



Física Moderna

Humberto Belich Junior

ne@ad

Universidade Aberta do Brasil
Universidade Federal do Espírito Santo

Física
Licenciatura

Escrevo este fascículo com o objetivo de ensinar os conceitos básicos de Física Moderna, e Introdução à Mecânica Quântica. A quantização de radiação eletromagnética, a existência de níveis de energia discretos em átomos, e a natureza dual onda-partícula de partículas e radiação eletromagnética são conceitos básicos que levaram um longo caminho para uma compreensão de uma ampla variedade de fenômenos intrigantes. Nossa intuição dos processos da natureza precisa ser reconfigurada sob as bases destes novos conceitos. A revolução tecnológica que gerou toda uma gama de equipamentos sofisticados, desde um aparelho de DVD até um supercomputador só foi possível graças a aplicação destes conceitos. Não podemos prescindir deste conhecimento, sob pena de ficarmos isolados, e nosso país preso a uma condição de fornecedor de matérias primas. Vamos à luta e bom trabalho!

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Núcleo de Educação Aberta e a Distância

Física Moderna

Humberto Belich Junior

Vitória
2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

Presidente da República

Dilma Rousseff

Ministro da Educação

Aloizio Mercadante

Diretor de Educação a Distância DED/CAPES/MEC

João Carlos Teatini de Souza Climaco

Reitor

Reinaldo Centoducatte

Pró-Reitora de Ensino de Graduação

Maria Auxiliadora Corassa

Diretor Geral do ne@ad

Reinaldo Centoducatte

Coordenadora UAB da UFES

Maria José Campos Rodrigues

Diretora Administrativa do ne@ad

Maria José Campos Rodrigues

Diretor Pedagógico do ne@ad

Julio Francelino Ferreira Filho

Diretor de Centro de Ciências Exatas

Armando Biondo Filho

Coordenador do Curso de Física - EaD

Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando

Revisor de Conteúdo

Carlos Augusto Cardoso Passos

Design Gráfico

LDI - Laboratório de Design Instrucional

ne@ad

Av. Fernando Ferrari, 514

CEP 29075-910, Goiabeiras, Vitória - ES

(27) 4009-2208

Laboratório de Design Instrucional

LDI coordenação

Heliana Pacheco

José Otávio Lobo Name

Ricardo Esteves

Gerência

Samira Bolonha Gomes

Editoração e Capa

Breno Serafini Barboza

Ilustração

Leonardo Amaral

Breno Serafini Barboza

Impressão

Gráfica e Editora GSA

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

B431f Belich Junior, Humberto.
Física moderna / Humberto Belich Junior. - Vitória : UFES, Núcleo
de Educação Aberta e a Distância, 2012.
94 p. : il.

Inclui bibliografia.

ISBN:

1. Física. I. Título.

CDU: 53



Esta licença permite que outros remixem, adaptem e criem a partir deste trabalho, mesmo para fins comerciais, desde que atribuam ao autor o devido crédito e que licenciem as novas criações sob termos idênticos.

A reprodução de imagens nesta obra tem caráter pedagógico e científico, amparada pelos limites do direito de autor, de acordo com a lei nº 9.610/1998, art. 46, III (citação em livros, jornais, revistas ou qualquer outro meio de comunicação, de passagens de qualquer obra, para fins de estudo, crítica ou polêmica, na medida justificada para o fim a atingir, indicando-se o nome do autor e a origem da obra). Toda reprodução foi realizada com amparo legal do regime geral de direito de autor no Brasil.

Apresentação

Prezado aluno,

Escrevo este fascículo com o objetivo de ensinar os conceitos básicos de Física Moderna, e Introdução à Mecânica Quântica. A quantização de radiação eletromagnética, a existência de níveis de energia discretos em átomos, e a natureza dual onda-partícula de partículas e radiação eletromagnética são conceitos básicos que levaram um longo caminho para uma compreensão de uma ampla variedade de fenômenos intrigantes, incluindo o efeito fotoelétrico (emissão de elétrons de uma superfície quando a luz incide sobre ele), o espectro de linhas emitidos por gases, e produção e dispersão de raios X. A análise desses fenômenos e sua relação com a estrutura atômica nos leva ao limite da mecânica quântica, que envolve algumas mudanças radicais em nossa visão da natureza da radiação e da própria matéria. A revolução tecnológica que gerou toda uma gama de equipamentos sofisticados, desde um aparelho de DVD até um supercomputador só foi possível graças a aplicação destes conceitos. Não podemos prescindir deste conhecimento, sob pena de ficarmos isolados, e nosso país preso a uma condição de fornecedor de matérias primas.

O curso de Licenciatura deve fornecer instrumentos para fazer com que ensinar Física implique em situar o aluno nesta incessante busca do conhecimento. Desta forma, além de se evitar que se formem pessoas alienadas do conhecimento científico, podemos atrair alunos para o exercício de ensinar e fazer ciência.

Somente a leitura deste fascículo não é suficiente para um aprendizado satisfatório. Ele deve ser usado como um guia para se aprender os conceitos, e deve ser complementado por listas de exercícios que serão fornecidos, à medida que o curso de vocês avance.

Vamos à luta e bom trabalho!

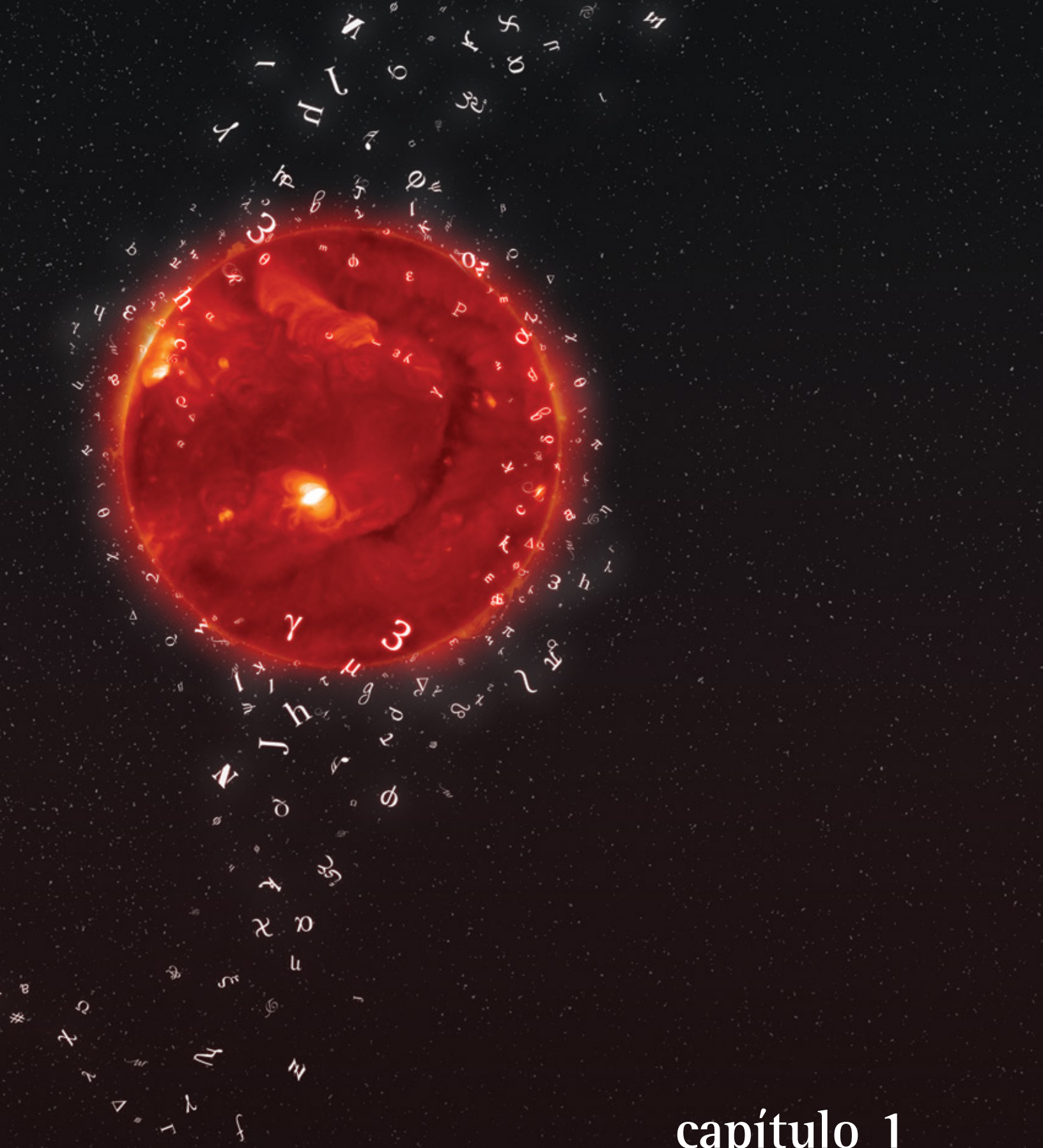
Humberto Belich Junior

Fevereiro de 2012

Sumário

capítulo 1	• Teoria Clássica e a Hipótese de Planck	06
	A natureza da Luz	07
	Equação de Rayleigh-Jeans	10
	Lei de Planck	12
capítulo 2	• Propriedades Corpusculares da Luz	16
	O Efeito Fotoelétrico	17
	Frequência de corte e Potencial de corte	17
	Explicação de Einstein para o Fóton	20
	A Dualidade Onda-Partícula	22
	Difração e Interferência	23
capítulo 3	• Postulados de Broglie e Modelo de Bohr	26
	Dualidade Onda-Partícula	27
	Postulado de De Broglie	28
	O Modelo de Bohr e Ondas de De Broglie	29
	Difração de Elétrons	31
	A Natureza Ondulatória do Elétron	31
	Probabilidade e Incerteza	33
	O Princípio da Incerteza	37
	Incerteza na Energia	38
capítulo 4	• Função de onda e sua interpretação, Átomo de um elétron	40
	A Função de Onda e a Equação de Schrodinger	41
	Interpretação da Função de Onda	42
	Estado Estacionário	43
	A Equação de Schrodinger	44
	Equação de Onda para a Partícula Livre	45
	Partícula em uma caixa	48
	Probabilidade e Normalização	53
	Poço de Potencial	55
	Estados Ligados de um Poço de Potencial Quadrado	56
	Comparando o Poço Quadrado Finito com o Poço Infinito	58

capítulo 5 •	Átomo de um Elétron, Átomos Multieletrônicos e Excitações de Raio X	62
	Estrutura Atômica	63
	O Átomo de Hidrogênio	63
	A equação de Schrodinger para o Átomo de Hidrogênio	64
	Quantização de momento angular orbital	66
	Notação dos Números Quânticos	68
	Distribuições de Probabilidade do Elétron	70
	O spin do Elétron	72
	O experimento de Stern-Gerlach	72
	Uma analogia para o spin do Elétron	73
	Números Quânticos de Spin	74
	Átomos com Muitos Elétrons e o Princípio da Exclusão	76
	A aproximação de Campo Central	77
	O Princípio de Exclusão	78
capítulo 6 •	Sólidos: Condutores, Semicondutores e Supercondutores	80
	Bandas de Energia	81
	Isolantes, semicondutores e condutores	82
	O Elétron em Metais	84
	Densidade de Estados	85
	Distribuição de Fermi-Dirac	86
	Concentração de Elétrons e Energia de Fermi	87
	Energia média de elétrons livres	88
	Supercondutividade	89
	Efeito Meissner	91
	Referências Bibliográficas	94



capítulo 1

Teoria Clássica e a Hipótese de Planck

A natureza da Luz

O físico e engenheiro irlandês William Thomson (Lord Kelvin) em um artigo publicado em 1901 afirma¹: No céu azul da física clássica existem apenas duas nuvens a serem dirimidas... Sendo esta frase vinda de uma versão revisada de um discurso proferido no ano anterior. O título do artigo é: “Nuvens do século dezenove sobre a teoria dinâmica do calor e da luz”. As duas nuvens que o artigo menciona se refere ao que ficou conhecido como o efeito fotoelétrico e a divergência que surge quando se calculava a potência da radiação emitida por um corpo devido a sua temperatura. Para Lord Kelvin se essas duas nuvens se dissipassem, ou seja, se o efeito fotoelétrico e o problema de divergência na radiação de corpo negro fossem resolvidos pelo paradigma da física clássica, a física como um corpo de conhecimento que consegue explicar os fenômenos da natureza estaria fechado. Ocorre que para se explicar esses dois fenômenos foi preciso mudar radicalmente a visão conceitual que o eletromagnetismo clássico havia fornecido à física clássica. Neste capítulo vamos introduzir os conceitos que fornecem possibilidade de se resolver esses dois problemas: a natureza discreta da radiação (corpuscular) e a natureza ondulatória das partículas.

