mundial, esse físico francês juntou-se a seu irmão Maurice, que chefiava um laboratório de física em que se estudavam assuntos como efeito fotoelétrico e espectroscopia.

Uma temática dessa natureza colocou de Broglie em contato íntimo com os então recentes questionamentos acerca da natureza da radiação eletromagnética. Desse fato surgiram, por exemplo, alguns trabalhos importantes sobre o fóton. No entanto, a consagração definitiva viria em 1923, quando, movido pela intuição, de Broglie sugeriu que não só a radiação, mas também a matéria, devia ter um caráter dual. Em 1963, escreveu a respeito: “Após longa reflexão em isolamento, ocorreu-me repentinamente a idéia, durante o ano de 1923, de que a descoberta feita por Einstein em 1905 (o caráter dual da radiação) devia ser generalizada e estendida a todas as partículas, particularmente aos elétrons” [Pais, 1995]. Basicamente, de Broglie atribuiu aos elétrons (e às demais partículas) uma “onda fictícia associada” [Pais, 1995] dotada, naturalmente, de comprimento de onda e frequência. Com isso, emergia a visão de uma partícula como onda, interpretação de imensa ousadia e simplicidade<sup>1</sup>. De Broglie completava a idéia com um comentário da maior agudeza: uma corrente de elétrons que atravessasse uma abertura de pequena dimensão (em relação ao comprimento de onda associado ao elétron) “deve sofrer fenômenos de difração”.

As idéias de de Broglie estavam incluídas em sua tese de doutoramento, defendida em 25 de novembro de 1924. Uma declaração do autor nos ajuda a entender o quão revolucionária foi sua proposta e, além disso, ressalta o grande apoio de Einstein à nova concepção: “Quando, em 1923, escrevi o texto da tese de doutoramento que queria apresentar para obter o *Doctorat ès Sciences*, mandei fazer três cópias. Entreguei uma destas ao sr. Langevin para que ele decidisse se o texto escrito podia ser aceito como uma tese. Langevin, provavelmente um pouco perplexo pela novidade de minhas idéias, pediu-me que lhe fornecesse uma segunda cópia datilografada da tese para enviá-la a Einstein. Foi então que Einstein declarou, após a leitura, que minhas idéias pareciam muito interessantes, o que levou Langevin a decidir aceitar meu trabalho.” Essa carta está em [Pais, 1997].

Vemos que o apoio de um cientista renomado como Einstein foi importante para que a nova idéia fosse levada em conta. Einstein, inclusive, não tardou a aplicar as idéias de de Broglie ao estudo de outros fenômenos, o que o coloca mais perto ainda da nova

---

<sup>1</sup> Entenderemos melhor o caráter dessa onda ao longo deste e do próximo capítulo.

concepção. Como comenta Pais, o físico alemão, além de um dos pais da Física Quântica, foi “o único padrinho da mecânica ondulatória” [Pais, 1995].

Passemos então à formalização da proposta de de Broglie. Ele propôs que, a uma partícula com momento linear  $p$ , fosse associada uma onda com comprimento de onda igual a:

$$\lambda = h/p \quad (4.5)$$

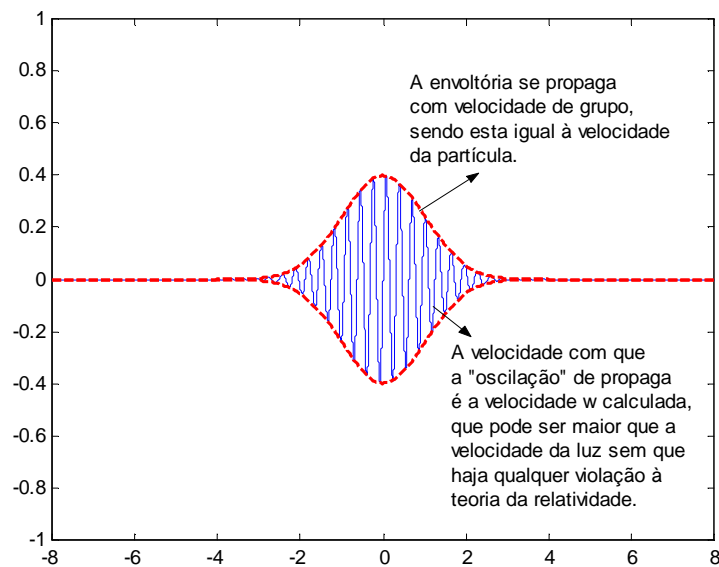
sendo  $h$  a constante de Planck. Trata-se de uma expressão idêntica à por nós obtida quando analisamos o modelo do fóton. A frequência dessas ondas, por sua vez, deveria ser igual a:

$$f = E/h \quad (4.6)$$

sendo  $E$  a energia relativística total. Observe que a velocidade  $w = \lambda f$  desta onda vale:

$$w = \lambda f = \frac{E}{p} = \frac{\sqrt{c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2}}{p} = c \sqrt{1 + \left(\frac{m_0 c}{p}\right)^2} > c \quad (4.7)$$

À primeira vista, isso nos causa estranheza, uma vez que, segundo a relatividade, um ente com massa de repouso não-nula é incapaz de atingir uma velocidade igual à da luz. Aparentemente, somos levados a concluir que a onda associada à partícula é mais rápida que a própria partícula! Trata-se, não obstante, de uma impressão infiel à teoria ondulatória. É razoável assumir que a onda associada deva ser dotada de um aspecto de “pacote”, uma espécie de “grupo de ondas” concentrado na região em que se localiza a partícula. Se adotássemos apenas uma dimensão espacial (eixo  $x$ ), poderíamos conceber algo como o que mostramos na Fig. 4.5.



**Figura 4.5**

Se analisarmos uma onda como a mostrada na Fig. 4.8, descobriremos que a velocidade de propagação da envoltória (velocidade de grupo) é que será igual à velocidade  $v$  da partícula. Isso pode ser demonstrado a partir de (4.5) e (4.6), e é, ademais, bastante intuitivo. A relação entre  $w$  e  $v$  é simples [Born, 1986]:

$$w = c^2/v \quad (4.8)$$

Vale destacar que  $f$ ,  $\lambda$  e  $w$  estão diretamente ligados à parte oscilante de uma onda como a mostrada na Fig. 4.5.

De (4.5), percebemos que o comprimento de onda de de Broglie depende da constante de Planck, que sabemos ter um valor muito baixo. Assim, partículas macroscópicas (bolas de bilhar ou de futebol, por exemplo), terão usualmente um comprimento de onda “infinitesimal”, o que mostra por que não são para nós intuitivas as propriedades ondulatórias da matéria. No entanto, no domínio atômico e sub-atômico, é possível pôr à prova as idéias de de Broglie. Foi isso que fizeram, entre outros, Davisson, Germer e Thomson, cujos experimentos analisaremos a seguir.

#### 4.2.2 - Experimentos

Clinton Joseph Davisson e Lester Germer trabalhavam nos famosos Laboratórios Bell quando, em 1926, conduziram a experiência que forneceu os primeiros resultados experimentais favoráveis à idéia de de Broglie. Basicamente, eles estudaram o espalhamento de elétrons que incidiam sobre um cristal de níquel com a ajuda de um aparato como o mostrado na Fig. 4.6.

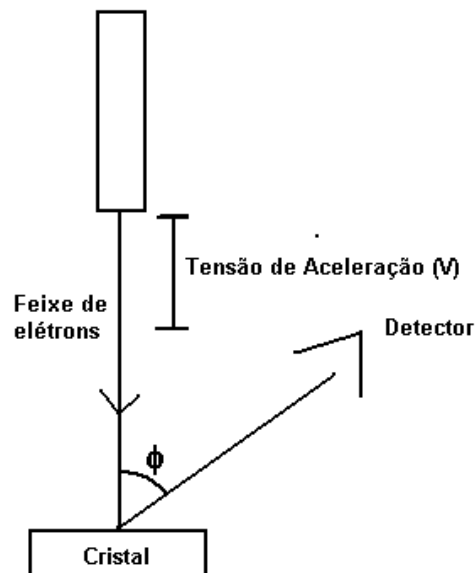


Figura 4.6

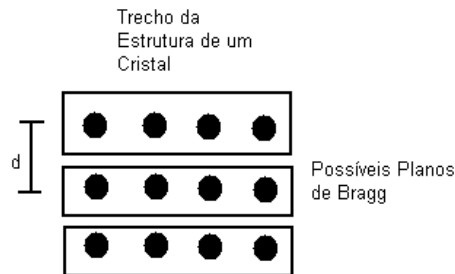
Não foi à toa que os cientistas usaram um cristal. Cristais são compostos por um arranjo reticular extremamente ordenado de átomos, o que lhes permite, em tese, fazer o papel de

uma *grade de difração* composta por inúmeras “fendas”, como as que estudamos na seção 4.1. Estruturas desse tipo já haviam sido usadas por Max van Laue em experimentos relacionados à determinação da natureza eletromagnética dos raios-X, e, posteriormente, coube a William e Lawrence Bragg, pai e filho, investigá-las de maneira mais sistemática<sup>2</sup>.

Do trabalho dos Bragg surgiu um resultado muito importante, a saber, a *condição de Bragg* para interferência construtiva. Tal condição relaciona a distância  $d$  entre sucessivos *planos de Bragg*, o comprimento de onda e o ângulo  $\theta$  (relativo ao plano) para o qual se verifica o máximo de intensidade [Ohanian, 1995]. Essa relação é:

$$2.d.\text{sen}(\theta) = n.\lambda, \text{ sendo } n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (4.9)$$

sendo  $\theta = 90^\circ - \phi/2$ . O plano de Bragg consiste de um conjunto (planar) de átomos com a mesma distribuição espacial. Um exemplo trivial pode ser:



**Figura 4.7**

O ponto de partida de Davisson e Germer era verificar se a relação de Bragg poderia também valer para elétrons. E, de fato, através do aparato da Fig. 4.6, eles notaram que a intensidade do feixe espalhado apresentava um primeiro máximo que obedecia à equação (4.9). O comprimento de onda calculado a partir do padrão de interferência detectado levou-os a um valor muito próximo do que se esperava de (4.5). Tratava-se de uma evidência enorme em favor do caráter ondulatório da matéria, pois, como vimos na seção 4.1, esse tipo de característica não encontra fundamento na noção de partícula.

É importante destacar que o padrão é respeitado mesmo se incidir na rede um elétron por vez<sup>3</sup> [Ohanian, 1995]. Não há, portanto, mais sentido na pergunta: por qual fenda da rede cristalina passou o elétron? Essa é uma indagação que faria sentido apenas para partículas clássicas!

Em 1927, George Paget Thomson apresentou uma segunda confirmação da hipótese de de Broglie. Para tanto, ele dirigiu um feixe de elétrons com energia cinética de 15 keV contra uma fina folha de metal. Nesse caso, o alvo não era uma única rede cristalina, mas um conjunto de redes dispostas aleatoriamente. Assim, havia sempre uma boa chance de que houvesse alguma rede orientada adequadamente de forma a produzir um padrão de difração. Os padrões por ele obtidos foram absolutamente similares aos obtidos a partir da

<sup>2</sup> Max von Laue, um dos primeiros entusiastas da teoria da relatividade, recebeu o prêmio Nobel de Física em 1914. Os Bragg foram premiados em 1915.