A primeira pista para a natureza quântica da radiação veio do estudo da radiação térmica emitida por corpos aproximadamente negros. Quando a radiação incide sobre um corpo opaco, parte dela é refletida e o restante é absorvido. Corpos de cor clara refletem maior parte da radiação visível incidente sobre eles, enquanto corpos escuros absorvem a maior parte. A parte de absorção do processo pode ser descrita resumidamente da seguinte forma: A radiação absorvida pelo corpo aumenta a energia cinética dos átomos constituintes, que oscilam sobre suas posições de equilíbrio. Desde que a energia cinética média de translação dos átomos determina a temperatura do corpo, a energia absorvida faz com que a temperatura suba. No entanto, os átomos contêm cargas (os elétrons), e estas cargas são aceleradas devido às oscilações. Consequentemente, como exigido pela teoria eletromagnética, os

1. Ver artigo na *Revista Brasileira de Ensino de Física* v. 29, n. 4, p. 509-512, (2007).

átomos emitem radiação eletromagnética, o que reduz a energia cinética das oscilações e tende a reduzir a temperatura. Quando a taxa de absorção é igual à taxa de emissão, a temperatura é constante, e dizemos que o corpo está em equilíbrio térmico com o seu entorno. Um bom absorvedor de radiação é, portanto, também um bom emissor.

A radiação eletromagnética emitida sob essas circunstâncias é chamada radiação térmica. Em temperaturas ordinárias (abaixo de cerca de 600°C) a radiação térmica emitida por um corpo não é visível a olho nú; maior parte da energia está concentrada em comprimentos de onda muito maiores do que os da luz visível. Quando um corpo é aquecido, a quantidade de radiação térmica emitida aumenta, e a energia irradiada se eleva, tornando seus comprimentos de onda mais curtos. Para o intervalo de 600-700°C, há energia suficiente no espectro visível para que o corpo brilhe e se torna um vermelho rubro, e em temperaturas mais altas torna-se vermelho brilhante ou mesmo um “branco quente”.

Um corpo que absorve toda a radiação incidente sobre ele é chamado de um **corpo negro ideal**. Em 1879, Josef Stefan encontrou uma relação empírica entre a potência radiada por um corpo negro ideal e a temperatura:

Equação 1.1

$$R = \sigma T^4$$

Lei de Stefan-Boltzmann

Sendo R a potência radiada por unidade de área, T é a temperatura absoluta, e $\sigma = 5,6703 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ é uma constante chamada constante de Stefan. Este resultado foi também derivado com base em termodinâmica clássica por Ludwig Boltzmann cerca de cinco anos depois, e a **Equação 1.1** é agora chamada a **Lei de Stefan-Boltzmann**. Note que a potência por unidade de área irradiada por um corpo negro depende apenas da temperatura e não de qualquer outra característica do objeto, tais como sua cor ou de que material ele é composto. Note, também, que R nos diz a taxa com que a energia é emitida pelo objeto. Por exemplo, dobrando a temperatura absoluta de um objeto, por exemplo, uma estrela aumenta o fluxo de energia para fora do objeto por um fator de $2^4=16$. Um objeto a temperatura ambiente (300k) terá o dobro da taxa em que irradia energia como resultado de um aumento da temperatura de apenas

57°C. Assim, a lei de Stefan-Boltzmann tem um enorme efeito sobre o estabelecimento do equilíbrio térmico em sistemas físicos.

Objetos, que não são corpos negros, irradiam energia ideal por unidade de área a uma taxa menor do que a de um corpo negro à mesma temperatura. Para os objetos essa taxa independe das propriedades intrínsecas além da temperatura, tais como a cor e composição da superfície. Os efeitos dessas dependências são combinados em um fator chamado emissividade ϵ , que multiplica o lado direito da **Equação 1.1**. Os valores de ϵ dependem da temperatura, e são sempre menores que a unidade.

Como a potência total irradiada R , a distribuição espectral da radiação emitida por um corpo negro encontrado empiricamente, depende apenas da temperatura absoluta T .

A distribuição espectral é determinada experimentalmente como ilustrada na **Figura 1.1**.

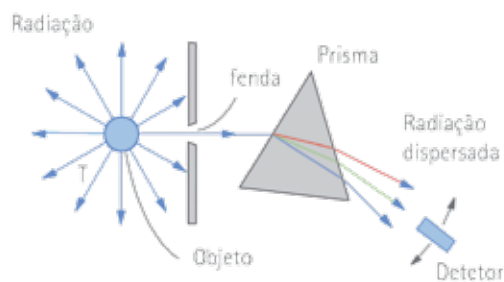


Figura 1.1

Com $R(\lambda)d\lambda$ sendo a potência emitida por unidade de área, com comprimento de onda entre λ e $\lambda+d\lambda$ a figura abaixo mede a função de distribuição espectral $R(\lambda)$ versus λ para valores de T no intervalo de 1000K à 6000K.

A curva $R(\lambda)$ na **Figura 1.2** resalta importante comportamento em diversos aspectos. Por exemplo, o comprimento de onda em que a função tem o seu máximo valor, varia inversamente com a temperatura:

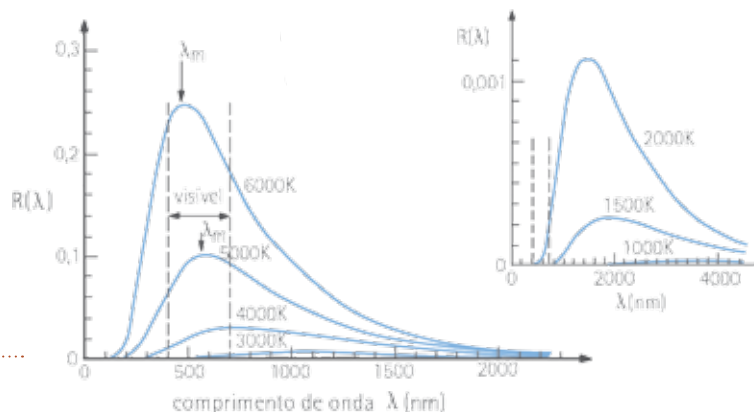
$$\lambda \propto \frac{1}{T} \text{ ou } \lambda_m T = \text{constante} = 2,898 \times 10^{-3} \text{ m.K.} \quad \text{Equação 1.2}$$

Lei de Deslocamento de Wien

Isto é conhecido como a **Lei de Deslocamento de Wien**, descoberto em 1893 por Wien.

Figura 1.2

Função de distribuição espectral medida para diferentes temperaturas.



Equação de Rayleigh-Jeans

Qualquer corpo aquecido a uma determinada temperatura tem a propriedade de emitir radiação. Esta é conhecida como radiação térmica. Seu efeito é sentido quando nos aquecemos em volta de uma fogueira ou quando fazemos um churrasco. Note que para se fazer um bom churrasco precisa-se ter um mínimo de fogo². O ideal seria que a carne fosse preparada usando somente o banho de radiação térmica emitida pelo carvão!

À temperatura ambiente os corpos são visíveis não pela radiação que eles emitem³, mas pela luz refletida. À medida que a temperatura sobe a frequência da radiação térmica aumenta. Então podemos ver a luminosidade própria emitida pelos corpos. Uma lâmpada de filamento ilumina os ambientes por este princípio.

O espectro de radiação térmica emitida por um corpo quente depende da composição deste. Com base nesta propriedade é que afirmamos a composição das estrelas. Um conceito útil para se classificar os corpos segundo o espectro de radiação é o que chamamos de um Corpo Negro. Imagine que podemos encontrar um material que consiga absorver toda a radiação que o atinge. Este corpo teria para nós a aparência de um corpo negro⁴. Tomando medições da temperatura deste corpo ideal, se nós verificarmos que

2. Pois este irá queimar a carne.

3. A radiação térmica emitida possui frequências abaixo do visível.

4. Na natureza sempre os corpos refletem luz, por isto não existe um corpo completamente negro.

ela fica constante ao longo do tempo, então de alguma forma este corpo também emite de volta esta radiação absorvida!

A melhor realização prática de um corpo negro ideal é um pequeno buraco ligado a uma cavidade (como um buraco de fechadura em uma porta de armário (Figura 1.3). Radiação incidente sobre o buraco tem pouca chance de ser refletido de volta para fora do buraco antes que ela seja absorvida pelas paredes da cavidade. A potência irradiada para fora do buraco (R) é proporcional à densidade total de energia (U) (a energia por unidade volume da radiação no interior da cavidade). Apresentamos a equação que relaciona as duas grandezas:

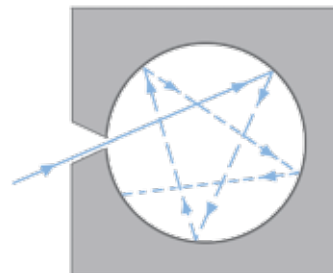


Figura 1.3

$$R = \frac{1}{4} cU. \quad \text{.....} \quad \text{Equação 1.3}$$

Para estabelecer a função de distribuição espectral $R(\lambda)$, seguimos o mesmo raciocínio. Se a porção $u(\lambda)d\lambda$ é a fração da energia por unidade de volume no interior da cavidade entre λ e $\lambda+d\lambda$, a relação entre $R(\lambda)$ e $u(\lambda)$ fica:

$$R(\lambda) = \frac{1}{4cu(\lambda)}. \quad \text{.....} \quad \text{Equação 1.4}$$

A expressão de $u(\lambda)$ pode ser calculada determinando os modos de oscilação do campo eletromagnético na cavidade com comprimento de onda no intervalo entre λ e $\lambda+d\lambda$ e multiplicar o resultado pela energia média por modo. Apresentamos o resultado mostrando que o número de modos de oscilação por unidade de volume, $n(\lambda)$, não depende da forma da cavidade, ou seja,

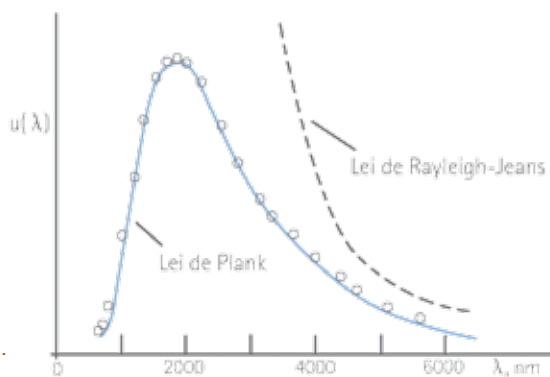
$$n(\lambda) = 8\pi n(\lambda)^{-4}, \quad \text{.....} \quad \text{Equação 1.5}$$

a energia média por modo de oscilação é igual a KT , sendo K a constante de Boltzmann. Então a distribuição espectral de densidade de energia é:

$$u(\lambda) = KTn(\lambda). \quad \text{.....} \quad \text{Equação 1.6}$$

Esta é a chamada **Lei de Rayleigh-Jeans** e está expressa na curva pontilhada do gráfico a seguir.

Figura 1.4



Para grandes comprimentos de onda, a Lei de Rayleigh-Jeans está de acordo com os resultados experimentais, mas para pequenos λ a lei determina que $u(\lambda)$ deveria divergir quando $\lambda \rightarrow 0$, enquanto que os resultados experimentais mostram que $u(\lambda) \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow 0$. Esta discrepância entre o valor teórico e experimental ficou conhecida como **catástrofe do ultravioleta**.

Veja que se calcularmos a integral abaixo usando a lei clássica, isto é, a densidade de energia de qualquer corpo negro deveria ser infinita.

$$\int_0^{\infty} u(\lambda) du(\lambda) \rightarrow \infty.$$

Lei de Planck

O físico alemão Max Planck, em 1900, anunciou que, fazendo suposições estranhas para a época, ele poderia derivar uma função que concordava com os dados experimentais. Ele achou primeiro uma função empírica que se encaixam nos dados e, em seguida, procurou uma maneira de modificar o cálculo usual, de modo a prever a sua fórmula para o fenômeno. Podemos ver o tipo de modificação necessária se levar em conta que, para qualquer cavidade, quanto menor o comprimento de onda, mais ondas estacionárias cabem na cavidade (modos). Portanto, como o número de modos de oscilação se aproxima do infinito, como evidenciado na **Equação 1.5**. Para que a função de distribuição de densidade de energia se

aproxime de zero ($u(\lambda) \rightarrow 0$), esperamos que a energia média por modo a dependa do comprimento de onda λ e que vá a zero quando $\lambda \rightarrow 0$. A esta altura, devemos notar que aqueles pesquisadores que trabalharam no problema da catástrofe ultravioleta (na época havia muitos além de Planck), não tinham uma maneira de saber a priori se o número de modos ou a energia média por modo (ou ambos) era a fonte do problema. Ambos os cálculos estavam corretos classicamente. Muitas tentativas foram feitas para modificar os dois fatores, de modo a resolver o problema. Chegou-se a conclusão, que a energia média por modo (isto é, a teoria cinética), é que era o problema. Classicamente, as ondas eletromagnéticas na cavidade são produzidas pelo movimento oscilatório das cargas elétricas nas paredes da cavidade (vibrando como simples osciladores harmônicos). Lembre-se que a radiação emitida por um oscilador tem a mesma frequência de oscilação que o próprio oscilador. A energia média de um oscilador unidimensional harmônico simples classicamente é calculada a partir da função de distribuição de energia, que por sua vez é encontrada a partir da função distribuição de Maxwell-Boltzmann. A distribuição de energia tem a forma

$$f(E) = A e^{-E/(KT)}, \quad \text{..... Equação 1.7}$$

sendo A constante e $f(E)$ a fração de osciladores com energia entre E e $E+dE$. A energia média fica

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E f(E) dE = \int_0^{\infty} EA e^{-E/(KT)} dE, \quad \text{..... Equação 1.8}$$

e com resultado $\bar{E}=KT$, como foi obtido por Rayleigh.

Planck percebeu que poderia derivar sua fórmula empírica por meio do cálculo da energia média assumindo que a energia das cargas oscilantes e, portanto, a radiação por eles emitida, era uma variável discreta, isto é, que poderia levar apenas valores $0, \epsilon, 2\epsilon, \dots, n\epsilon$, onde n é um inteiro, e ainda, que era proporcional à frequência dos osciladores e, portanto, a da radiação. Planck, assim, escreveu a energia como

$$E_n = n\epsilon = nhf, n = 0, 1, 2, \dots, \quad \text{..... Equação 1.9}$$

sendo h uma constante (constante de Planck).

Podemos reescrever a distribuição de Boltzmann como

Equação 1.10
$$f(E) = A e^{-E_n/(KT)} = A e^{-n\varepsilon/(KT)}.$$

Podemos determinar a constante A impondo normalização da distribuição, ou seja,

Equação 1.11
$$\sum_0^{\infty} f_n = A \sum_0^{\infty} e^{-n\varepsilon/(KT)} = 1.$$

A energia média de um oscilador é então dada por um somatório discreto análogo a integral da [Equação 1.9](#):

Equação 1.12
$$\bar{E} = \sum_0^{\infty} E_n f_n = \sum_0^{\infty} E_n A e^{-\frac{E_n}{KT}}.$$

Calculando a somatória na equação acima:

Equação 1.13
$$\bar{E} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/(KT)} - 1} = \frac{hf}{e^{hf/(KT)} - 1} = \frac{hc/\lambda}{e^{hc/(\lambda KT)} - 1}.$$

Com isto podemos multiplicar este resultado pela [Equação 1.5](#), o número de osciladores por unidade volume no intervalo entre λ e $\lambda+d\lambda$, e obter a distribuição de densidade de energia na cavidade,

Equação 1.14
$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc \lambda^{-5}}{e^{hc/(\lambda KT)} - 1}$$

Chegamos então à famosa [Lei de Planck](#), cuja curva contínua que aparece representado na [Figura 1.4](#). Naquela figura podemos ver diretamente a concordância com os dados experimentais.

Para valores muito grandes de λ usamos a seguinte aproximação: $e^x \approx 1+x$ com $x=(hc)/\lambda KT$, então o termo da exponencial na equação acima fica:

Equação 1.15
$$e^{hc/(\lambda KT)} - 1 \approx \frac{hc}{\lambda KT}$$

e $u(\lambda) \rightarrow 8\pi hc \lambda^{-4} / KT$, e chegamos à fórmula de Rayleigh-Jeans. Para valores muito pequenos de λ podemos desprezar o 1 no denominador da [Equação 1.14](#), o que acarreta: $u(\lambda) \rightarrow 8\pi hc \lambda^{-5} e^{-hc/(\lambda KT)} \rightarrow 0$, quando $\lambda \rightarrow 0$. A lei de Planck também fornece a constante que aparece na lei de deslocamento de Wein.

O valor da constante de Planck h , pode ser determinado ajustando a função gerada pela [Equação 1.14](#) aos valores experimentais. O valor é $h=6,626\times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s} = 4,136\times 10^{-15}\text{eV}\cdot\text{s}$.

A partir de 1905 é que a ideia contida na [Equação 1.9](#) começou a ganhar atenção da comunidade, e Einstein nesse mesmo ano propõe usar esta ideia para explicar o efeito fotoelétrico. Sugeriu que não apenas os osciladores nas paredes da cavidade oscilavam com níveis de excitação discretos, mas a própria radiação eletromagnética era formada por pacotes de energia, ou seja, era quantizada.



capítulo 2

Propriedades Corpusculares da Luz

O Efeito Fotoelétrico

O efeito fotoelétrico é a emissão de elétrons quando a luz atinge uma superfície metálica. Este efeito tem numerosas aplicações práticas. Para escapar da superfície, o elétron deve absorver energia suficiente a partir da radiação incidente para superar a atração de íons positivos no material da superfície. Esta atração prende o elétron numa placa metálica, ou seja, faz com que uma barreira de energia potencial confine os elétrons dentro do material. Pense nesta barreira como sendo um meio-fio que separa a rua de uma calçada. O meio-fio irá manter uma bola de futebol que se move lentamente em uma rua. Mas se a bola é chutada com força suficiente, ela pode rolar para cima da calçada. O trabalho realizado pela atração gravitacional (o ganho em energia potencial gravitacional) é igual a sua perda de energia cinética.

Frequência de Corte e Potencial de Corte

O efeito fotoelétrico foi observado pela primeira vez em 1887 por Heinrich Hertz. Ele percebeu que uma faísca saltaria mais facilmente entre duas esferas eletricamente carregadas quando suas superfícies eram iluminadas pela luz de outra faísca. A luz que incide sobre as superfícies de alguma forma facilitava a fuga daquilo que hoje sabemos serem elétrons. Esta idéia em si não era revolucionária. A existência de uma barreira de potencial na superfície já era conhecida. Em 1883, Thomas Edison tinha descoberto a emissão termiônica. Esta emissão de elétrons ocorre devido ao ganho de energia de escape, que é fornecida pelo aquecimento do material a uma temperatura muito alta. Os elétrons por um processo análogo à de ebulição de um líquido, saltam da superfície metálica. A quantidade mínima de energia que um único elétron tem que ganhar para escapar de uma superfície particular é chamado de função trabalho dessa superfície, denotado por Φ . No entanto, as superfícies que eram utilizadas por Hertz não estavam em altas temperaturas, condição necessária para a emissão termiônica. Então o que faria os elétrons saltarem?

O efeito fotoelétrico foi investigado em detalhes pelos físicos alemães Wilhelm Hallwachs e Philipp Lenard durante o ano 1886-1900; seus resultados foram bastante inesperados. Iremos descrever seu trabalho em termos de dispositivos mais modernos, chamados de válvula fotoelétrica (**Figura 2.1**). Composto de dois eletrodos, o ânodo e o cátodo, são colocados em um tubo de vidro, no qual é feito vácuo. A bateria, ou qualquer outra fonte de diferença de potencial, cria um campo elétrico na direção do anodo para o catodo na **Figura 2.1**. O feixe de luz incide na superfície (indicado pelas setas) do catodo, e provoca uma corrente no circuito externo, a corrente é medida pelo galvanômetro (G). Hallwachs e Lenard estudaram como esta fotocorrente varia com a tensão, frequência e intensidade da luz incidente.

Depois da descoberta do elétron em 1897, tornou-se claro que a luz provocava a emissão de elétrons do cátodo. Por causa de sua carga negativa $-e$, os fotoelétrons emitidos são então empurrados em direção (de volta) ao ânodo pelo campo elétrico. Um alto vácuo com pressão residual de $0,01\text{Pa}(10^{-7}\text{atm})$ ou menos é necessário para minimizar as colisões dos elétrons com as moléculas de gás. Hallwachs e Lenard descobriram que quando a luz monocromática cai no catodo, nenhum fotoelétron era emitido a menos que a frequência da luz fosse maior do que algum valor mínimo, chamado de frequência de corte. Esta mínima frequência depende do material do cátodo. Para a maioria dos metais, a frequência mínima está na região do ultravioleta (correspondente a comprimentos de onda entre 200 e 300nm), mas para os óxidos de potássio e cério (por exemplo) está no espectro visível λ entre 400 e 700nm).

Quando a frequência f é maior que a frequência mínima, alguns elétrons são emitidos pelo cátodo com altas velocidades iniciais. Isto pode ser demonstrado invertendo a polaridade da bateria (**Figura 2.1**), de modo que a força gerada pelo campo elétrico sobre os elétrons está voltada em direção ao cátodo. Se a magnitude do campo não é muito grande, os elétrons de maior energia emitida ainda alcançam o ânodo e há ainda uma corrente. Podemos determinar a energia cinética máxima dos elétrons emitidos invertendo os pólos da bateria, ou seja, fazendo o potencial da relação anodo-catodo, negativa o suficiente para que a corrente elétrica páre. Isso

ocorre para $V_{AC} = -V_0$, sendo V_0 chamado de potencial de corte. Um elétron que se move do cátodo para o anodo, tem a sua energia diminuída por uma quantidade $-eV_0$ (trabalho realizado sobre o elétron); o elétron mais energético deixa o cátodo com energia cinética $K_{\max} = \frac{1}{2}m(v_{\max})^2$ (energia cinética máxima do fotoelétron) e chega com energia cinética nula no ânodo. Usando o teorema do trabalho-energia temos:

$$W_{\text{total}} = -eV_0 = \Delta K = 0 - K_{\max}$$

$$K_{\max} = \frac{1}{2}m(v_{\max})^2 = eV_0$$

Equação 2.1

Então medindo V_0 determinamos a energia cinética máxima de um elétron que deixa o cátodo.

A **Figura 2.2** mostra um gráfico da diferença de potencial V_{AC} para dois feixes de luz de mesma frequência e intensidades diferentes. Quando V_{AC} é mais intenso e positivo as curvas assumem um valor constante, demonstrando que todos os elétrons emitidos são coletados pelo anodo. Ao se inverter o potencial observa-se que as correntes vão a zero para um mesmo valor $-V_0$.

Se intensidade da luz aumenta, com a frequência da luz permanecendo constante, as curvas ficam constantes (proporcionais as intensidades). Contudo as curvas zeram no mesmo potencial.

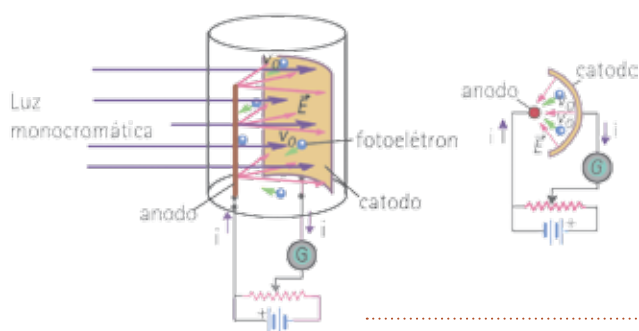
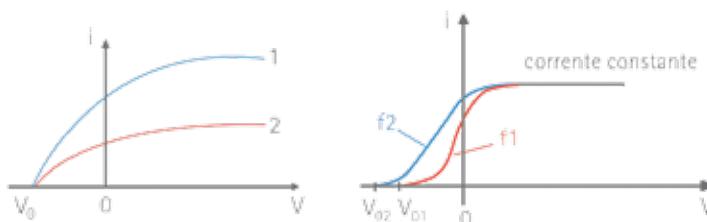


Figura 2.1

As figuras a seguir mostram a corrente fotoelétrica em função da diferença de potencial para os dois feixes de luz em duas situações diferentes: **a)** Na **Figura 2.2** temos dois feixes de luz de mesma frequência incidindo, sendo que a intensidade do feixe 1 é o dobro da intensidade do feixe 2; **b)** Na **Figura 2.3** temos dois feixes de luz com frequências distintas e mesma intensidade.