<sup>3</sup> Nesse caso, diversas incidências individuais terminariam por delinear o velho padrão de máximos e mínimos.

difração de raios-X, o que reafirmou o caráter ondulatório do feixe de elétrons. Davisson e Thomson dividiram o prêmio Nobel de Física de 1937. Curiosamente, George Thomson era filho do grande J. J. Thomson, o que produziu uma curiosa afirmação: Thomson pai ganhou o Nobel por mostrar que o elétron é uma partícula, e o filho, por mostrar que ele é uma onda [Halliday e Resnick, 1994].

Houve ainda mais um trabalho que destacaremos. Claus Jönsson, em 1961, acelerou um feixe de elétrons com a ajuda de uma tensão de 50kV e fez com eles incidissem sobre uma fenda dupla com largura de 500 nm e separação de 2000nm [Krane, 1983]. O padrão de interferência fotografado pelo cientista foi bastante similar ao padrão estudado por nós na seção 4.1, o que, mais uma vez, deu suporte à hipótese ondulatória.

Experimentos como os que descrevemos acima deixaram pouca dúvida acerca da “existência” de um caráter ondulatório da matéria. Assim como a radiação, a matéria apresentava um comportamento dual, marcado pela exibição separada de facetas de onda e de corpúsculo, de acordo com o experimental utilizado. Teremos mais a dizer sobre as implicações filosóficas disso na seção 4.4.

### 4.3 – O Princípio da Incerteza

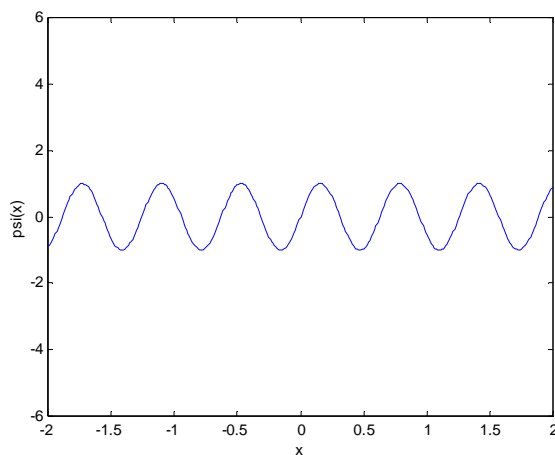
Werner Heisenberg tem seu nome associado a um dos mais conhecidos resultados da física quântica: *o princípio da incerteza*. O motivo pelo qual esse princípio se tornou parte corriqueira de muitas das modernas discussões sobre filosofia da ciência e teoria do conhecimento é que ele expressa uma restrição inexorável ao conhecimento que podemos extrair da análise de um fenômeno.

Estamos acostumados a pensar nas limitações de nosso conhecimento como decorrentes apenas de impossibilidades práticas idealmente suplantáveis. Por exemplo, sabemos que seria praticamente impossível medir o momento linear e a velocidade de todas as moléculas de um gás num certo instante. Que instrumentos poderiam ser usados? Quanto tempo levaria? Enfim, há uma série de barreiras.

No entanto, são barreiras que podem ser suplantadas num experimento mental. Em princípio, nada impede que essas variáveis possam ser conhecidas, embora seja impossível medi-las com os equipamentos que concebemos hoje. Qualquer astrônomo do século XIX, por exemplo, jamais duvidaria de sua capacidade de medir o momento e a posição de um planeta ao mesmo tempo, e dificilmente poderíamos questionar a nossa capacidade de medir o momento e a posição de um carro em um certo instante. A visão de mundo clássica não impõe limites à nossa possibilidade de conhecer variáveis interrelacionadas, como momento linear e posição. Se essas limitações existem, elas devem antes ser atribuídas à qualidade dos instrumentos, e não à “natureza em si”.

Entretanto, a visão de mundo clássica concebe as partículas como “bolinhas”, ou seja, desconsidera totalmente o caráter ondulatório que, como discutimos, também lhes é próprio. Como vimos na seção anterior, uma partícula pode ter a si associada uma onda como a mostrada na Fig. 4.5. Uma entidade desse tipo recebe usualmente o nome de *pacote de onda*, nome, aliás, bastante natural à luz da figura mostrada.

Sob o manto da dualidade, voltemo-nos agora para uma investigação acerca de nosso conhecimento de ondas clássicas. Imaginemos, em primeiro lugar, uma senóide pura, mostrada na Fig. 4.8. Denominemos a função que descreve a onda  $\psi(x,t)$ , onde  $x$  é a posição e  $t$  é o tempo. Desconsideremos por ora a componente temporal da onda (suposta fixa).



**Figura 4.8**

A onda mostrada está perfeitamente espalhada ao longo do eixo  $x$ . Nenhum valor dessa coordenada, por si só, é capaz de “localizá-la” minimamente, pois ela é “uniforme” ao longo de  $x$ , sem acidentes ou variações de comportamento. Destarte, temos uma incerteza total sobre a posição de uma partícula à qual estivesse, hipoteticamente, associada tal onda. Não obstante, ela tem um comprimento de onda perfeitamente determinado, o que nos permite concluir que seu momento não teria incerteza alguma a ele associada [Krane, 1983].

Imaginemos agora uma onda como a da Fig. 4.5. Nela, não há uniformidade em relação ao eixo  $x$ , ou seja, há uma certa “concentração” em torno de zero. O fato de dizermos “em torno de”, por outro lado, mostra que não há uma certeza completa, mas apenas uma maior que àquela subjacente à Fig. 4.8. Dessa maneira, temos uma incerteza finita acerca da posição da partícula associada. No entanto, não temos mais uma onda “pura”, e sim, uma onda resultante da sobreposição de senóides puras. Com a ajuda da teoria de Fourier, é possível mostrar que, quanto mais concentrado for o pacote, maior será a incerteza associada a seu comprimento de onda. Portanto, na Fig. 4.5, ganhamos algum conhecimento da posição da partícula à custa de uma perda de informação sobre o momento linear a ela associado.

Do que discutimos acima, vem que, quanto maior for a precisão na determinação da posição, menor a precisão no que se refera ao momento, e vice-versa. Não se trata de uma “imprecisão experimental”, mas sim de uma incerteza inerente à própria estrutura ondulatória dos pacotes de onda associados às partículas<sup>4</sup>. Em roupagem matemática, temos<sup>5</sup>:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h \quad (4.10)$$

<sup>4</sup> Por ora, contentar-nos-emos com a imagem de um “pacote de onda”. No próximo capítulo, teremos acesso aos meios necessários para melhor formalizar a descrição do caráter ondulatório de uma partícula.

<sup>5</sup> Há uma outra relação de incerteza importante:  $\Delta E \cdot \Delta t \approx h$ , que relaciona a incerteza sobre uma variação de energia  $\Delta E$  e o tempo demandado na sua medida.

Essa é a expressão clássica do princípio da incerteza para variáveis unidimensionais. Relações semelhantes seriam válidas para as coordenadas  $y$  e  $z$ . Muitas vezes, a expressão (4.10) aparece com um sinal de “maior que” ou com  $h/2\pi$  no segundo membro, o que não consideramos de grande importância neste curso.

A linha de raciocínio que seguimos revela que a relação (4.10) só causa estranheza quando nos atemos à visão clássica de “partícula” como ente dotado de posição e velocidade “bem-definidas”. Num mundo dual, o princípio da incerteza, ironicamente, é lugar-comum. O que (4.10) quer dizer? Basicamente, que há um limite fundamental para a precisão com que podemos conhecer conjuntamente pares de variáveis diretamente relacionados. Quanto maior for o meu conhecimento acerca da posição de uma partícula, obrigatoriamente será menor o meu conhecimento de seu momento linear. O fator de proporcionalidade é a “onipresente” constante de Planck.

A relação de incerteza de Heisenberg não pode ser superada por instrumentos de melhor qualidade ou por avanços tecnológicos: ela é inerente à estrutura física dos fenômenos naturais, segundo o ponto de vista quântico. Em termos filosóficos, a expressão (4.10) significou um abalo enorme na concepção determinística do mundo. Essa concepção é não raro associada ao nome de Pierre Simon, o marquês de Laplace, em grande parte graças a uma célebre obra, *Ensaio Filosófico sobre Probabilidades*. Nela, Laplace menciona, em harmonia com o espírito da época e com a própria estrutura da mecânica clássica, que uma inteligência superior que conhecesse, num certo instante, a situação de todos os seres que compõem a natureza e as leis que a regem seria capaz de determinar todo o passado e todo o futuro do universo. No entanto, essa idéia é logo descartada pelo princípio da incerteza, pois essa inteligência não poderia, do ponto de vista de (4.10), conhecer “a situação de todos os seres”.

Um célebre exemplo da “inevitabilidade do princípio da incerteza” é imaginar como se poderia determinar a posição de um elétron através de um microscópio ótico. Sabemos que a resolução de um microscópio tem a ver com o comprimento de onda da luz utilizada; portanto, quanto menor for o comprimento de onda, menores serão os objetos visíveis com nitidez. Por conseguinte, se quisermos determinar mais precisamente a posição de nosso elétron, seremos forçados a diminuir o comprimento de onda da radiação incidente, o que, por sua vez, se refletirá num aumento da frequência da luz, ou seja, da energia (e o momento) dos fótons. Isso produziria colisões “mais intensas” com o próprio elétron que se deseja observar, o que aumentaria a incerteza sobre o seu momento. Eis o inevitável!

Não há como projetar um aparato que burla (4.10). Qualquer inovação que melhore a precisão da determinação de  $x$  irá necessariamente interferir na precisão sobre o momento linear. Tal fato mostra claramente que, na Física Quântica, não tem lugar a “clara distinção” entre o objeto de estudo e o sujeito que o investiga. A própria investigação de um fenômeno influi decisivamente sobre o mesmo: a nossa medição sempre alterará o que procuramos medir.

Para que concluamos a seção, recordaremos uma história curiosa. Heisenberg quase foi reprovado em seu doutorado por não ter respondido adequadamente a uma questão formulada por Wilhelm Wien (que era membro da banca) justamente sobre como calcular a resolução de um microscópio ótico.

Na época, era exigido que o candidato, mesmo sendo um teórico, demonstrasse conhecimento elementar de física experimental. Wien perguntou sobre a resolução de um interferômetro, de um telescópio e do citado microscópio. Heisenberg não conseguiu dar

uma explicação adequada. A sabatina fez com que Wien se dispusesse a reprová-lo, surgindo daí um debate entre o experimentalista e Arnold Sömmerfeld, físico teórico e orientador de Heisenberg. Por fim, o candidato foi aprovado com uma nota intermediária (possivelmente entre os extremos de aprovação e reprovação de Sömmerfeld e Wien) [Aip, homepage]. Embora tenha ficado abatido, o jovem físico (ele tinha 22 anos quando defendeu sua tese de doutoramento) talvez tenha mantido em algum lugar de sua mente o problema experimental que hoje tão bem ilustra o princípio que o consagrou.