Figuras 2.2 e 2.3



Explicação de Einstein para o Fóton

Estes resultados são difíceis de entender com os conceitos da física clássica. Quando a intensidade (energia média por unidade de área por unidade de tempo) aumenta, os elétrons devem ganhar mais energia, aumentando o potencial de corte V_0 . Mas verificou-se que o potencial de corte não depende da intensidade. Além disso, física clássica não oferece nenhuma explicação para a frequência mínima. No capítulo 1 descobrimos que a intensidade de uma onda eletromagnética, como a luz, não depende da frequência, por isso um elétron deveria ser ejetado da superfície absorvendo luz de qualquer frequência. Assim, segundo a física clássica, não deve haver uma frequência limite de corte f_0 . Finalmente, pelos conceitos clássicos, se deveria esperar que o elétron demore algum tempo absorvendo energia, até acumular o suficiente para ser ejetado. Mas o que se observa é uma ejeção imediata quando a superfície é iluminada. Então a experiência mostra que os elétrons são emitidos assim que qualquer feixe de luz com $f \geq f_0$ incida sobre a superfície metálica. A análise correta do efeito fotoelétrico foi desenvolvida por Albert Einstein em 1905. Partindo de uma suposição feita cinco anos antes por Max Planck. Einstein postulou que um feixe de luz é composto de pequenas embalagens de energia chamados fótons, ou quanta. E a energia de um fóton é igual a uma constante f (sua frequência) vezes h . De acordo com $f = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow fh = \frac{c}{\lambda} h$, temos:

Equação 2.2

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda},$$

sendo h a constante de Planck.

Um fóton que chega à superfície é absorvido por um elétron. Esta transferência de energia é um processo discreto, ou seja, o fó-

ton é absorvido e imediatamente o elétron salta, em contraste com a contínua transferência de energia prevista pela teoria clássica; portanto o elétron recebe toda a energia do fóton ou nenhuma. Se esta energia é maior do que a função de trabalho ϕ_0 , o elétron pode escapar da superfície. Uma maior intensidade em uma mesma frequência particular significa uma proporção maior do número de fótons absorvidos por segundo, e assim um proporcionalmente maior número de elétrons emitidos por segundo, e a corrente proporcionalmente é maior, como é visto na **Figura 2.2**. Lembre-se que ϕ é a energia mínima necessária para remover um elétron da superfície. Einstein aplicou a lei de conservação de energia e mostrou que a energia cinética máxima $K_{\max} = \frac{1}{2}m(v_{\max})^2$ de um elétron emitido é dada pela diferença entre a função trabalho ϕ e a energia hf que o elétron ganhou absorvendo o fóton:

$$K_{\max} = \frac{1}{2}m(v_{\max})^2 = hf - \phi \quad \text{..... Equação 2.3}$$

Substituindo a **Equação 2.1** na relação acima ficamos com

$$eV_0 = hf - \phi. \quad \text{..... Equação 2.4}$$

Efeito fotoelétrico

Podemos medir o potencial de corte V_0 para diversos materiais. Organizando estas medições em um gráfico, observamos uma dependência linear do potencial de corte em função da frequência:

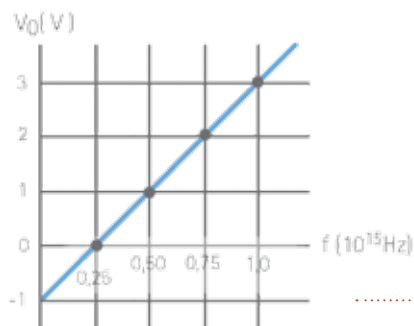


Figura 2.4

que confirma a **Equação 2.4** e, a partir deste gráfico, podemos determinar tanto a função trabalho ϕ quanto h/e . Depois que a carga elétrica foi medida por Robert Millikan em 1909, a constante de Planck também foi estimada a partir dessas medidas.

A função trabalho e as energias dos elétrons são dadas em elétrons-volt. Para converter em unidades de energia do Sistema Internacional usamos:

$$1\text{eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}.$$

Elemento	Função trabalho (eV)
Aluminio	4,3
Cobre	4,7
Níquel	5,1
Ouro	5,1
Prata	4,3
Silício	4,8
Sódio	2,7

Tabela 2.1

Função trabalho para alguns elementos químicos.

A Dualidade Onda-Partícula

Estudamos muitos exemplos do comportamento da luz e outros de radiação eletromagnética. Alguns, incluindo os efeitos de interferência e difração, demonstram conclusivamente a natureza ondulatória da luz. Outros, assunto do presente capítulo, mostram com igual clareza a natureza das partículas de luz. À primeira vista estes dois aspectos parecem estar em conflito direto. Como pode a luz ser uma onda e uma partícula ao mesmo tempo?

Podemos encontrar a resposta para esse conflito aparente onda-partícula no princípio de complementaridade, exposto pela primeira vez por Niels Bohr em 1928. As descrições de onda e as descrições de partículas são complementares. Ou seja, precisamos das duas descrições para completar o nosso modelo de natureza, mas nunca vamos precisar usar estes dois aspectos ao mesmo tempo. Ora usamos aspecto ondulatório, ora usamos o corpuscular para descrever uma determinada ocorrência.

Difração e Interferência

Vamos começar por considerar novamente o padrão de difração de uma fenda única. Em vez de gravar a imagem da figura de difração em uma placa fotográfica, usamos um detector chamado fotomultiplicador que pode realmente detectar fótons individuais. Usando a configuração mostrada na [Figura 2.5](#), colocamos o detector em várias posições para intervalos de tempo iguais. Contamos os fótons que chegam em cada posição, e fazemos um gráfico da distribuição de intensidade. Nós achamos que, em média, a distribuição de fótons concorda com as nossas previsões. Em pontos correspondentes aos valores máximos do padrão de difração, contamos muitos fótons; em pontos mínimos, contamos quase nenhum, e assim por diante. O gráfico da contagem em vários pontos nos dá o padrão de difração conhecido quando estudamos ótica física. Mas suponha que agora reduzimos a intensidade até o ponto em que apenas alguns fótons por segundo passam através da fenda. Com apenas alguns fótons não podemos esperar obter a curva de difração nítida que encontramos com números muito grande de fótons. Na verdade, não há como prever exatamente onde qualquer fóton individual irá colidir. Para conciliar os aspectos de onda e partícula deste padrão, temos a considerar o padrão como uma distribuição estatística que nos diz quantos fótons, em média, atingem vários locais, ou a probabilidade de um fóton individual atinja cada um dos vários locais. Mas não podemos prever exatamente onde um fóton individual irá cair.

Agora vamos dar uma breve discutida em uma interpretação quântica da experiência de fenda dupla. Podemos usar novamente o padrão usando um fotomultiplicador e um contador. Nós reduzimos a intensidade da luz a um nível de alguns fótons por segundo ([Figuras 2.5 e 2.6](#)). Novamente não podemos prever exatamente onde um fóton individual vai cair; o padrão de interferência é uma distribuição estatística.

Como é que o princípio da complementaridade se aplica a esses experimentos de difração e de interferência? A descrição de ondas, não a descrição de partículas, explica os padrões fenda simples e fenda dupla. Mas a descrição de partículas, e não a descrição das

ondas, explica por que o fotomultiplicador mede o padrão construído por pacotes discretos de energia. As duas descrições completam nossa compreensão dos resultados. Nestes experimentos, a luz passa por uma fenda ou fendas, e os fótons são detectado em várias posições em uma tela. Suponha que um aluno faça a seguinte pergunta: “**Nós acabamos de detectar um fóton em uma determinada posição, quando o fóton passou pela fenda, como é que ele sabe que caminho deveria seguir?**”. O problema com a questão é que ela é formulada como se a luz se propagasse como partículas.

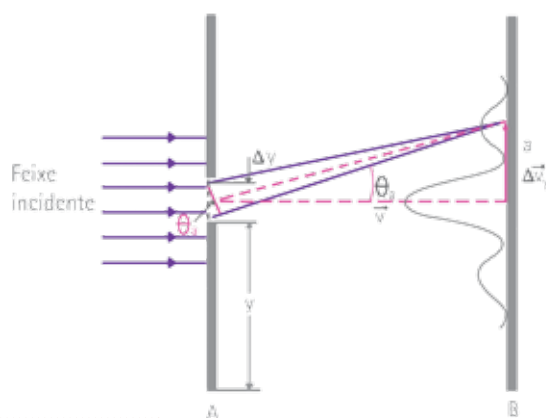


Figura 2.5

A natureza ondulatória da luz, não a natureza das partículas, determina a distribuição de fótons. Fazer essa pergunta é forçar uma descrição de partícula (o fóton tendo uma trajetória pré-determinada) em um fenômeno de ondulatório (a formação do padrão sob a tela). A natureza de partícula da luz se manifesta quando o fóton incidente é imediatamente absorvido e impressiona a tela.

Após 23 fótons atingirem a tela.



Após 1.000 fótons atingirem a tela.



Após 10.000 fótons atingirem a tela.



Figura 2.6

Nos capítulos seguintes, vamos descobrir que partículas como elétrons também têm uma natureza dual onda-partícula. Uma das grandes conquistas da mecânica quântica tem sido o de conciliar esses aspectos aparentemente incompatíveis de comportamento de fótons, elétrons e outros constituintes da matéria.



capítulo 3

Postulados de Broglie e Modelo de Bohr

Dualidade Onda-Partícula

Até agora vimos um aspecto da dualidade da natureza onda-partícula: radiações eletromagnéticas às vezes agem como ondas e algumas vezes como partículas. Interferência e difração demonstram um comportamento ondulatório, enquanto que a emissão e absorção de fótons demonstram comportamento de partículas. Estamos em busca de uma teoria completa que deve também ser capaz de prever, em termos teóricos, os níveis de energia de qualquer átomo particular. Em 1913 modelo de Bohr do átomo de hidrogênio foi um passo importante nessa direção. Porém este modelo mesclava princípios clássicos com novas ideias que eram inconsistentes com a teoria clássica, e levantou tantas questões quanto as respondidas pelo modelo. Para entender os fenômenos microscópicos sem cair em contradição era preciso abrir mão de conceitos clássicos, e fazer mudanças drásticas na nossa visão conceitual da Física.

Uma iniciativa drástica bem sucedida foi a mecânica quântica: uma teoria que começou a emergir na década de 1920. Além de ondas que às vezes agem como partículas, a mecânica quântica estende o conceito de dualidade onda-partícula para incluir partículas que às vezes mostram um comportamento ondulatório. Nestas situações uma partícula é imaginada não como um ponto, com posição e velocidade definidas, mas como uma nuvem de probabilidades, cujo valor médio recupera a informação macroscópica da posição e velocidade. Neste capítulo, vamos explorar a natureza ondulatória da matéria e algumas de suas aplicações. Vamos também introduzir a equação de Schrödinger, que é tão fundamental para a mecânica quântica como as leis de Newton são para a mecânica ou como Equações de Maxwell são ao eletromagnetismo. No capítulo 4, veremos como usar esta equação para encontrar os níveis de energia possível de um sistema de mecânica quântica. A mecânica quântica é a chave para a compreensão de átomos e moléculas, incluindo sua estrutura, espectros, comportamento químico, e muitas outras propriedades. Tem o mérito de restaurar a unidade e simetria à nossa descrição das partículas e radiação. Vamos aprender sobre a nova descrição de partículas e radiação, dados pela mecânica quântica e usar seus resultados.

Postulado de De Broglie

Um grande avanço na compreensão da estrutura atômica começou em 1924 com uma proposição feita por um físico francês e nobre, o príncipe Louis de Broglie. Seu raciocínio foi, mais ou menos, assim: a Natureza ama simetria. A Luz tem comportamento dual, comportando-se em algumas situações como ondas e em outros como partículas. Se a natureza é simétrica, esta dualidade também deveria ser válida para a matéria. Elétrons e prótons, o que nós pensamos como partículas, podem, em algumas situações se comportar como ondas. Se uma partícula age como uma onda, ele deve ter um comprimento de onda e uma frequência. De Broglie (Figura 3.1) postulou que uma partícula livre com massa de repouso m , movendo-se com velocidade \vec{v} não-relativística, deve ter um comprimento de onda λ associado a seu momento $p = |\vec{p}| = m|\vec{v}|$ exatamente da mesma forma que para um fóton, como expresso pela equação: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$. O comprimento de onda de Broglie de uma partícula é, então,

Equação 3.1

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv},$$

sendo h a constante de Planck. A frequência f , de acordo com de Broglie, está também relacionado com a energia E da partícula da mesma forma como para um fóton, ou seja,

Equação 3.2

$$E = hf.$$

Assim, as relações entre comprimento de onda e momento linear; e frequência e energia, de acordo com a hipótese de Broglie, são exatamente as mesmas, tanto para as partículas como para ondas.

Para apreciar o enorme significado da proposta de Broglie, temos que perceber que no momento não havia nenhuma evidência experimental direta que as partículas possuíssem características de onda. Uma coisa é sugerir uma nova hipótese para explicar observações experimentais, e outra bem diferente é propor uma radical saída a partir de conceitos estabelecidos somente em bases teóricas. Mas ficou claro que uma idéia radical era necessária. A natureza dual da radiação eletromagnética levou a adoção do conceito de

fóton, que também é uma idéia radical. O sucesso limitado em descrever a estrutura atômica indicava que uma revolução semelhante era necessária na mecânica de partículas.

A Hipótese de Broglie foi o início dessa revolução. Após 1924, foi desenvolvido por Heisenberg, Schrödinger, Dirac, Born, e muitos outros uma teoria detalhada chamada de mecânica quântica. Este desenvolvimento estava bem encaminhado antes mesmo de serem encontradas evidências experimentais diretas das propriedades ondulatórias das partículas. A mecânica quântica envolve revisões radicais de nossos conceitos fundamentais de descrição da matéria. Uma partícula não é um ponto geométrico, mas uma entidade que tende a espalhar-se no espaço. A distribuição espacial de uma partícula é definida por uma função chamada função de onda, que é análoga às funções de onda que são usadas para ondas mecânicas, e para as ondas eletromagnéticas. A função de onda para partícula livre com uma energia definida, tem valores bem definidos de comprimento de onda e frequência. A descrição corpuscular ondulatória não são incompatíveis. O princípio da complementaridade, que discutimos no final do capítulo 3, nos diz que precisamos tanto do modelo de partícula e onda para uma descrição completa da natureza.

O Modelo de Bohr e Ondas de De Broglie

No modelo de Bohr, descreve-se os níveis de energia do átomo de hidrogênio, em termos de órbitas fixas de elétrons. Esta é uma simplificação exagerada e não deve ser tomado literalmente. Mas a ideia mais importante na teoria de Bohr foi a existência de níveis discretos de energia e sua relação com as frequências de fótons emitidos. A nova mecânica quântica ainda atribui certos estados de energia de um átomo com uma descrição mais geral do movimento do elétron em termos de funções de onda. No átomo de hidrogênio os níveis de energia preditos pela mecânica quântica acabam por ser as mesmas dadas pelo modelo de Bohr. Em átomos mais complicados, para a qual a teoria de Bohr não funciona, as previsões da mecânica quântica estão em excelente concordância com a observação.

A hipótese de onda de De Broglie tem uma relação interessante com o modelo de Bohr. Podemos usar a **Equação 3.1** para obter a condição de Bohr que o momento angular $|\vec{L}| = m|\vec{v}||\vec{r}|$ deve ser um múltiplo inteiro da constante de Planck h . O método é análogo ao de se determinar as frequências dos modos normais de vibração de ondas estacionárias. Por exemplo, as ondas estacionárias de uma corda vibrante com extremidades fixas, as extremidades são sempre nós, e devem existir nós adicionais ao longo da corda para todos os modos normais, exceto no modo fundamental. Para as condições de contorno serem satisfeitas, o comprimento total da corda deve ser igual a um número inteiro multiplicado pela metade do comprimento de onda.

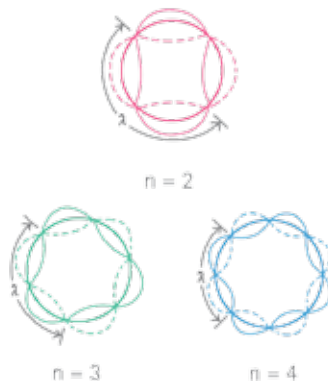


Figura 3.1

A onda estacionária em uma corda não transmite energia, e os elétrons em órbitas de Bohr não irradiam energia. Então, imagine que o elétron seja uma onda estacionária distribuída ao longo de uma órbita circular de Bohr. Para que essa onda seja contida exatamente e se feche de modo contínuo na órbita, a circunferência deve conter um número inteiro de comprimentos de onda, como sugerido pela **Figura 3.1**. Para uma órbita de raio r e circunferência $2\pi r$, devemos ter $2\pi r = n\lambda$, onde $n=1,2,3,\dots$. De acordo com a relação de Broglie, Equação 3.1, o comprimento de onda de uma partícula com massa m , movendo-se com velocidade não-relativística v , é $\lambda = h/mv$. Combinando $2\pi r = n\lambda$ com $\lambda = h/mv$, encontramos $2\pi r = nh/mv$, ou seja,

Equação 3.3

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}.$$

A **Equação 3.3** foi postulada por Bohr: a magnitude do momento angular $|\vec{L}| = m|\vec{v}||\vec{r}|$ deve ser igual a um inteiro n vezes $h/2\pi$. Assim, uma imagem de ondas mecânicas leva naturalmente à quantização do momento angular do elétron.

A idéia de montar de uma onda estacionária em torno de uma órbita circular é uma noção um pouco vaga. Mas o acordo da **Equação 3.3**, com os resultados do modelo de Bohr é muito importante para ser uma coincidência. Ele sugere fortemente que as propriedades das ondas de elétrons têm realmente algo a ver com a estrutura atômica. Mais tarde vamos aprender como as funções de onda para sistemas específicos são determinados por solução de uma equação

de onda chamada de equação de Schrödinger. Condições de contorno desempenham um papel central na busca de soluções desta equação e, assim, na determinação de níveis de energia possíveis, dos valores do momento angular, e outras propriedades.

Difração de Elétrons

A Hipótese de ondas de De Broglie, embora parecesse radical, quase de imediato recebeu a confirmação experimental. A primeira evidência direta envolveu um experimento de difração de elétrons que foi análogo aos experimentos de difração de raios X. Nesses experimentos, os átomos em um cristal atuam como uma rede de difração tridimensional para os raios X. Um feixe de raios X é fortemente espalhado quando atinge um cristal em um ângulo que dá interferência construtiva entre as ondas espalhadas a partir dos átomos diferentes no cristal. Esses efeitos de interferência demonstram a natureza de onda dos raios X.

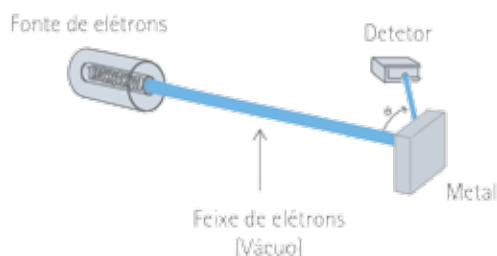


Figura 3.2

A Natureza Ondulatória do Elétron

Clinton Davisson e Lester Genner, em 1927, trabalhando no Bell Telephone Laboratório, estavam estudando a superfície de um pedaço de níquel, direcionando um feixe de elétrons na superfície e observando quantos elétrons ricocheteavam da amostra. A **Figura 3.2** mostra uma configuração experimental como a que eles usaram. A amostra era policristalina, com os microcristais orientados de maneira aleatória. Como em muitos metais esses cristais microscópicos eram unidos com orientações aleatórias.

Os experimentadores que realizam o experimento concordavam que, mesmo em superfície a mais suave possível que se pudesse construir, ainda um feixe de elétrons seria refletido difusamente, com um suave distribuição de intensidade em função do ângulo θ .

Durante o experimento ocorreu um acidente que fez com que o ar entrasse no recipiente, e uma película de óxido foi formada na superfície do metal. Para remover este filme, Davisson e Germer aqueceram a amostra em um forno de alta temperatura, quase quente o suficiente para derretê-la. Isto provocou um comportamento inusitado no material: teve o efeito de criar grandes regiões de cristal único, com planos cristalinos dispostos paralelamente em regiões mono-cristalinas. Quando as observações foram repetidas, os resultados foram bastante inesperados.

Os máximos na intensidade do feixe de elétrons refletido ocorreu em ângulos específicos (Figura 3.3a), em contraste com a variação suave de intensidade com ângulo que Davisson e Genner tinha observado antes do acidente. As posições angulares do máximo dependiam da tensão V_{ba} usada para produzir o feixe eletrônico. Davisson e Genner estavam familiarizados com a hipótese de Broglie, e notaram a semelhança deste comportamento com o observado na difração de raios X. Este não foi o efeito que eles estavam procurando, mas imediatamente reconheceram que o feixe de elétrons estava sendo difratado. Eles haviam descoberto uma muito direta confirmação experimental da hipótese de onda.

Davisson e Genner poderiam determinar a velocidade dos elétrons a partir da voltagem, para que pudessem calcular o comprimento de onda de De Broglie usando a Equação 3.1. Os elétrons foram espalhados principalmente pelos planos de átomos na superfície do cristal. Átomos em regiões de mono-cristais são dispostos em fileiras, com uma distância d que pode ser medida por técnicas de difração de raios X. Estas linhas agem como uma grade de difração refletindo os elétrons. Os ângulos em que a reflexão forte ocorre são os mesmos para uma rede de difração com uma distância d entre suas fendas (Figura 3.3b). De acordo com a equação de difração de raio X (Bragg), os ângulos de reflexão máximo são dada por $d \sin \theta = m \lambda$ ($m=1,2,3,\dots$), sendo θ o ângulo mostrado na Figura. 3.2. Os ângulos previsto por esta equação,

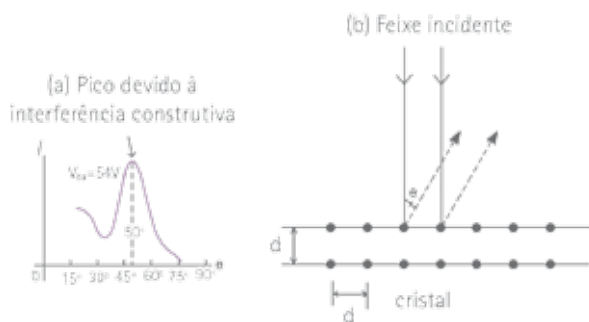
usando o comprimento de onda de Broglie, foram verificados experimentalmente, concordando com os valores observados (Figura 3.3a). Assim, a descoberta acidental de difração de elétrons foi a primeira evidência direta a confirmar a hipótese de Broglie.

O comprimento de onda de Broglie de uma partícula não-relativística é $\lambda = h/p = h/mv$. Podemos também expressar λ em termos de energia cinética da partícula. Por exemplo, considere um elétron livre acelerado do repouso de um ponto a até um ponto b através de uma d.d.p. $V_b - V_a = V_{ba}$. O trabalho, eV_{ba} , realizado sobre o elétron é igual a sua energia cinética \bar{K} . Como $K = \frac{p^2}{2m}$, temos:

$$eV_{ba} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2meV_{ba}} \quad \text{..... Equação 3.4}$$

O comprimento de onda de de Broglie para o elétron é dado por:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV_{ba}}} \quad \text{..... Equação 3.5}$$



..... Figura 3.3

Probabilidade e Incerteza

A descoberta da dualidade onda-partícula da matéria obrigou-nos a reavaliar a linguagem cinemática que usamos para descrever a posição e o movimento de uma partícula. Na mecânica clássica de Newton podemos descrever uma partícula como um ponto. Podemos descrever sua localização e estado de movimento em qualquer instante com três coordenadas espaciais e três componentes da velocidade. Mas, em geral essa descrição específica não é possível.