#### 4.4 – Complementaridade e o Impacto Filosófico da Física Quântica

Como temos provado ao longo deste capítulo e do anterior, uma das mais fortes e recorrentes interpretações da física quântica é aquela que se baseia na idéia de *complementaridade*. Tal noção se refere ao caráter dual necessário à descrição tanto da radiação quanto da matéria. Tomemos como exemplo a radiação. Caso façamos um feixe de luz incidir sobre uma fenda dupla, veremos um padrão de interferência como o discutido na seção 4.1. Para explicar esse padrão, é essencial que se considere a radiação como sendo composta por ondas. No entanto, caso realizemos a experiência de Compton, não chegaremos a uma explicação adequada sem supor que a luz é composta por corpúsculos - fótons. Ambos os aspectos se complementam.

Para a matéria, temos o mesmo cenário. Se quisermos entender a experiência da gota de óleo de Millikan, precisamos entender o elétron como sendo uma partícula. Caso queiramos explicar os resultados de Davisson, Germer e Thomson, precisaremos recorrer às idéias de de Broglie. Novamente, uma descrição adequada exige que os aspectos “onda e partícula” sejam contemplados.

A complementaridade conduz à conclusão de que *ambos os aspectos* - de onda e de partícula - são necessários para um adequado entendimento da radiação e da matéria. Tais aspectos se manifestam separadamente, dependendo do tipo de experimento conduzido. Essa noção é fortemente suportada pela estrutura da física moderna, e forma um dos pilares da consagrada *interpretação de Copenhagen* dos fenômenos quânticos. Tal interpretação, que deve muito ao dinamarquês Niels Bohr (não surgiu por acaso o nome da cidade de Copenhagen), ganhou muita força com o amadurecimento da teoria quântica [Bohr, 1996].

Imaginar um experimento pode nos ajudar a ter melhor idéia da importância da noção de complementaridade. Assumamos que um feixe de elétrons incida sobre uma fenda dupla. A partir do que vimos neste capítulo, podemos esperar que se forme após a fenda um padrão de interferência. Será então lícito imaginar: “colocarei um amperímetro em cada fenda, assim será viável conhecer por qual fenda um certo elétron passou”. Entretanto, a adição desses instrumentos de medida modifica totalmente o aparato. Novas interações até então inexistentes passam a existir e, o que é mais importante, o padrão de interferência some completamente e dá lugar às “duas manchas” que esperaríamos de uma partícula “clássica” (vide a Fig. 4.4). Como isso pode ser entendido?

À luz da complementaridade, percebemos que, ao introduzir o amperímetro, buscamos vislumbrar um aspecto típico de partícula (uma onda pode muito bem “passar” por ambas as fendas, mas uma partícula não!), o que destruiu o caráter ondulatório verificado! Quisemos ver o elétron como partícula e conseguimos. O que não conseguimos e não podíamos conseguir é ver o elétron como partícula e onda ao mesmo tempo.

As novas interações impostas pelo aparato podem ser analisadas a partir de relações de Heisenberg. Este, aliás, é um exemplo típico de verificação do princípio da incerteza.

Quando há o padrão de interferência, não faz sentido perguntar por que fenda o elétron passou! A sua trajetória não é “perfeitamente determinada”, mas sim dotada de um caráter de nebulosidade, de indeterminação. Se quisermos conhecer esta trajetória com precisão, alteraremos o experimento e terminaremos por desvelar um comportamento “de partícula”. Note como isto se assemelha às limitações de (4.10).

Perde o sentido, em física quântica, a idéia de que é possível conhecer arbitrariamente as grandezas relevantes subjacentes a um fenômeno qualquer. Perde força a idéia de uma teoria científica sem limites para o conhecimento<sup>6</sup>. Como veremos no próximo capítulo, as previsões da teoria quântica têm um caráter *essencialmente estatístico*, em contraste com a física clássica, permeada pela noção de determinismo. Falaremos em probabilidades de uma partícula estar numa certa região como algo essencial, e não uma simples aproximação.

Tudo o que discutimos sempre gerou um grande desconforto em Einstein. Em sua visão de mundo, não havia lugar para indeterminações essenciais ou para uma física fundada inapelavelmente na estatística. Einstein buscava “conhecer a verdade”, e isso a teoria quântica não podia, pelo menos em sua opinião, proporcionar. Sua célebre frase “Deus não joga dados com o mundo” manifesta justamente essa fé numa concepção que se distanciava cada vez mais dos rumos que tomava a ciência.

Niels Bohr, um grande expoente da “nova física”, incorporou à sua visão de mundo a idéia de complementaridade. Ele não deixou de ver uma similaridade entre os rumos da teoria quântica e as antigas idéias presentes no taoísmo chinês, que põe em destaque a idéia da existência de princípios opostos, Yin e Yang. Isso explica o seu brasão, que contém a clássica ilustração destes princípios emoldurada por uma frase em latim: “Contraria sunt complementa”.

#### **Bibliografia do Capítulo 4:**

[Bohr 1996] **N. Bohr**, *Física Atômica e Conhecimento Humano: Ensaios (1932-1957)*, Contraponto, 1996.

[Born 1986] **M. Born**, *Física Atômica*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1986.

[Eisberg 1961] **R. Eisberg**, *Fundamentals of Modern Physics*, Wiley, 1961.

[Halliday e Resnick 1994] **D. Halliday, R. Resnick**, *Fundamentos da Física*, LTC, 1994.

[Heisenberg 1995] **W. Heisenberg**, *Física e Filosofia*, Editora UnB, 1995.

[Krane, 1983] **K. Krane**, *Modern Physics*, Wiley, 1983.

[Ohanian 1995] **H. Ohanian**, *Modern Physics*, Prentice Hall, Second Edition, 1995.

[Pais 1995] **A. Pais**, *Sutil é o Senhor: a Ciência e a Vida de Albert Einstein*, Nova Fronteira, 1995.

---

<sup>6</sup> Pelo menos um conhecimento baseado na “roupagem conceitual” clássica.

[Pais, 1997] A. Pais, *Einstein Viveu Aqui*, Nova Fronteira, 1997.

[Serway 1990] **R. Serway**, *Physics for Scientists and Engineers*, Saunders College Publishing, Third Edition, 1990.

[Aip, homepage] <http://www.aip.org/history/heisenberg/>

## Capítulo 5 – A Equação de Schrödinger

### 5.1 – A Equação de Schrödinger e seu Significado

Conforme vimos nos capítulos anteriores, a noção de dualidade mudou dramaticamente nossa maneira de encarar as idéias de radiação e matéria. No entanto, ainda havia “muita coisa no ar” após o trabalho de Einstein sobre o fóton e o de de Broglie acerca das “ondas-guia”. Faltava um formalismo que fosse suficientemente abrangente, um pilar semelhante ao que são as leis de Newton para a mecânica ou as equações de Maxwell para o eletromagnetismo.

Werner Heisenberg formulou, em 1925, uma abordagem que ficou conhecida como *mecânica das matrizes* [Born, 1986]. Nessa abordagem, de cujo desenvolvimento também participaram Max Born e Pascual Jordan, variáveis como posição e momento linear são representadas através de matrizes, operadores não-comutativos. Essa característica dá suporte à existência de aspectos quânticos como as próprias incertezas que discutimos no capítulo anterior.

Uma outra formulação foi proposta por um físico austríaco, Erwin Schrödinger. Sua abordagem, que é mais acessível matematicamente, tem por essência uma equação diferencial cuja solução é a famosa função de onda  $\Psi$  (*psi*). Tal função é, em termos simples, uma expressão matemática do caráter ondulatório de uma partícula, algo que se buscava, como vimos, desde a proposta de de Broglie<sup>7</sup>.

A partir da equação de Schrödinger, é possível obter soluções capazes de fornecer informações fundamentais sobre o comportamento de uma partícula-onda. Nela, são contempladas até mesmo as influências de forças externas, o que marca um nítido avanço em relação à proposta de de Broglie. Como afirma Krane em [Krane 1983], a equação de Schrödinger tem um papel análogo, na Mecânica Quântica, ao desempenhado na Física Clássica pela segunda lei de Newton, que relaciona, através de uma equação diferencial, força e posição de uma partícula. No contexto newtoniano, a aplicação da segunda lei descortina o futuro e o passado de uma partícula ou mesmo de um sistema de partículas. Analogamente, resolver a equação de Schrödinger conduz ao conhecimento da evolução temporal e espacial da forma de onda associada a uma partícula qualquer. No entanto, a função  $\Psi$  não permite, em conformidade com o princípio da incerteza, que se determine com precisão arbitrária qualquer grandeza associada à partícula. O estudo da função de onda, como veremos, é uma grande fonte de informação estatística.

Para que cheguemos à equação de Schrödinger, é importante que façamos algumas hipóteses. Primeiramente, analisaremos apenas uma partícula não-relativística, ou seja, suporemos que são válidas as expressões clássicas do momento e da energia cinética. Além disso, exigiremos que a equação seja linear, ou seja, que se  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  são soluções, então  $\Psi = a_1.\Psi_1 + a_2.\Psi_2$  também é solução. Nesse caso, permite-se uma superposição de funções de onda que fornece uma explicação para padrões de interferência como os observados nos experimentos de Davisson-Germer, por exemplo. É de se esperar também que a função de

---

<sup>7</sup> Como mostrou o próprio Schrödinger, sua formulação é equivalente àquela contida na mecânica das matrizes. Essa conclusão põe em evidência a importância dos esforços teóricos dos pioneiros dos quanta. Doravante, ater-nos-emos exclusivamente à equação de onda.

onda seja “bem-comportada” matematicamente, ou seja, não apresente um comportamento descontínuo [Krane, 1983]. Por fim, como lidamos com ondas, também é muito razoável buscar uma equação que forneça soluções com componentes senoidais, capazes de fazer emergir um “caráter ondulatório”.

Esqueçamos as dimensões  $y$  e  $z$  e pensemos apenas na dimensão  $x$  e na dimensão temporal  $t$ . Com base em todas essas considerações (e mais algumas que veremos depois), pode ser postulada a seguinte equação diferencial:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (5.1)$$

sendo  $\hbar = h/2\pi$ ,  $m$  a massa da partícula,  $V(x, t)$  a energia potencial,  $i$  a raiz de  $-1$  e  $\Psi(x, t)$  a desejada função de onda. A equação mostra que o conhecimento de  $V(x, t)$  é o ponto crucial: a partir dele, recorreremos a (5.1) para obter a função de onda, da mesma forma que na mecânica clássica precisávamos conhecer a força exercida sobre a partícula para que fosse determinada sua posição em todos os momentos.

Se supusermos que a função de onda tem uma dependência do tipo:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t) \quad (5.2)$$

e que a energia potencial depende apenas de  $x$ , pode-se mostrar que  $\phi(t)$  deverá obedecer, a partir de (5.1), a uma equação de primeira ordem do tipo:

$$i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{d\phi(t)}{dt} = C\phi(t) \quad (5.3)$$

sendo  $C$  um valor a determinar. A equação tem como solução funções do tipo:

$$\phi(t) = \exp(-2\pi i C t / \hbar) \quad (5.4)$$

A equação (5.4) revela que a função  $\phi(t)$  apresenta uma dependência simples com relação ao tempo. Falta ainda determinar  $\psi(x)$ , o que fazemos através da equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.5)$$

sendo  $E$  a energia total da partícula (cinética =  $mv^2/2$  + potencial). É possível mostrar ainda que a constante  $C$  de (5.3) e (5.4) deve ser justamente igual a  $E$ .