Quando olhamos em uma escala pequena o suficiente, existem limitações fundamentais em que a precisão com que podemos determinar a posição e a velocidade de uma partícula se torna impraticável. Muitos aspectos do comportamento de uma partícula pode ser indicado apenas em termos de probabilidades.

Para tentar obter alguma familiaridade sobre a natureza do problema, vamos ver a difração de fenda única da luz. Suponha que o comprimento de onda λ é muito menor do que a largura “a” da fenda. Então a maior parte (85%) da luz na figura de difração está concentrada no máximo central, limitado em ambos os lados pelo primeiro mínimo de intensidade. Usamos θ_1 para denotar o ângulo entre o máximo central e o primeiro mínimo. Usando a equação de difração $\sin \theta_m = \frac{m\lambda}{a}$ ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$) com $m=1$ vemos que θ_1 é dada por $\sin \theta_1 = \frac{\lambda}{a}$. Uma vez que assumimos $\lambda \ll a$, segue-se que θ_1 é muito pequeno, e $\sin \theta_1$ é quase igual θ_1 (em radianos), então

Equação 3.6

$$\theta_1 = \frac{\lambda}{a}.$$

Agora nós realizamos o mesmo experimento novamente, mas usando um feixe de elétrons em vez de um feixe de luz monocromática (Figura 3.4). Temos que fazer o experimento no vácuo (10^{-7} atm ou menos) para que os elétrons não sejam desviados pelas colisões com moléculas de ar. Nós podemos produzir o feixe de elétrons com uma configuração semelhante, em princípio, a um canhão de elétrons em um tubo de raios catódicos. Isto produz um feixe estreito de elétrons, em que todos têm quase a mesma direção e velocidade e, portanto, também o mesmo comprimento de onda de Broglie.

O resultado deste experimento, é gravado em película fotográfica. É uma figura de difração idêntica a mostrada na Figura 3.4. Este padrão nos dá evidência direta da natureza ondulatória dos elétrons. Cerca de 85% dos elétrons incidentes atingem o filme dentro do máximo central; o restante dos elétrons formam os máximos secundários próximos ao máximo central.

Se acreditarmos que os elétrons são ondas, o comportamento de onda neste experimento não é surpreendente. Mas se tentarmos interpretá-los em termos de partículas, nos deparamos com pro-

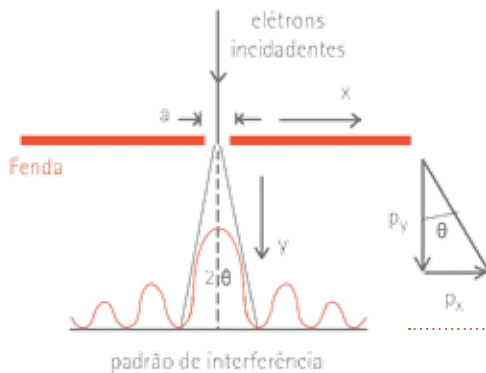
blemas sérios. Primeiro, os elétrons não seguem o mesmo caminho, apesar de todos eles terem o mesmo estado inicial do movimento. Na verdade, não podemos prever a exata trajetória de qualquer elétron individual, mesmo conhecendo seu estado inicial. O melhor que podemos fazer é dizer que a maioria dos elétrons vão para uma determinada região, menos elétrons irão para outras regiões, e assim por diante. Ou seja, só podemos descrever a probabilidade de que um elétron individual vai atingir cada uma das diversas áreas sobre o filme. Essa indeterminação fundamental não tem contrapartida na mecânica newtoniana, pois o movimento de uma partícula pode ser sempre assim previsto, se sabemos a posição inicial e movimento com uma precisão suficiente (determinismo newtoniano).

Segundo, há incertezas fundamentais tanto na posição e momento de uma partícula individual, e estas duas incertezas estão relacionadas de maneira inseparável. Para esclarecer este ponto, vamos voltar a **Figura 3.4**. Um elétron que atinge o filme na borda exterior do máximo central, em um ângulo igual a θ_1 deve ter um componente p_y de momentona direção y , bem como uma componente p_x na direção x , apesar do fato de que, inicialmente, os elétrons partiram e viajaram ao longo do eixo- x . Pela geometria da situação as duas componentes estão relacionados por $p_x/p_y = \tan\theta_1$. Como θ_1 é pequeno, podemos usar a aproximação $\frac{p_x}{p_y} = \tan\theta_1$ e $\tan\theta_1 = \theta_1$.

$$p_x = p_y \theta_1 \quad \text{..... Equação 3.7}$$

Combinando essa equação com a **Equação 3.6**, temos:

$$p_x = p_y \frac{\lambda}{a} \quad \text{..... Equação 3.8}$$



..... Figura 3.4

Para 85% dos elétrons que atingem o filme dentro do máximo central (que fica entre ângulos $-\frac{\lambda}{a}$ e $+\frac{\lambda}{a}$), vemos que a componente x do momentum linear se espalha para fora do centro desde $-p_y \frac{\lambda}{a}$ até $+p_y \frac{\lambda}{a}$. Agora vamos considerar todos os elétrons que passam através da fenda e atingem o filme. Novamente, eles podem bater em regiões acima ou abaixo do centro da figura de difração, de modo que suas componentes p_y podem ser positivas ou negativas. No entanto, a simetria da figura de difração nos mostra que a média dos valores de $(p_x)_{\text{med}} = 0$. Haverá uma incerteza Δp_x na componente x do momento linear no mínimo igual a $p_y \frac{\lambda}{a}$, isto é,

Equação 3.9

$$\Delta p_x \geq p_y \frac{\lambda}{a}.$$

Quanto mais estreita for a largura da fenda, o mais ampla é a figura de difração e maior é a incerteza na componente x do momento (Δp_x).

O comprimento de onda λ do elétron está relacionado com o momento $p_y = mv_y$ pela relação de Broglie (Equação 3.1), que podemos reescrever como $\lambda = \frac{h}{p}$. Usando esta relação na Equação 3.9 e simplificando, encontramos

Equação 3.10

$$\Delta p_x \geq p_y \frac{h}{p_y a} = \frac{h}{a}, \Delta p_x a \geq h.$$

O que significa esse resultado significa? A largura da fenda representa uma incerteza na componente x da posição de um elétron que passa através da fenda. Nós não sabemos exatamente onde cada partícula passa na fenda. Assim, tanto a posição x quanto a componente x do momento têm incertezas, e ambas incertezas estão relacionadas pela Equação 3.10. Podemos diminuir a incerteza Δp_x só reduzindo a largura da figura de difração. Para fazer isso, nós temos que aumentar a largura de fenda, o que aumenta a incerteza de posição. Por outro lado, quando diminuimos a incerteza da posição pelo estreitamento da fenda, a figura padrão de difração amplia-se e a incerteza do momento correspondente aumenta.

Você pode protestar dizendo que não parece ser consistente

com o senso comum uma partícula não ter uma posição e momento definidos. Nós respondemos que o que nosso senso comum se baseia no conhecimento adquirido através das experiências do dia a dia. Nossa experiência usual tem muito pouco contato com o comportamento de partículas microscópicas.

Às vezes temos que aceitar as conclusões que violam nossa intuição quando estamos lidando com as situações que estão muito distantes da experiência cotidiana.

O Princípio da Incerteza

Em discussões mais gerais sobre relações de incerteza, a incerteza de uma determinada quantidade é geralmente descrita em termos do conceito estatístico de desvio-padrão, que é uma medida da dispersão ou dispersão de um conjunto de números em torno de seu valor médio. Suponha que agora começamos a descrever as incertezas desta forma (na [Equação 3.10](#) nem a , nem Δp_x , são desvios-padrão). Se uma coordenada x tem uma incerteza Δx , e se o componente correspondente de momento p_x tem uma incerteza Δp_x então esses desvios-padrão estão relacionados em geral pela desigualdade

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar. \quad \text{Equação 3.11}$$

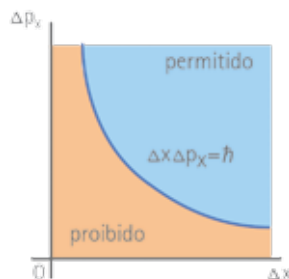
Nessa expressão a h cortado (\hbar) é a constante de Planck dividida por 2π :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{Equação 3.12}$$

Nós vamos usar essa quantidade com frequência para evitar escrever um monte de fatores de 2π mais tarde nas equações. A [Equação 3.11](#) é uma forma do princípio da incerteza de Heisenberg, proposto pela primeira vez pelo físico alemão Werner Heisenberg (1901-1976). Ele afirma que, em geral, nem a posição nem o momento de uma partícula pode ser determinada com precisão arbitrariamente grande, como a física clássica pode prever. Em vez disso, as incertezas nas duas quantidades desempenham

papéis complementares, como já descrito. Na **Figura 3.5** mostramos as relações entre essas duas incertezas.

Figura 3.5



É tentador pensar que poderíamos obter maior precisão usando mais detectores sofisticados de posição e momento. Isto não é possível. Para detectar uma partícula, o detector deve interagir com ele, e essa interação inevitavelmente muda o estado de movimento da partícula, e introduz incerteza sobre seu estado original. Então para localizar uma partícula, por exemplo, usamos fótons de curto comprimento de onda. Estes fótons incidindo na partícula, com o objetivo de melhor localizar a sua posição, faria a partícula sofrer uma maior variação na sua velocidade, gerando uma maior incerteza em seu momento linear. Uma análise mais detalhada de tais experimentos hipotéticos mostra que as incertezas que descrevemos são fundamentais e intrínsecas. Elas não pode ser evitadas, mesmo em princípio, por qualquer técnica experimental, não importa o quão sofisticada seja.

Equação 3.13

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar.$$

Incerteza na Energia

Há também um princípio de incerteza para a energia. Acontece que a energia de um sistema também tem incerteza inerente. A incerteza ΔE depende do intervalo de tempo durante o qual o sistema permanece num determinado estado. A relação é

Um sistema que permanece em um estado metaestável por um tempo muito longo (Δt grande) pode ter um estado de energia muito bem definidos (ΔE pequeno), mas se ele permanece em um estado

por apenas um curto espaço de tempo (Δt pequeno), a incerteza na energia correspondente deve ser maior (ΔE grande). A **Figura 3.6** ilustra essa ideia.

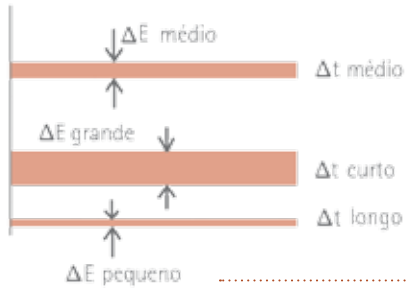


Figura 3.6



capítulo 4

Função de onda e sua
interpretação, Átomo de um elétron

A Função de Onda e a Equação de Schrodinger

Há evidências de que em escala atômica ou subatômica, uma partícula como um elétron não pode ser descrita simplesmente como um ponto. Em vez disso, usamos uma função de onda para descrever o estado de uma partícula. Vamos descrever mais especificamente a linguagem cinemática que devemos usar na mecânica quântica para substituir o esquema clássico de descrever uma partícula pelas suas coordenadas e velocidades. Nosso novo esquema para descrever o estado de uma partícula tem muito em comum com a linguagem do movimento de uma onda clássica. Podemos descrever as ondas transversais em uma corda, especificando a posição de cada ponto, em cada instante de tempo por meio de uma função de onda. Se y representa o deslocamento do equilíbrio, no tempo t , de um ponto sobre a corda em uma distância x da origem, então a função $y(x,t)$ representa o deslocamento de qualquer ponto x , a qualquer momento t . Uma vez que sabemos a função de onda para um determinado movimento de onda, nós sabemos tudo o que há para saber sobre o movimento de oscilação da corda. Podemos encontrar a posição e a velocidade de qualquer ponto da corda a qualquer momento, e assim por diante. Trabalhamos fórmulas específicas para essas funções, para ondas senoidais por exemplo, em que cada pedaço da corda sofre movimento harmônico simples.

Seguimos um padrão semelhante para as ondas sonoras. A função de onda $p(x,t)$ para uma onda viajando ao longo da direção x representa a variação de pressão em qualquer ponto x , a qualquer instante t . Nós podemos usar essa descrição de onda para descrever campos elétricos e campos magnéticos (ondas eletromagnéticas) se propagando em qualquer ponto do espaço a qualquer instante.

Assim, é natural que se use uma função de onda como o elemento central da nossa nova linguagem que busca descrever partículas quânticas. O símbolo normalmente utilizado para essa função de onda é Ψ ou ψ . Em geral, Ψ é uma função de todo o espaço de coordenadas e do tempo, enquanto que ψ é uma função do espaço de coordenadas apenas e não de tempo. Assim como temos a fun-

ção de onda $y(x,t)$ para descrever ondas mecânicas em uma corda, e fornecer uma descrição completa do movimento, do mesmo modo temos a função de onda $\Psi(x,y,z,t)$ que contém para uma partícula todas as informações que podem ser conhecidas sobre a partícula. A teoria matemática da mecânica quântica descreve como usar o $\Psi(x,y,z,t)$ para determinar os valores médios da posição da partícula, velocidade, força, energia e momento angular⁵.

Interpretação da Função de Onda

A função de onda descreve a distribuição de probabilidade de uma partícula no espaço, assim como a funções de onda para uma onda eletromagnética descrever a distribuição de campos elétricos e magnéticos. Quando nós estudamos figuras de interferência e difração, encontramos que a intensidade I da radiação, em qualquer ponto da figura é proporcional ao quadrado do campo elétrico em magnitude isto é, E^2 . Na interpretação de fótons de interferência e difração, a intensidade em cada ponto é proporcional ao número de fótons que atingem este ponto, ou, alternativamente, a probabilidade de que qualquer fóton individual vai atingir o ponto.

Assim, o quadrado do campo elétrico em cada ponto é proporcional a probabilidade de encontrar um fóton em torno desse ponto. Exatamente da mesma forma, o quadrado da função de onda de uma partícula em cada ponto nos diz sobre a probabilidade de encontrar a partícula em torno desse ponto. Mais precisamente, deveríamos dizer que o quadrado do valor absoluto da função de onda, $|\Psi|^2$. Isto é necessário porque, Ψ pode ser uma quantidade complexa, com partes real e imaginária. (A parte imaginária da função é uma função real multiplicado pelo número imaginário $i = \sqrt{-1}$).

Para uma partícula que se move em três dimensões, a quantidade $|\psi(x,y,z)|^2 dV$ é a probabilidade de que a partícula seja encontrada

5. Cuidado – ondas de partículas versus ondas mecânicas – Ao contrário de ondas mecânicas em uma corda ou ondas sonoras no ar, a função de onda para uma partícula não é uma onda mecânica que precisa de algum meio material para se propagar. A função de onda descreve a partícula, e não podemos definir a própria função em termos de qualquer coisa material. Só podemos descrever como ele está relacionado a efeitos físicos observáveis.

no tempo t dentro de um volume dV em torno do ponto (x,y,z) . A partícula é mais provável de ser encontrado em regiões onde $|\Psi|^2$ é grande, e assim por diante. Esta interpretação, feita pela primeira vez pelo físico alemão Max Born, exige que a função de onda deve ser normalizada. Isto é, a integral de $|\Psi|^2 dV$ sobre todo o espaço deve ser igual a exatamente 1. Em outras palavras, a probabilidade é exatamente 1, ou 100%, que a partícula está em algum lugar no universo⁶.

Estado Estacionário

Em geral, o valor de $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ em um determinado ponto varia com o tempo. Isto faz sentido: como um elétron em um tubo de televisão, quando ele passa do cátodo, em direção a tela, o lugar que é mais provável de ser encontrado muda com o tempo. Mas, se a partícula está em um estado de uma energia definida, tal como um elétron atômico em um átomo em um nível de energia determinado, o valor de $|\Psi|^2$ em cada ponto é independente do tempo. Pois a distribuição de probabilidade de partículas em tal estado não muda com o tempo, e um estado com uma energia definida é chamado de estado estacionário. Esses estados são de grande importância na mecânica quântica. Por exemplo, para cada energia definida em um átomo de hidrogênio, há uma função de onda específica. É possível que um átomo esteja em um estado que não é idêntico a qualquer um destes estados estacionários de funções de onda e que não tem uma energia definida. No entanto, a função de onda para qualquer estado pode sempre ser escrita como uma combinação de funções de onda de estados estacionários. Qualquer onda estacionária em uma corda, não importa o quão complexo, pode ser expressa como uma combinação dos modos normais de vibração da corda. Por que $|\Psi|^2$ é independente de tempo, se a partícula está em um estado de energia definida? Isto é, por que tais estados são estacionário? Para

6. $|\Psi|^2$ não uma probabilidade em si. Na verdade $|\Psi|^2 dV$ é a probabilidade de encontrar a partícula dentro de um volume dV em torno do ponto (x, y, z) no tempo t . Se o volume diminuir, torna-se menos provável que a partícula seja encontrada nesse volume, então a probabilidade diminui. Um nome mais adequado para $|\Psi(x,y,z)|^2$ é função distribuição de probabilidade, uma vez que descreve como a probabilidade de encontrar a partícula em diferentes locais é distribuído ao longo espaço.

responder a esta pergunta, primeiro observe o seguinte resultado da mecânica quântica: para uma partícula em um estado de energia definida E , a função de onda dependente do tempo $\Psi(x,y,z,t)$ pode ser escrita como um produto de uma função independente do tempo $\psi(x,y,z)$ e uma função simples dependente do tempo:

Equação 4.1
$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-\frac{Et}{\hbar}}.$$

A função exponencial na equação acima é definida pela fórmula de Euler:

Equação 4.2
$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta, \text{ e } e^{-i\theta} = \cos \theta - i \sin \theta.$$

Vamos agora olhar para a função de distribuição a probabilidade $|\Psi|^2$ obtida a partir da **Equação 4.1**. Note que $|\Psi|^2$ é o produto de Ψ e seu complexo conjugado Ψ^* . Para encontrar o complexo conjugado de um número, basta substituir todos os i por $-i$. Por exemplo, o conjugado complexo de $c=a+ib$, onde a e b são reais, e $c^*=a-ib$, assim:

$$|c|^2 = c^* c = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2,$$

(lembre-se que $i^2=-1$)

Equação 4.3
$$\Psi^*(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{\frac{Et}{\hbar}}$$

e

Equação 4.4
$$\begin{aligned} |\Psi(x, y, z, t)|^2 &= \Psi^*(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t) \\ &= \psi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) e^{\frac{Et}{\hbar}} e^{-\frac{Et}{\hbar}} \\ &= |\psi(x, y, z)|^2. \end{aligned}$$

Como $|\psi(x,y,z)|^2$ não depende do tempo, então podemos concluir que $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ descreve um comportamento estacionário.

A Equação de Schrodinger

Temos enfatizado a importância de estados estacionários em descrever sistemas quânticos. Como a **Equação 4.1** mostra, para descrever

um estado estacionário temos que saber sua função de onda espacial $\psi(x,y,z)$ e sua energia E . Para determinar esses valores usamos uma ferramenta desenvolvida em 1926 pelo físico austríaco Erwin Schrödinger, conhecida como a equação de Schrödinger. A equação de Schrödinger desempenha o mesmo papel central na mecânica quântica, que as leis de Newton em mecânica clássica, e as equações de Maxwell no eletromagnetismo. Nossa compreensão de cada sistema de mecânica quântica, incluindo átomos, moléculas, núcleos atômicos, e elétrons em sólidos, baseia-se nas soluções desta equação para esses sistemas.

Não podemos derivar a equação de Schrödinger de outros princípios, ela própria é um novo princípio. Mas podemos mostrar como ela está relacionada com a relação de Broglie, e podemos fazê-la parecer plausível. A forma mais simples da equação de Schrödinger é para uma partícula de massa “ m ” que se move em uma única dimensão, paralela ao eixo x , de modo que a função de onda espacial ψ é uma função apenas de x . Nós supomos que a partícula se move na presença de uma força conservativa que tem apenas uma componente x , de modo que haja uma correspondente energia potencial $E_{\text{potencial}}=U(x)$. A equação de Schrodinger para tal uma partícula com uma energia E é definida como

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad \text{Equação 4.5}$$

Nesta equação E é uma constante. Como sabemos que essa equação está correta? Simplesmente porque funciona. Previsões feitas usando esta equação estão de acordo com verificações experimentais. Vamos aplicar a **Equação 4.5** para várias situações físicas, cada com uma forma diferente da função $U(x)$.

Equação de Onda para a Partícula Livre

Como exemplo, vamos considerar que as experiências de partículas livre sobre a qual nenhuma força é aplicada. Se não há força, $U(x)$ é independente de x , por simplicidade escolhemos $U(x)=0$. Se tal uma

partícula livre está se movendo no sentido $+x$, com momento p , sua energia cinética (e portanto sua energia total) é $E=p^2/2m$.

De acordo com o princípio de de Broglie a partícula tem um comprimento de onda $\lambda = \frac{h}{p}$, e uma frequência definida $f = \frac{E}{h}$ (um estado estacionário).

Por analogia com as ondas mecânicas se propagando, nós escrevemos a função de onda para a partícula como

Equação 4.6

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + B \sin(kx - \omega t),$$

onde A e B são constantes. Como fizemos para ondas mecânicas e ondas eletromagnéticas, usamos o número de onda $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ e os frequência angular $\omega=2\pi f$ na Equação 4.6. Estes estão relacionados ao momento linear e à energia por

Equação 4.7

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} \frac{h}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = 2\pi f = \frac{2\pi}{h} hf = \frac{E}{\hbar}.$$

A função de onda na Equação 4.6 não parece estar na forma de estado estacionário dado pela Equação 4.7. Podemos colocá-la nessa forma se deixarmos $B=iA$. Então,

Equação 4.8

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t) = A e^{i(kx - \omega t)}.$$

Na Equação 4.8, usamos a fórmula de Euler.

Como construir uma maneira de recuperar a hipótese de de Broglie a partir da função de onda acima? Observe que pela Equação 4.7 $p=\hbar k$. Então derivando a função em relação a x e multiplicando por \hbar reproduzimos a relação de De Broglie. Portanto, podemos propor um operador diferencial que atuando na função de onda reproduza a relação $p=\hbar k$. Sua forma é

Equação 4.9

$$p_{op} = \hbar \frac{d}{dx},$$

que atuando na função de onda,

Equação 4.10

$$p_{op} \Psi = \hbar \frac{d}{dx} A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k \Psi,$$

o operador diferencial que reproduz a energia cinética é

$$\begin{aligned} \frac{(p_{op})^2}{2m} \Psi &= \frac{(\hbar \frac{d}{dx})^2}{2m} A e^{i(kx - \omega t)} \\ &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} A e^{i(kx - \omega t)} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \Psi. \end{aligned} \quad \text{Equação 4.11}$$

Então, vemos que a Equação de Schrodinger é a expressão da energia total: $E_{\text{total}} = E_{\text{cinética}} + E_{\text{potencial}}$; se substituirmos $\Psi(x)$ no lado esquerdo da Equação de Schrödinger (Equação 4.5), obtemos:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 A e^{i(kx)}}{dx^2} + (0) A e^{i(kx)} &= -\frac{\hbar}{2m} (ik)^2 A e^{i(kx)} \\ &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} A e^{i(kx)} = \frac{(p)^2}{2m} \psi(x). \end{aligned} \quad \text{Equação 4.12}$$

Uma vez que obtivemos $E = p^2/2m$ vemos pela Equação 4.12 que a função de onda de partícula livre satisfaz a equação de Schrödinger para $U(x) = 0$.