A suposição feita em (5.2) é muito usual na resolução de equações diferenciais parciais, de modo que, nos exemplos que discutiremos, concentrar-nos-emos na solução de (5.5), e não de (5.1). Com isso, trabalharemos num ambiente dotado de maior simplicidade matemática.

Podemos afirmar que a primeira etapa de análise corresponde basicamente ao trabalho de “quantificar”  $V(x)$ . O próximo passo, a obtenção de  $\psi$ , é puramente matemático. Resta a questão final: como interpretar o resultado obtido?

Max Born, em 1926, propôs uma interpretação da função  $\Psi$  que ganhou ampla aceitação no meio científico e é da maior relevância até os dias de hoje. Basicamente, ele afirmou que [Eisberg, 1961]:

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

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (5.6)$$

Eis uma visão das ondas associadas a uma partícula que, num primeiro momento, é sobremaneira perturbadora: o módulo ao quadrado da função  $\Psi$  é uma densidade de probabilidade relacionada à posição de uma partícula!

Uma vez que se assume que o módulo ao quadrado de  $\Psi$  é uma densidade de probabilidade, ele deve obedecer à condição usual

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (5.7)$$

Como  $\phi(t)$  tem módulo unitário (é uma exponencial complexa), no caso da equação independente do tempo, a condição se reduz a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (5.8)$$

como indica (5.2). Já temos uma primeira condição sobre nossa função de onda.

Suponhamos agora que estejamos lidando com a equação independente do tempo e queiramos conhecer a probabilidade de a partícula estar localizada entre as posições  $x = x_1$  e  $x = x_2$ . Pela própria definição de densidade de probabilidade, teremos:

$$p(x) = |\psi(x)|^2 \Rightarrow P(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (5.9)$$

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

$$E[x] = \int_{-\infty}^{\infty} x.p(x)dx \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2 dx \quad (5.10)$$

Paremos para refletir um pouco, após tantos resultados. Buscamos obter uma equação que descrevesse adequadamente o caráter ondulatório associado a uma partícula qualquer. Construímos essa equação e terminamos por chegar também a uma interpretação estatística muito forte para a função de onda obtida, interpretação, aliás, crucial dentro da “visão de mundo” quântica. É interessante notar o que nos fornece a equação de Schrödinger: podemos conhecer, em cada instante de tempo, a densidade de probabilidade

relacionada à localização de uma partícula (e poderíamos deduzir também a densidade de outra grandeza, como o momento linear). Não temos mais, como na Física Clássica um conhecimento completo e determinístico, mas sim um conhecimento de natureza randômica. Comprovações experimentais das previsões obtidas a partir de (5.1) podem envolver, por exemplo, múltiplas realizações de um experimento, que conduziriam, em tese, a uma distribuição de resultados comparável ao módulo ao quadrado da função de onda.

Uma lei fundamentalmente estatística, uma visão probabilística de mundo. Einstein jamais se sentiu à vontade com essa situação, como atesta a célebre frase “Deus não joga dados”. O grande físico acreditava que a Física Quântica era apenas uma teoria de transição, um modelo que seria suplantado por uma teoria mais completa em que não haveria lugar para as indesejáveis restrições estatísticas ao conhecimento do mundo [Pais, 1995]. Tal teoria, até agora, é apenas o sonho de alguns.

## 5.2 – Aplicações da Equação de Schrödinger

Após esta discussão introdutória, passemos à aplicação da equação a algumas situações representativas.

### 5.2.1 – A Partícula Livre

O primeiro desafio é obter  $\psi(x)$  para uma “partícula livre”, ou seja, alheia à influência de forças externas ( $F=0$ ). Como temos, em uma dimensão:

$$F = -dV(x)/dt \quad (5.11)$$

devemos ter  $V(x) = \text{constante}$ . Podemos então fazer:

$$V(x) = 0 \quad (5.12)$$

o que nos leva, a partir de (5.5) a:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \quad (5.13)$$

sendo  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ . A solução geral para (5.13) é do tipo:

$$\psi(x) = A.\text{sen}(kx) + B.\text{cos}(kx) \quad (5.14)$$

uma onda senoidal pura. A energia, de (5.13), vale:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (5.15)$$

Como não há restrições para o valor de  $k$ , a energia não é quantizada. Como  $V(x) = 0$ ,  $E$  é simplesmente a energia cinética. Na física clássica, a relação entre energia cinética e momento linear é simplesmente  $E_c = p^2/2m$ , o que nos permite inferir que o momento linear da partícula será:

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad (5.16)$$

Ora, isso é o que esperávamos à luz da proposta de de Broglie! Não obstante, surge um problema: como aplicar (5.8) a (5.14)? A integral não pode ser determinada, o que significa que perde o sentido a própria idéia de normalização<sup>8</sup>. Esse impasse desapareceria se supuséssemos a superposição de várias frequências, que produziria um pacote de onda como o mostrado na Fig. 4.8 do capítulo anterior.

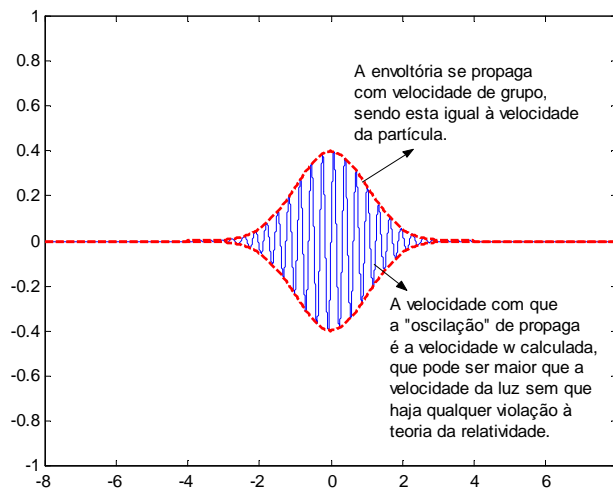
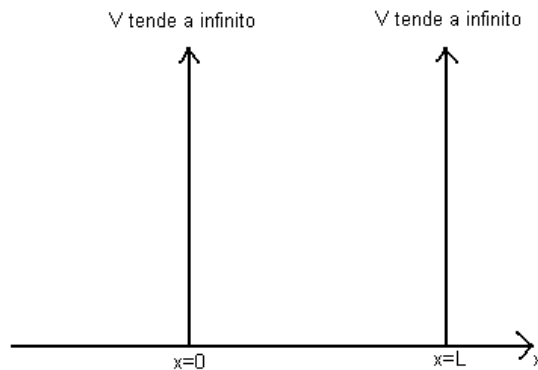


Figura 4.8 (Reproduzida neste capítulo por simplicidade)

### 5.2.2 – O Poço de Potencial Infinito

Voltemo-nos agora para um caso mais interessante: o de uma partícula confinada em um poço de potencial com paredes de “altura” infinita. A Fig. 5.1 traz um diagrama esquemático:

<sup>8</sup> De certa maneira, a suposição de que a partícula é livre nos conduziu a uma solução em que o momento é bem-determinado e a posição é totalmente incerta (não há potenciais que a restrinjam).



**Figura 5.1:** Poço de Potencial Infinito

Temos, portanto:

$$V(x) = 0, \text{ para } 0 \leq x \leq L \text{ e } V(x) \rightarrow \infty, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq L \quad (5.17)$$

Pela altura infinita dos “muros”, podemos afirmar que não há nenhuma chance de a partícula estar fora do poço entre  $x = 0$  e  $x = L$ . Assim,

$$\psi(x) = 0, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq L \quad (5.18)$$

Dentro do poço, temos  $V(x) = 0$  e a mesma solução do caso da partícula livre, vide equações (5.14) e (5.15). No entanto, temos algumas condições a aplicar. A primeira é que a função  $\psi(x)$  seja nula nos limites do poço, para evitar descontinuidades em relação a (5.18). Dessa maneira, temos de impor as condições [Krane, 1983]

$$\psi(0) = A.\text{sen}(0) + B.\text{cos}(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \quad (5.19)$$

e

$$\psi(L) = A.\text{sen}(kL) + B.\text{cos}(kL) = 0 \quad (5.20)$$

Aplicando a condição  $B = 0$ , obtida em (5.19), a (5.20), chegamos a

$$A.\text{sen}(kL) = 0 \quad (5.21)$$

Para fugir de uma solução trivial, resta-nos fazer:

$$\text{sen}(kL) = 0 \quad (5.22)$$

Portanto, temos que  $kL$  deve assumir os valores  $\pi$ ,  $2\pi$ ,  $3\pi$  e assim por diante. Matematicamente<sup>9</sup>:

---

<sup>9</sup> Note o leitor que o valor nulo e valores negativos são desprezados.

$$kL = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.23)$$

O que temos em (5.23)? Basicamente, que a solução da equação de Schrödinger para um poço infinito nos fornece uma série de “ondas estacionárias de de Broglie”, cujos comprimentos de onda devem obedecer à relação:

$$\lambda = 2L/n, n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.24)$$

Há, portanto, uma curiosa analogia entre  $\psi$  e, por exemplo, as ondas produzidas pela corda de um violão. Interessante, sem dúvida!

A partir de (5.23) e de (5.15), obtemos:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad (5.25)$$

Neste caso, a energia é quantizada, ou seja, só podem ser assumidos valores de energia pertencentes a um repertório discreto [Ohanian, 1995]. Como a energia é puramente cinética, há um conjunto discreto de velocidades permitidas para a partícula (no entanto, cada velocidade pode ter ambos sentidos, o que ainda mantém uma incerteza)! Isso quer dizer que nossa partícula confinada não pode se mover com uma velocidade qualquer, o que não tem paralelo no mundo clássico. O número quântico  $n$  indica, por assim dizer, em que estado estacionário está a partícula. O estado com  $n = 1$  é chamado de *estado fundamental (ground state)*, e os demais são *estados excitados (excited states)*.

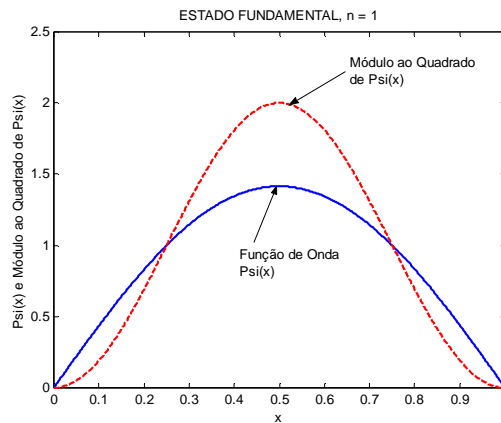
Já fizemos bastante, mas ainda falta determinar a constante  $A$ . Para tanto, façamos uso da condição (5.8):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (5.26)$$

Finalmente, temos a solução definitiva:

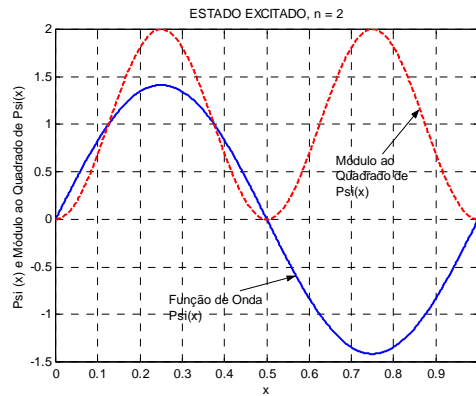
$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), 0 \leq x \leq L \quad (5.27)$$

Se fizermos  $L = 1$  e  $n = 1$ , obtemos as funções  $\psi(x)$  e  $|\psi(x)|^2$  mostradas na Fig. 5.2.



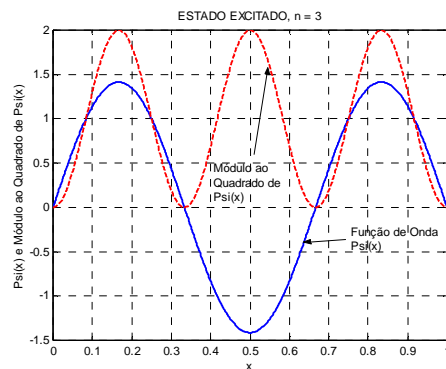
**Figura 5.2:** Estado Fundamental

Para  $n = 2$ , temos:



**Figura 5.3:** Estado Excitado,  $n = 2$

Para  $n = 3$ , temos:



**Figura 5.4:** Estado Excitado,  $n = 3$

Alguns aspectos muito interessantes merecem nossa atenção. Vemos nitidamente nos gráficos que as funções de onda são “ondas estacionárias”, como já antecipara a análise

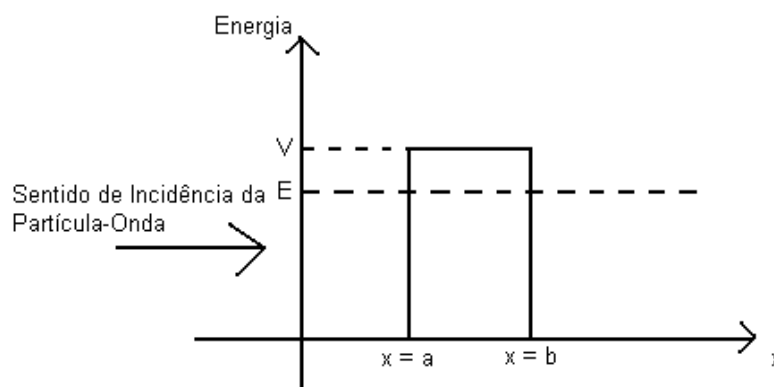
matemática previamente empreendida. Vemos também que, para cada estado de energia, há uma configuração probabilística distinta, o que também não é surpreendente.

Algo interessante pode ser visto nas duas últimas figuras. Na Fig. 5.3, por exemplo, vemos que a probabilidade de a partícula estar em uma vizinhança infinitesimal de  $x = 0,5$  é nula. No entanto, ela tem uma probabilidade não-nula de estar nas regiões  $x < 0,5$  e  $x > 0,5$ . Ora, somos obrigados a aceitar que, de certa maneira, ela “pode transitar” entre as duas regiões sem jamais estar em uma vizinhança infinitesimal de  $x = 0,5$ ! [Krane, 1983] Isso parece muito estranho, mas precisamos nos lembrar que a estranheza do mundo quântico decorre da natureza de nossa intuição, moldada segundo a concepção clássica de partícula.

### 5.3 – O Efeito Túnel

Algumas vezes, ouvimos falar que a Física Quântica prevê que as partículas podem se comportar como fantasmas, atravessando “paredes de potencial” mais altas do que sua própria energia. A clássica analogia é com uma pessoa que corre contra uma parede e, miraculosamente, consegue atravessá-la. Nesta seção, procuraremos discutir de maneira mais formal esse curioso cenário, que se relaciona com o denominado *efeito túnel*.

Até agora, supusemos que função  $V(x)$  era infinita ou nula. Apesar disso, em muitos casos de interesse, devemos considerar que essa função tem a forma de uma “barreira”, como mostra a Fig. 5.5.



**Figura 5.5:** Barreira Finita de Potencial

Na figura,  $E$  é a energia da partícula e  $V$  a energia potencial da barreira entre  $x = a$  e  $x = b$ . Como vemos, a partícula não tem energia suficiente para romper a barreira e chegar à região  $x > b$ .

Porém, se resolvermos a equação de Schrödinger para  $V(x)$  como na Fig. 5.5, é possível mostrar que há uma probabilidade não-nula de a partícula, mesmo com  $E < V$ , estar na região  $x > b$ . Novamente, temos uma ruptura com o mundo clássico, onde isso não poderia acontecer em hipótese alguma. Como pode uma partícula com energia menor que  $V$  ultrapassar a barreira? Ora, toda estranheza está justamente no emprego do conceito de “partícula”. Caso pensemos em uma onda, a coisa não é tão estranha assim, como tentaremos mostrar adiante.

A probabilidade de uma partícula onda com energia  $E$  ultrapassar a barreira é dada, aproximadamente, por [Halliday e Resnick, 1994]<sup>10</sup>:

$$T \approx \exp(-2KL) \quad (5.28)$$

sendo  $L$  a largura da barreira ( $L = b-a$ ) e

$$K = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(V - E)}{h^2}} \quad (5.29)$$

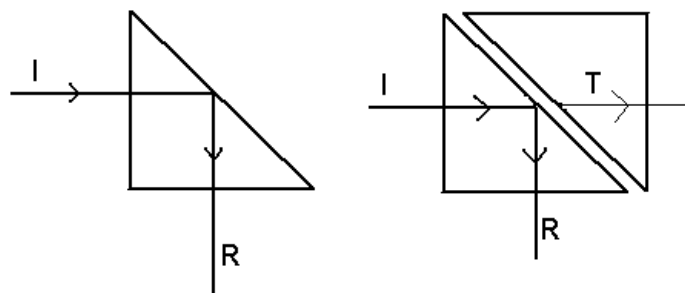
Podemos fazer uma analogia entre  $T$  e o coeficiente de transmissão de uma “onda clássica” que incide sobre um meio qualquer. Essa analogia condiz exatamente com a abordagem da mecânica ondulatória, para a qual a partícula nada mais é que um pacote de ondas que incide sobre uma barreira e pode, portanto, ser transmitido.

Percebemos que é tão mais fácil “tunelar” por uma barreira quanto menor for a diferença de energia  $V - E$  e a largura  $L$ , o que é bastante intuitivo. Resta então perguntar: a Física Quântica burlou a conservação da energia? Uma resposta bastante engenhosa pode ser dada com base na segunda relação de incerteza estudada no capítulo 4, a saber:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h \quad (4.11)$$

Assim, é possível, no efeito túnel, que se burle a conservação da energia por uma quantidade  $\Delta E = V - E$ , desde que o tempo decorrido nesta transgressão não exceda o intervalo  $\Delta t$  esperado de (4.11) [Halliday e Resnick, 1994]. Em termos simples, mesmo a noção de conservação da energia está sujeita às indeterminações de Heisenberg.

Para que não nos sintamos completamente perdidos nesse novo mundo, vale lembrar que o efeito túnel ocorre também para ondas luminosas. Analisemos o experimento descrito na Fig. 5.6.



**Figura 5.6:** “Efeito Túnel” em Ondas Clássicas

Temos um prisma de vidro imerso no ar. No primeiro caso, um raio incidente na interface vidro-ar sofre reflexão total, ou seja, nada é transmitido pela interface. Entretanto, quando um segundo prisma de vidro é aproximado, fazendo com que o *gap* entre as duas interfaces

<sup>10</sup> A aproximação é sólida para pequenos valores de  $T$ .

vidro-ar seja pequeno, então a configuração de reflexão total é destruída, havendo a transmissão de uma parcela da luz pela interface do primeiro prisma, ao contrário do que ocorria antes. [Halliday e Resnick, 1994, Krane, 1983] Isso quer dizer que, quando se impôs uma barreira (*gap*) finita, houve um coeficiente de transmissão não-nulo. Parece-nos estranho, pois temos a impressão que o raio, de alguma forma, “percebe” se poderá ou não atravessar a barreira, como que sentindo a presença do prisma. Na realidade, uma análise das equações do eletromagnetismo explicam o ocorrido sem sobressaltos.

Halliday e Resnick [Halliday e Resnick, 1994] sugerem um experimento simples para verificar a ocorrência de tunelamento em ondas clássicas. O que eles propõem é que se incline um copo cheio de água até que os raios de luz que chegam aos nossos olhos sejam provenientes de reflexão total nas paredes do copo. Nesta situação, veremos a parede prateada. Devemos então umedecer um dedo e apertá-lo contra a parede do copo, pelo lado de fora. Neste caso, iremos ver, contra o fundo prateado, nossas impressões digitais, com as regiões de ranhura do dedo ainda prateadas. Isto quer dizer que vemos as regiões do dedo que estavam mais juntas à parede do copo (menor *gap*), enquanto as regiões mais distantes (ranhuras), que tem um *gap* ainda muito grande, permanecem invisíveis.

O efeito túnel tem muitas aplicações práticas, dentre as quais destacamos o *microscópio de tunelamento de varredura* e o *diodo túnel*.

### **Bibliografia do Capítulo 5:**

[Böhr 1996] **N. Böhr**, *Física Atômica e Conhecimento Humano: Ensaio (1932-1957)*, Contraponto, 1996.

[Born 1986] **M. Born**, *Física Atômica*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1986.

[Eisberg 1961] **R. Eisberg**, *Fundamentals of Modern Physics*, Wiley, 1961.

[Halliday e Resnick 1994] **D. Halliday, R. Resnick**, *Fundamentos da Física*, LTC, 1994.

[Heisenberg 1995] **W. Heisenberg**, *Física e Filosofia*, Editora UnB, 1995.

[Krane, 1983] **K. Krane**, *Modern Physics*, Wiley, 1983.

[Ohanian 1995] **H. Ohanian**, *Modern Physics*, Prentice Hall, Second Edition, 1995.

[Pais, 1995] **A. Pais**, *Sutil é o Senhor: a Ciência e a Vida de Albert Einstein*, Nova Fronteira, 1995.

[Serway 1990] **R. Serway**, *Physics for Scientists and Engineers*, Saunders College Publishing, Third Edition, 1990.

## Capítulo 6 – Teoria Atômica

### 6.1 – Átomos

O pensamento grego, tão diverso em si mesmo, tem sido uma das mais ricas fontes de inspiração para a humanidade, inclusive no campo da ciência. Dentre os filósofos denominados “Pré-Socráticos”, dois têm seus nomes associados à gênese da *teoria atômica*: Leucipo de Mileto (cerca de 500 a.C. – 430 a.C.) e Demócrito de Abdera (cerca de 460 a.C. – 370 a.C.).

A teoria atômica primordial afirmava que existia um *vazio* no qual se moviam *átomos*, ou seja, *partículas indivisíveis* dotadas de algumas características. A combinação dessas partículas, em termos muito simples, era a fonte da diversidade verificada por nossos sentidos.

A idéia de átomo seria retomada posteriormente no contexto do estudo da química, em trabalhos de pesquisadores como John Dalton. O “elo químico” é importante para que se entenda como a noção ganha força e desemboca nas concepções que estudaremos neste capítulo. Nas próximas seções, analisaremos desenvolvimentos fundados em resultados empíricos muito importantes, que, por sua vez, culminam na proposta de Bohr para o modelo do átomo de hidrogênio, uma combinação de elementos da Física Clássica e da então emergente Física Quântica. Veremos também que, apesar de importantíssimo, o modelo foi conceitualmente suplantado pelo enfoque quântico moderno, baseado na mecânica ondulatória, cujas bases expusemos nos capítulos 4 e 5.

### 6.2 – O Modelo de Thomson

Conforme vimos no capítulo 3, uma placa metálica pode ejetar elétrons quando fazemos incidir luz sobre ela. Isso pode ser encarado como uma prova de que os próprios átomos que compõem o metal devem conter partículas carregadas. Nesse contexto, entende-se a ionização de um átomo como a retirada de elétrons deste, o que é comprovado pela constatação experimental de que a mais simples ionização do átomo faz com que ele adquira uma carga positiva justamente igual à carga de um elétron.

Tendo em vista que os átomos são eletricamente neutros, é necessário que eles contenham uma quantidade de carga positiva suficiente para “contrabalançar” a carga negativa dos elétrons<sup>11</sup>. Como a massa de um elétron é muito menor que a de um átomo, é razoável assumir que a massa atômica está concentrada justamente nesse aglomerado de carga positiva. Com base em tais considerações, chegamos ao modelo proposto por Joseph John Thomson.

No modelo de Thomson, os elétrons do átomo estão espalhados uniformemente sobre uma distribuição esférica de carga positiva<sup>12</sup>. A Fig. 6.1 traz um esquema:

---

<sup>11</sup> Doravante assumiremos que um átomo neutro tem uma carga total positiva e negativa de magnitude  $Ze$ , sendo  $Z$  o número de elétrons presentes no átomo e  $e$  a carga eletrônica.

<sup>12</sup> A uniformidade da distribuição é devida à repulsão mútua dos elétrons [Eisberg, 1961].



**Figura 6.1:** Modelo de Thomson

A partir da Fig. 6.1, percebemos por que o modelo de Thomson veio a ser conhecido por alguns como “pudim de ameixas”: a esfera positiva faz o papel de “massa do pudim”, enquanto as ameixas são os elétrons incrustados nesta massa<sup>13</sup>.

No estado de menor energia, os elétrons estariam fixos em suas posições. Quando o átomo era excitado, atingia-se um estado de maior energia, no qual os elétrons passavam a apresentar um movimento vibratório em torno de suas posições de repouso [Krane, 1983]. Uma vez que o eletromagnetismo prevê que uma carga acelerada deveria emitir radiação, estaria “explicada” a emissão verificada na prática em tais estados<sup>14</sup>.

Tal modelo era simples e dotado de uma certa elegância. No entanto, em 1911, mostrou-se inadequado ante os resultados obtidos por Ernest Rutherford, que buscou entender a estrutura do átomo a partir de experiências de espalhamento de partículas alfa em alvos metálicos.

### 6.2.1 – Partículas Alfa

Partículas alfa são átomos de hélio duplamente ionizados (com dois elétrons a menos, ou seja, sem elétrons e com carga  $+2e$ ). Essas partículas são emitidas espontaneamente por vários elementos, como urânio e rádio. Vejamos um pouco de sua história como narrada em [Eisberg, 1961].

No final do século XIX, Henri Becquerel e Marie Curie descobriram que muitos elementos pesados espontaneamente emitiam radiação capaz de escurecer uma película fotográfica, o que deu origem ao estudo da *radioatividade*. Através de um aparato dotado de um campo magnético, mostrou-se que a radiação emitida era composta por três componentes, duas defletidas em direções opostas pelo campo, e uma que não era perturbada por ele.

As duas componentes defletidas deveriam ser formadas por partículas carregadas de maneira oposta, enquanto a terceira era neutra. A componente com carga positiva correspondia às *partículas alfa*, a negativa às *partículas beta*, e a neutra à *radiação gama* (que, por ser composta de ondas/fótons, não era defletida).

Rutherford foi quem mostrou que as partículas alfa eram átomos de Hélio duplamente ionizados, o que fez através de um experimento engenhoso que não

<sup>13</sup> O raio da esfera positiva era suposto da ordem de 0.1 nm, que se sabia ser aproximadamente o valor do raio do átomo.

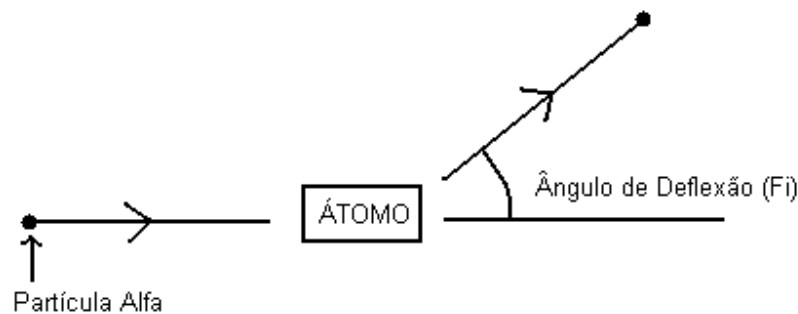
<sup>14</sup> Na realidade, havia algumas propriedades dos processos de emissão que não eram explicadas por esse modelo, mas isso não deve nos ocupar neste momento.

descreveremos aqui. O fato é que ele era um dos pesquisadores mais familiarizados com essas partículas, razão pela qual se dispôs a usá-las como “sondas” capazes de revelar a estrutura da matéria.

### 6.2.2 – Espalhamento de Partículas Alfa e o Modelo de Thomson

Tentemos agora entender o célebre experimento de Rutherford, realizado em conjunto com seus alunos, Hans Geiger (que depois foi um dos descobridores do famoso contador Geiger) e Ernest Marsden. Basicamente, o que se fazia era bombardear uma película metálica delgada (de ouro) com um feixe de partículas alfa e registrar, através de um filme à base de zinco e enxofre, a passagem dos corpúsculos defletidos. A deflexão era causada pela força de Coulomb decorrente da interação entre a partícula alfa e as cargas do átomo.

Se supusermos que a partícula alfa seja defletida pelos átomos do metal segundo o esquema a seguir



**Figura 6.2:** Deflexão de uma Partícula Alfa

torna-se possível obter na prática uma estimativa da percentagem de partículas defletidas em função do ângulo  $\phi$  de deflexão.

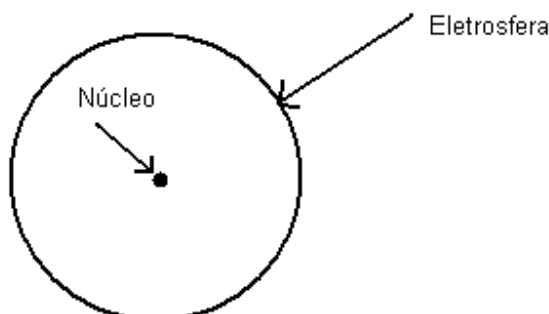
De maneira resumida, podemos dizer que as previsões relativas a essa distribuição produzidas pelo modelo de Thomson apresentavam boa concordância experimental para pequenos valores de  $\phi$ . No entanto, foi observado um número pequeno, mas significativo, de deflexões com grandes ângulos  $\phi$ , o que não era, de forma alguma, esperado à luz desse modelo [Krane, 1983]. De fato, a presença de uma grande esfera com distribuição uniforme de carga não permitia que uma partícula alfa se aproximasse do átomo de uma maneira que ocasionasse um substancial desvio. Isto fazia com que surgisse uma discrepância enorme (muito grande mesmo) entre as previsões de Thomson e a experimentação para grandes valores de  $\phi$ . Era hora de uma mudança substancial.

### 6.3 – O Modelo de Rutherford

Para contornar essas dificuldades, Rutherford propôs um modelo no qual a carga positiva do átomo se concentra em uma pequena região do espaço, o núcleo<sup>15</sup> [Born, 1986].

<sup>15</sup> Essa idéia faz de Rutherford o pai da Física Nuclear.

Essa região, dotada de carga  $+Ze$ , contém quase toda a massa do átomo, e, além disso, é cercada por um conjunto de elétrons. A Fig. 6.3 ilustra esse “modelo planetário”.



**Figura 6.3:** Esboço do Modelo de Rutherford

As previsões do modelo de Rutherford tiveram uma concordância muito boa com os resultados obtidos a partir do experimento de espalhamento, o que serviu de suporte ao novo modelo. No entanto, havia um problema muito sério no que se refere à estabilidade de átomos concebidos segundo os moldes expostos. Se assumirmos que os elétrons não se movem em relação ao núcleo, então nada impede que a atração mútua entre as partes faça com que a eletrosfera colapse e a dimensão do átomo se torne a dimensão do núcleo [Krane, 1983]. Porém, sabe-se que um átomo é aproximadamente quatro ordens de grandeza maior que seu próprio núcleo, o que torna tal cenário um contra-senso.

Podemos então pensar que o elétron gira em torno do núcleo, como na analogia planetária que adotamos há pouco. Entretanto, segundo o eletromagnetismo, uma carga acelerada deve emitir radiação, o que levaria a uma perda gradual de energia do elétron até o ponto em que houvesse um colapso semelhante ao que há pouco descrevemos.

Torna-se, portanto, patente que a Física Clássica não é capaz de explicar uma das mais básicas propriedades do átomo: a sua estabilidade. De fato, foi Bohr quem deu o primeiro passo rumo à elucidação desse enigma. Antes, porém, de conhecermos a proposta de Bohr, convém que discutamos um pouco os processos de emissão e absorção de energia.

#### **6.4 – Emissão e Absorção: Linhas Espectrais**

É hora de voltarmos nossa atenção para outra propriedade fundamental dos átomos, a saber, que eles emitem e absorvem energia. As idéias de absorção e emissão já fizeram parte de nossa discussão quando lidamos com a problemática do corpo negro (vide o capítulo 2), mas agora encararemos o assunto de uma forma distinta.

No capítulo 2, vimos um espectro de emissão contínuo, ou seja, em todas as frequências. Essa continuidade, como vimos, é consequência de múltiplos espalhamentos sofridos pela radiação até atingir a superfície do corpo e ser emitido. No entanto, para que avaliemos a *radiação emitida pelo átomo*, faz-se necessário estabelecer um processo que elimine este tipo de “mascaramento”. Para que se investigue o espectro de emissão de um átomo, pode-se fazer uso de uma grade de difração ou de um prisma, ambos capazes de separar as diferentes frequências presentes no feixe emitido. Dispositivos desse tipo são a

base de um aparelho chamado *espectroscópio*, que permite um estudo detalhado do conteúdo em frequência da radiação emitida por uma substância qualquer.

Quando se analisa a luz emitida por um átomo, verifica-se que a mesma é decomposta por um espectroscópio em uma série de raias denominadas *linhas espectrais*. Cada uma dessas linhas está associada a uma certa frequência presente no espectro de emissão, o que faz de seu conjunto uma imagem do padrão segundo o qual o átomo estudado emite energia. Esse padrão, importante notar, é discreto.

Cada átomo tem a si associado um padrão próprio de raias espectrais. De fato, essas raias são uma espécie de “impressão digital” dos elementos químicos, uma característica particular de cada um deles. O hidrogênio, por exemplo, apresenta uma linha espectral vermelha, uma verde, várias linhas violeta e muitas linhas fora do espectro visível. Para “forçar” o átomo a emitir radiação, é preciso excitá-lo, o que usualmente se faz em laboratório por dois métodos: aquecendo a substância estudada ou aplicando nela descargas elétricas<sup>16</sup>.

Além de estudar o que um elemento emite, é importante conhecer também o que ele absorve, ou seja, o seu *espectro de absorção*. Para isto, é utilizado um processo inverso. Basicamente, o que se faz é incidir luz branca (que, idealmente, contém em si todas as frequências) sobre um tubo contendo a substância estudada. A luz após a passagem pelo tubo deve ser decomposta pelo espectroscópio [Ohanian, 1995].

Sabe-se que a luz branca tem um espectro contínuo em todas as frequências. Portanto, as raias que “faltarem” após a passagem pelo tubo correspondem justamente às frequências absorvidas. As “raias faltantes” são identificadas como linhas negras no espectro da luz após o tubo<sup>17</sup>.

É possível, em muitos casos, explicitar regularidades presentes no espaçamento e na intensidade das linhas espectrais. Há um caso muito importante, no qual estas regularidades são de uma marcante elegância: o caso do espectro do hidrogênio.

#### 6.4.1 – As Séries do Espectro do Hidrogênio

A análise da regularidade do espaçamento entre as linhas espectrais do hidrogênio levou Johann Jakob Balmer a propor uma fórmula simples para os comprimentos de onda associados a um trecho do espectro. Ele mostrou que eles obedecem ao padrão [Krane, 1983]:

$$\lambda = 91.176\text{nm} \cdot \frac{4n^2}{n^2 - 4}, n = 3,4,5,\dots \quad (6.1)$$

Colocando (6.1) em termos de frequências, temos [Born, 1986]:

---

<sup>16</sup> Muitas vezes ouvimos falar que astrônomos descobriram que um dado elemento está presente em tal nebulosa, ou algo assim. Isso pode ser feito, por exemplo, através da análise das frequências presentes na radiação emitida pela nebulosa, a partir da qual podem ser encontradas linhas espectrais características dos elementos conhecidos. Quando se encontra um conjunto de linhas associado a um certo elemento, tem-se um forte indício de sua presença na constituição do corpo celeste estudado.

<sup>17</sup> Há uma íntima relação entre as linhas de emissão e as de absorção. De fato, toda linha presente no espectro de absorção estará presente no de emissão. No entanto, o inverso não é verdadeiro. Falaremos mais sobre esta relação quando estudarmos o modelo de Bohr.

$$f = \frac{c}{\lambda} = cR \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, 5, \dots \quad (6.2)$$

sendo  $R = 1/91.176 \text{ nm} = 109678 \text{ cm}^{-1}$  a *constante de Rydberg*.

A fórmula de Balmer tem um caráter puramente empírico, ou seja, não fornece qualquer indício do mecanismo atômico que produz tais regularidades. No entanto, ele percebeu que esta fórmula poderia ser generalizada, sugerindo que poderia haver outras séries para as quais o termo  $2^2$  em (6.2) seria substituído por  $1^2$ ,  $3^2$ ,  $4^2$ , etc. De acordo com essa sugestão, deve-se reescrever (6.2) genericamente como:

$$f = \frac{c}{\lambda} = cR \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = k + 1, k + 2, k + 3, \dots \quad \text{e} \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (6.3)$$

As séries para  $k = 1, 3, 4$  e  $5$  são denominadas, respectivamente, série de Lyman, Paschen, Brackett e Pfund, em homenagem aos cientistas que, alguns anos após o trabalho de Balmer, verificaram experimentalmente sua existência. A primeira dessas séries se localiza no ultravioleta, enquanto as demais se encontram no infravermelho. A de Balmer está no ultravioleta próximo e no visível.

Há ainda uma propriedade interessante, a saber, que a soma da frequência de duas linhas espectrais pode dar exatamente a de uma terceira. Por exemplo, façamos:

$$f_1 = cR \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) \quad (6.4)$$

ou seja, a segunda linha da série de Lyman, e:

$$f_2 = cR \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} \right) \quad (6.5)$$

ou seja, a primeira linha da série de Paschen.

Obtenhamos agora  $f_3$  como a soma de  $f_1$  e  $f_2$ :

$$f_3 = f_1 + f_2 = cR \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) + cR \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} \right) = cR \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{4^2} \right) \quad (6.6)$$

Percebemos que  $f_3$  é tão-somente a terceira linha da série de Lyman! Em outras palavras, combinar duas frequências do espectro nos fez obter uma terceira [Born, 1986]. Tal resultado, i.e., que a soma de duas frequências do espectro do hidrogênio pode, em alguns casos, produzir uma terceira frequência emitida pelo átomo é a base do chamado *princípio da combinação de Rydberg – Ritz*, nome dado em homenagem a Janne Rydberg e Walter Ritz.

Niels Böhr utilizou a idéia de Rutherford para propor um modelo quântico que teve grande sucesso experimental quando aplicado ao átomo de hidrogênio. De fato, ele explica todas as características discutidas nesta seção e, o que é essencial, permite que se obtenha o valor de constantes como a de Rydberg a partir de outras constantes físicas “mais fundamentais”. Passemos, sem mais demora, à discussão desse modelo.

## 6.5 – O Modelo de Bohr

Niels Henrik David Bohr é considerado um dos pais da Física Quântica. Uma forte razão para isso é o modelo por ele proposto, que pela primeira vez introduziu a noção de quantização na descrição do mundo atômico. Suas idéias tiveram significativo sucesso experimental quando aplicadas ao estudo do mais simples dos átomos, o de hidrogênio. No entanto, revelaram-se limitadas diante do problema de explicar características fundamentais dos demais átomos. Por esse motivo, nesta seção lidaremos apenas com o caso mais simples.

Em primeiro lugar, para que fosse “salvo” o modelo de Rutherford, fazia-se necessário conceber algo que impedisse o colapso do átomo graças à contínua emissão de radiação pelo elétron em seu “passeio” ao redor núcleo. Bohr começou a resolver essa dificuldade ao postular que as órbitas e energias de um átomo de hidrogênio seriam *quantizadas*. Isso significa que nem todas órbitas e energias deveriam ser permitidas, o que nos remete à idéia pioneira de Planck sobre os osciladores do corpo negro.

Esse primeiro passo já representava uma ruptura com a Física Clássica, a qual, como mostramos anteriormente, é incapaz de explicar a estrutura do átomo. Mas Bohr foi ainda mais longe ao propor o seguinte:

*Quando o elétron está em uma das órbitas quantizadas, ele não emite radiação eletromagnética. Nesse caso, diz-se que ele se encontra em um estado estacionário. O elétron pode “saltar” de um estado estacionário para o outro, numa transição descontínua, emitindo ou absorvendo um fóton de radiação.*

Essa idéia “resolve” o problema do colapso, mas, no entanto, é completamente estranha às teorias físicas de então. Em verdade, essa lei é um postulado que afronta diretamente o eletromagnetismo sem fornecer nenhuma justificativa teórica forte. Para formalizar a coisa, Bohr postulou:

*O movimento dos elétrons obedece às leis da mecânica clássica num estado estacionário, mas não na transição entre estados.*

Novamente, há uma mescla entre elementos clássicos e quânticos (na transição), o que é marcante na formulação de Bohr. Exponhamos agora uma idéia fundamental:

*Quando um elétron salta de um estado de energia  $E_1$  para um estado de menor energia  $E_2$ , ele emite um único fóton com energia  $E_1 - E_2$ .*

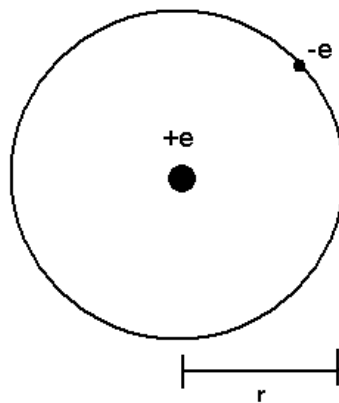
Esse é um postulado que, com as devidas “inversões” vale para o processo de absorção<sup>18</sup>. É importante frisar que, segundo o modelo acima, a radiação emitida ou absorvida é formada por fótons dotados de uma energia que se relaciona às transições entre estados dos diversos átomos.

Por fim, é essencial a seguinte noção:

*As órbitas correspondentes aos estados estacionários são caracterizadas por valores quantizados do momento angular orbital. Este é sempre múltiplo de  $\hbar = h/2\pi$*

Tal postulado nos permite determinar as órbitas nas quais trafega o elétron pertencente ao átomo de hidrogênio.

Lançadas as bases conceituais, convém que passemos ao domínio da matemática. Lembremo-nos de que o átomo de hidrogênio é formado por um próton com carga +e e por um elétron com carga -e e massa  $m_e$ , como indica a Fig. 6.7.



**Figura 6.7:** Esquema do Átomo de Hidrogênio

Em primeiro lugar, temos que o módulo da força de atração entre as cargas é dado pela lei de Coulomb [Ohanian, 1995]:

$$F_{\text{coul}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|Q_1||Q_2|}{d_{1,2}^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (6.7)$$

sendo  $r$  o raio do átomo. Como o elétron, em nosso modelo, está em movimento circular uniforme ao redor do núcleo, a força de Coulomb é a força centrípeta. Assim,

$$F_{\text{ctp}} = \frac{m_e \cdot v^2}{r} = F_{\text{coul}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (6.8)$$

---

<sup>18</sup> Chamamos a atenção do leitor para o fato de que o fenômeno de emissão / absorção de energia num salto entre níveis discretos é recorrente, por exemplo, na análise de semicondutores.

De acordo com o último postulado, o momento angular deve ser múltiplo da constante de Planck “barrada”. Dessa forma, temos que o momento angular  $L$  deve valer:

$$L = m_e \cdot v \cdot r = n\hbar, n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.9)$$

sendo  $n$  um número quântico.

Elevando ambos os membros de (6.9) ao quadrado, obtemos a relação

$$v^2 = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m_e^2 r^2} \quad (6.10)$$

Substituindo (6.10) em (6.8) e manipulando um pouco as equações, chegamos ao raio da órbita:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \frac{n^2 \hbar^2}{m_e} \quad (6.11)$$

onde o índice  $n$  vincula o raio ao número quântico definido anteriormente. O menor raio possível, obtido quando  $n = 1$ , é designado às vezes por  $a_0$ , e se chama *raio de Bohr*:

$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \frac{\hbar^2}{m_e} = 0.5292 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (6.12)$$

A energia dos elétrons nessas órbitas é o resultado da soma entre energia cinética e energia potencial (associada à força de Coulomb). Para a energia cinética, usaremos a expressão clássica, não-relativística, supondo  $v \ll c$ :

$$E_c = m_e \cdot v^2 / 2 \quad (6.13)$$

A energia potencial tem a ver com a integral da força de Coulomb com respeito a  $r$ , e vale:

$$E_p = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.14)$$

Usando as equações (6.10), (6.11), (6.13) e (6.14), deduzimos que a energia total associada à  $n$ -ésima órbita é:

$$E_n = E_c + E_p = \frac{1}{2} m_e \left( \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2} \right) \left( \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2} \right)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2} \right) \quad (6.15)$$

Manipulando (6.15), chegamos finalmente a:

$$E_n = -\frac{e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.16)$$

A energia do estado fundamental,  $n = 1$ , vale [Halliday e Resnick, 1994]:

$$E_1 = -\frac{e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} = -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -13.6 \text{ eV} \quad (6.17)$$

As energias dos demais estados são simplesmente:

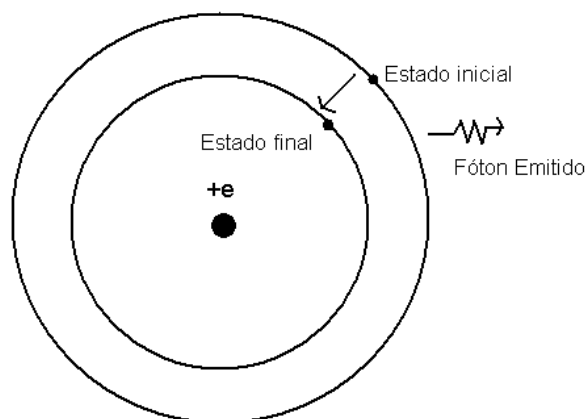
$$E_n = \frac{-2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{n^2} \quad (6.18)$$

Isso conclui nosso trabalho matemático<sup>19</sup>. Conseguimos chegar à expressão da energia associada a cada um dos estados do átomo de hidrogênio, bem como ao valor do raio de cada órbita. Tentemos entender agora como esses resultados explicam as séries de linhas do espectro do hidrogênio. Um “bom sinal” é o termo  $n^2$  presente tanto em (6.18) quanto nas fórmulas de todas as séries.

Conforme sustentam as hipóteses de Bohr, para conhecer o espectro do átomo, é preciso analisar a frequência dos fótons emitidos na transição entre estados estacionários distintos. Suponhamos que o átomo esteja em um estado inicial qualquer, com  $n = n_i$  e  $E = E_i$ . Assumamos ainda que ele transite desse estado para um estado final com menor energia ( $E_f$ ) e  $n = n_f$ . A diferença entre as energias será exatamente a energia do fóton emitido, que, por sua vez, terá uma frequência que pode ser calculada com a ajuda da seguinte fórmula:

$$E_{\text{fóton}} = hf = E_i - E_f \quad (6.19)$$

A Fig. 6.8 traz um esquema da emissão de radiação no modelo de Bohr.



**Figura 6.8:** Emissão de Radiação no Modelo de Bohr

<sup>19</sup> Na realidade, nossos cálculos não são escrupulosamente precisos, pois não levamos em conta o movimento do núcleo do átomo em nossa análise [Ohanian, 1995].

De posse de (6.19), somos capazes de prever as frequências que podem ser emitidas pelo átomo de hidrogênio<sup>20</sup> [Krane, 1983]:

$$f = \frac{E_i - E_f}{h} = -\frac{e^4}{4\pi(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e}{\hbar^3} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = \frac{e^4}{4\pi(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e}{\hbar^3} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), n_f < n_i \quad (6.20)$$

Note o leitor a semelhança entre (6.20) e a expressão de Balmer, ou seja, a equação (6.3):

$$f = \frac{c}{\lambda} = cR \cdot \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = k + 1, k + 2, k + 3, \dots \quad e \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (6.3)$$

Trata-se de uma marcante correspondência entre expressões, o que indica que o modelo de Bohr consegue fornecer uma justificativa teórica para os padrões de linhas que, naquela época, eram a melhor descrição do espectro do átomo de hidrogênio. Além disso, Bohr foi capaz de explicitar uma importantíssima relação entre a constante de Rydberg e algumas grandezas fundamentais [Halliday e Resnick, 1994]:

$$R = \frac{e^4}{4\pi(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e}{c\hbar^3} \quad (6.21)$$

A partir de (6.2), (6.20) e (6.21), vemos que a série de Balmer, por exemplo, é produzida por saltos que levam o elétron de estados com  $n = 3, 4, \dots$  ao estado correspondente a  $n = 2$ . A série de Lyman corresponde a saltos que terminam no estado com  $n = 1$ , e, através de um raciocínio análogo, podemos “gerar” as demais séries. O modelo, portanto, explica o satisfatoriamente o espectro descrito na seção 6.4. É importante destacar que o motivo da existência de raias, e não de um espectro contínuo, é exatamente o fato de a energia dos estados ser quantizada.

O princípio da combinação de Rydberg-Ritz é, de certa forma, uma consequência da simplicidade da fórmula que relaciona a energia do fóton à sua frequência. No exemplo dado (equações (6.4), (6.5) e (6.6)), isso se torna claro: a primeira frequência decorre da transição energética de  $E_3$  para  $E_1$ ; a segunda, de uma transição de  $E_4$  para  $E_3$ . Ora, a soma das “distâncias energéticas” que separam os estados inicial e final dessas transições é igual à variação ocasionada por um salto do estado com energia  $E_4$  para o estado com energia  $E_1$ . Como a energia é proporcional à frequência, tal combinação de energias se espelha em uma combinação de frequências<sup>21</sup>.

Resta ainda falar sobre o espectro de absorção. Ao contrário do espectro de emissão, ele não provém de saltos de estados com maior energia para estados com menor energia, mas sim de estados com menor energia para estados com maior energia. Isso é razoável, uma vez que a absorção corresponde justamente à “aquisição” de energia por parte do

<sup>20</sup> Não confunda o  $f$  de frequência com o índice  $f$ , que quer dizer *final*.

<sup>21</sup> Para melhor visualizar o que ocorre, desenhe um diagrama energético de estados.

átomo, a qual leva o elétron a orbitar numa trajetória mais distante do núcleo. Portanto, quando há absorção,  $n_f > n_i$ , ou seja, o estado final é mais energético que o estado original.

Podemos então pensar: por que os espectros não são idênticos? Como vimos anteriormente, a cada raia do espectro de absorção corresponde uma raia do de emissão, mas o contrário não vale. Qual a razão?

Imaginemos que os átomos de hidrogênio, em sua grande maioria, estejam no estado fundamental  $n = 1$ . Suponha que incida sobre eles um feixe de fótons com várias frequências (nossa luz branca). Alguns átomos, por exemplo, saltarão do estado  $n = 1$  para o  $n = 2$ . No entanto após a transição, o átomo tende a voltar rapidamente para o estado estacionário. Dessa maneira, não deve “haver tempo” para que tenha lugar um salto do estado  $n = 2$  para o estado  $n = 3$ , por exemplo. Conseqüentemente, somos levados a esperar que o espectro de absorção corresponda sempre a transições iniciadas no estado  $n = 1$ , fato que restringe as raias àquelas descritas pela série de Lyman: não devemos esperar raias de outras séries no espectro de absorção. Note que essa explicação depende da suposição básica de que os átomos estejam, originalmente, no estado fundamental. Em condições extremas, como as que podem ser encontradas no interior das estrelas, é possível que haja algumas transições correspondentes a outras séries. No entanto, a regra geral continua inviolável: o espectro de emissão “contém” o de absorção.

## 6.6 – O Átomo e a Mecânica Ondulatória

O modelo de Bohr explica, com grande sucesso, algumas características do hidrogênio. No entanto, não podemos nos eximir de fazer algumas importantes ressalvas.

A primeira delas é que o modelo só apresenta bons resultados quando aplicado ao estudo de átomos com um único elétron, como o hidrogênio e versões ionizadas do hélio ou do lítio, por exemplo. Quando se lida com átomos com múltiplos elétrons, o fracasso é grande.

Outro problema é que o modelo prevê apenas a existência de linhas espectrais individuais. No entanto, uma análise fina mostra que há algumas linhas que, apesar de parecerem únicas, são, na realidade, um agrupamento muito próximo, que recebe o nome de *multiplet*. Não há nada que explique isto no modelo de Bohr.

Outro ponto relevante é que o modelo não prevê a frequência com que os saltos entre estados se realizam. Qual transição é mais freqüente? Qual é a distribuição das transições? São perguntas que permanecem sem resposta...

O modelo de Bohr tem um outro defeito grave do ponto de vista quântico: ele não contém em si nada que nos remeta à idéia de incerteza, nada que traga à mente as propriedades ondulatórias estudadas nos capítulos 4 e 5. Isso é um reflexo do caráter híbrido (clássico-quântico) da proposta<sup>22</sup>.

Diante de tantas limitações, emerge uma pergunta: por que não aplicar a equação de Schrödinger ao átomo? O que teria a nos dizer sobre o assunto a Mecânica Ondulatória? Como vimos no capítulo 5, boa parte da Física envolvida na resolução da equação de Schrödinger jaz na determinação da energia potencial subjacente ao problema enfocado. Consideremos a análise de um átomo de hidrogênio. A energia potencial em função de  $r$  é dada pela equação (6.14):

---

<sup>22</sup> Por uma questão de justiça histórica, é imperativo que o leitor tenha sempre em mente que o modelo de Bohr é anterior às propostas de Heisenberg e Schrödinger.

$$E_p = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.14)$$

O fato de a energia potencial ser uma função de  $r$ , e não de  $x$ ,  $y$  e  $z$ , sugere o emprego de *coordenadas esféricas*. Nessas coordenadas, a função de onda pode ser separada de acordo com um produto de três funções de uma variável [Krane, 1983]:

$$\psi(r, \phi, \theta) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) \quad (6.22)$$

No processo de resolução, surgem três números quânticos: o primeiro,  $n$ , relaciona-se com a função  $R(r)$  e tem papel de destaque na determinação dos níveis de energia do átomo (note a semelhança com os resultados de Bohr); o segundo,  $l$ , responde pela quantização do vetor momento angular  $\mathbf{L}$ ; por fim, o terceiro,  $m_l$ , tem a ver com a quantização de uma das componentes do momento angular [Krane, 1983]. Portanto, cada estado quântico passa a ser definido por três números quânticos, e não por um só, como era o caso no modelo de Bohr. A cada estado corresponde uma função de onda  $\psi_{n, l, m_l}(r, \phi, \theta) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$ , cujo módulo ao quadrado indica a probabilidade de que seja encontrado o elétron numa determinada região do espaço.

Essa “visão ondulatória” contradiz frontalmente a noção de uma órbita perfeitamente determinada, uma idéia-chave no modelo de Bohr. De fato, a posição do elétron em torno do átomo passa a ser descrita apenas pelas probabilidades derivadas da função de onda: não há mais lugar para a imagem de uma partícula clássica que trafega ao redor do núcleo como se fosse um pequeno planeta. A moderna teoria quântica nos faz pensar numa “nuvem de probabilidades”, e isso é o máximo que podemos nos aproximar da noção de órbita.

### **Bibliografia do Capítulo 6:**

[Bohr 1996] **N. Bohr**, *Física Atômica e Conhecimento Humano: Ensaios (1932-1957)*, Contraponto, 1996.

[Born 1986] **M. Born**, *Física Atômica*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1986.

[Eisberg 1961] **R. Eisberg**, *Fundamentals of Modern Physics*, Wiley, 1961.

[Halliday e Resnick 1994] **D. Halliday**, **R. Resnick**, *Fundamentos da Física*, LTC, 1994.

[Heisenberg 1995] **W. Heisenberg**, *Física e Filosofia*, Editora UnB, 1995.

[Krane, 1983] **K. Krane**, *Modern Physics*, Wiley, 1983.

[Ohanian 1995] **H. Ohanian**, *Modern Physics*, Prentice Hall, Second Edition, 1995.

[Serway 1990] **R. Serway**, *Physics for Scientists and Engineers*, Saunders College Publishing, Third Edition, 1990.