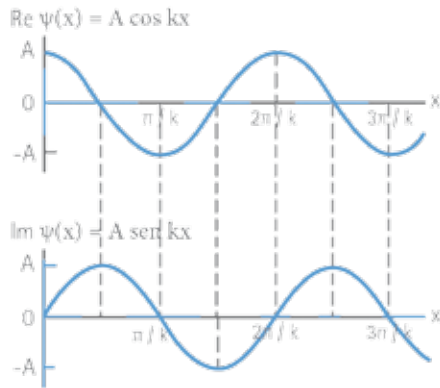


Figura 4.1

Se k é positivo, a função de onda representa uma partícula livre se movendo na direção x , sentido positivo. Se k for negativo, o momento linear e, portanto, o movimento é no sentido negativo do eixo Ox (com um valor negativo de k , o comprimento de onda é $\lambda = \frac{2\pi}{|K|}$).

Para uma partícula livre, não há restrição sobre o valor de p e, portanto, não restrição sobre o valor da energia $E = p^2/2m$. Em geral $U(x)$ não é uma constante, então as soluções da equação de Schrödinger são possíveis apenas para certos valores de E . Estes valores representam os níveis de energia permitidos de um siste-

ma descrito por $U(x)$. Esta descoberta é de extrema importância. Antes do desenvolvimento da equação de Schrödinger, não havia maneira de prever níveis de energia a partir de qualquer teoria fundamental, exceto o modelo de Bohr, que tinha um sucesso limitado. Vamos estudar as aplicações da equação de Schrodinger em sistemas físicos.

Partícula em uma caixa

Nesta sessão, iremos aprender a usar a equação de Schrodinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes para vários sistemas. Nos referimos aos estados de energia definida como estados estacionário. Para simplificar, vamos começar com os problemas em que a partícula só pode se mover ao longo do eixo x . A Equação de Schrodinger unidimensional é

Equação 4.13

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Esta equação nos informa que $E = E_{\text{total}} = E_{\text{cinética}} + E_{\text{potencial}}$. Sendo que na equação $E_{\text{cinética}} \Psi = \frac{(\hbar \frac{d}{dx})^2}{2m} \Psi$, e $E_{\text{potencial}} \Psi = U(x)\Psi$. O problema fundamental é, então, o seguinte: Para uma dada função de energia potencial $U(x)$, quais são as possíveis funções de onda de estado estacionário $\Psi(x)$, e quais são as energias correspondentes E ? Na seção passada nós resolvemos esse problema para o caso de $U(x)=0$, correspondente à partícula livre. As funções de onda permitidas e energias correspondentes são

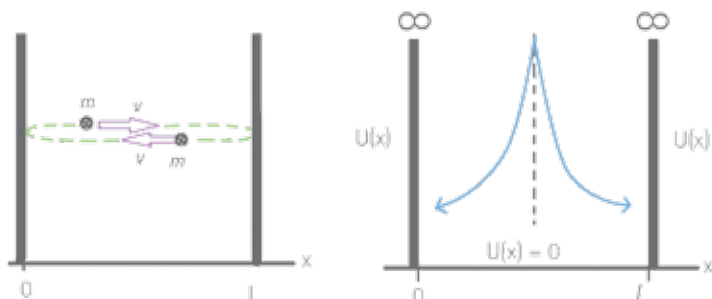
Equação 4.14

$$\psi(x) = Ae^{i(kx)}, \quad E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad (\text{partícula livre}).$$

O número de onda k é igual a $|K| = \frac{2\pi}{\lambda}$, onde λ é o comprimento de onda. Descobrimos que k pode ter qualquer valor real, de modo que a energia E de uma partícula livre pode ter qualquer valor de zero a infinito. Além disso, as partículas podem ser encontrados com igual probabilidade em qualquer valor de x de $-\infty$ a $+\infty$.

Agora vamos olhar para um modelo simples em que uma partícula está ligada, de modo que não pode escapar para o infinito,

mas está confinado a uma região restrita do espaço. Nosso sistema consiste de uma partícula confinada entre duas paredes rígidas separadas por uma distância L (Figura 4.2). O movimento é puramente unidimensional, com a partícula se deslocando ao longo do eixo- x , entre as paredes em $x=0$ e $x=L$. A energia potencial correspondente às paredes rígidas é infinito, então a partícula não pode escapar; entre as paredes, a energia potencial é zero. Esta situação é muitas vezes descrita como uma “partícula em uma caixa”. Este modelo pode representar um elétron que está livre para se mover dentro de uma molécula longa e reta ou ao longo de um fio muito fino. A função energia potencial é representada graficamente na Figura 4.3.



Figuras 4.2 e 4.3

Para resolver a equação de Schrödinger para este sistema, começamos com algumas restrições sobre a função de onda $\psi(x)$ da partícula. Porque a partícula está confinada à região $0 \leq x \leq L$, e estabelecemos $\psi(x)$ ser zero fora dessa região.

Além disso, $\psi(x)$ deve ser uma função contínua para ser uma solução matematicamente aceitável para a equação de Schrödinger. Se for, então $\psi(x)$ deve ser zero no limite da região, $x=0$ e $x=L$. Essas duas condições são condições de contorno para o problema. Elas devem ser familiares, porque elas são as mesmas condições que estamos habituados a encontrar os modos normais de vibração de uma corda, você deve rever essa discussão. Uma condição adicional é que para calcular a segunda derivada $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ na Equação 4.13, a primeira derivada $\frac{d\psi(x)}{dx}$ também deve ser contínuo, exceto nos pontos onde a energia potencial se torna infinita (como acontece nas paredes da caixa).

Vamos agora resolver para as funções de onda na região $0 \leq x \leq L$, para as condições de fronteira acima. Nesta região $U(x)=0$, então a função de onda na região deve satisfazer a

Equação 4.15

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

A Equação 4.15 é a mesma Equação de Schrödinger para uma partícula livre, por isso é tentador concluir que as funções de onda e energias são dadas pela Equação 4.13. É verdade que $\psi(x)=Ae^{ikx}$ satisfaz a Equação de Schrödinger com $U(x)=0$, é contínua, e tem a primeira derivada contínua $\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx}$. No entanto, esta função de onda não satisfaz as condições de contorno que $\psi(x)$ deve ser zero em $x=0$ e $x=L$: em $x=0$ a função de onda da Equação 4.13 é igual a $Ae^0=A$, e em $x=L$ é igual a Ae^{ikL} . (Essas funções seriam igual a zero, se $A=0$, mas depois a função de onda seria zero e não haveria nenhuma partícula em toda região!)

A saída para este dilema é recordar que tem uma solução mais geral de estado estacionário para a Equação Schrodinger com $U(x)=0$ é

Equação 4.16

$$\psi(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx}.$$

Esta função de onda é uma superposição de duas ondas: uma viaja na direção x , sentido positivo, com amplitude A_1 , e outra que se desloca no sentido oposto com o número de onda $-k$, mas amplitude A_2 . Isto é análogo à situação de ondas estacionárias em uma corda (Figura 4.4), que podemos considerar como a superposição de duas ondas senoidais se propagando em direções opostas. A energia que corresponde a Equação 4.16 é $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$.

Para ver se a função de onda dada pela Equação 4.16 pode satisfazer as condições de contorno, vamos primeiro reescrevê-la em termos de senos e cossenos usando a fórmula de Euler,

Equação 4.17

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_1(\cos(Kx) \\ &+ i \sin(kx)) + A_2(\cos(-kx) \\ &+ i \sin(-kx)) = A_1(\cos(kx) + i \sin(kx)) + A_2(\cos(kx) - i \sin(kx)) \\ \psi(x) &= (A_1 + A_2) \cos(kx) + i((A_1 - A_2) \sin(kx)). \end{aligned}$$

Em $x=0$, $\psi(0)=A_1+A_2$, que deve ser igual a zero para satisfazer a condição de contorno naquele ponto. Daí $A_1=-A_2$, e a **Equação 4.17** fica

$$\psi(x) = 2iA_1 \sin(kx) = C \sin(kx). \quad \text{Equação 4.18}$$

Nós simplificamos a expressão com a introdução da constante $C=2iA_1$. Podemos também satisfazer a segunda condição de contorno em que $\psi(L)=0$, o que implica em $\sin(kL)=0$, esta equação é satisfeita se os valores de k são $kL=n\pi$ ($n=1, 2, 3, \dots$). Daí a **Equação 4.18** dá as funções de onda estacionárias para uma partícula em uma caixa na região $0 \leq x \leq L$, (Fora desta região, $\psi(x)=0$). Os valores possíveis de k e do comprimento de onda $\lambda=2\pi/k$ são

$$k = \frac{n\pi}{L} \text{ e } \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad \text{Equação 4.19}$$

Assim, como ocorre para uma corda na **Figura 4.4**, o comprimento L da região é um número inteiro de metades de comprimentos de onda.

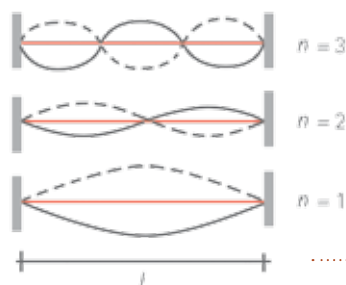


Figura 4.4

Os possíveis níveis energia são dados por $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{(p)^2}{2m}$, sendo $p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$ é o módulo do momento linear de uma partícula livre com número de onda k e comprimento de onda λ . Isso faz sentido, já que dentro da região $0 \leq x \leq L$ a energia potencial é zero e a energia é toda cinética. Para cada valor de n existem valores correspondentes de p , λ e E , vamos chamá-los de p_n , λ_n e E_n . Juntando as peças, obtemos as **Equações 4.20 e 4.21**.

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{(nh)^2}{8mL^2} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \text{ (níveis de energia)} \quad \text{Equação 4.20}$$

Equação 4.21

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$$

Estes são os níveis de energia possível para uma partícula em uma caixa. Cada nível de energia tem seu próprio valor de número quântico n e uma função de onda correspondente, que denotaremos por ψ_n . Quando substituímos K da Equação 4.18 pela expressão $\frac{n\pi}{L}$, e jogamos na Equação 4.18, encontramos:

Equação 4.22

$$\psi_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

A Figura 4.5a mostra gráficos das funções de onda ψ_n para $n=1, 2, 3, 4$ e 5. Note que estas funções parecem idênticas às de uma onda estacionária em uma corda (Figura 4.4). A Figura 4.5b mostra o diagrama de níveis de energia para este sistema. Os níveis de energias sucessivamente mais elevados, proporcionais a n^2 , são cada vez mais espaçados entre si. Há um número infinito de níveis porque as paredes são perfeitamente rígidas, mesmo uma partícula de energia cinética infinitamente grande permanece confinada dentro da caixa.

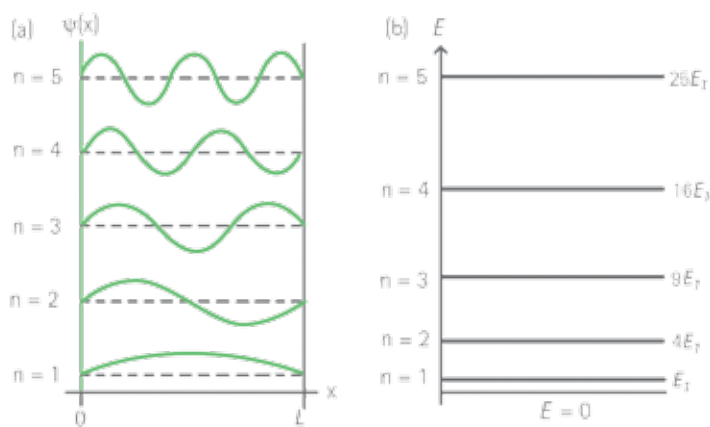


Figura 4.5

Exemplo 1

Considere um elétron em uma caixa de $5,0 \times 10^{-10} \text{m}$ de largura (valor típico do tamanho de um átomo de hidrogênio). Encontre o nível de energia mais baixo para o elétron nesta caixa.

Solução

Para resolver este problema vamos usar o que apreendemos na seção anterior onde a energias de uma partícula presa em uma caixa unidimensional.

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Para o nível mais baixo, $n=1$, assim:

$$E_1 = \frac{(1\pi\hbar)^2}{2mL^2} = \frac{(1 \cdot \pi \cdot 6,626 \times 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,109 \times 10^{-31} \cdot (5,010 \times 10^{-10})^2}$$

$$E_1 = 2,4 \times 10^{-19} \text{ J ou } 1,5 \text{ eV}$$

Uma partícula aprisionada numa caixa é bem diferente do que um elétron ligado ao átomo. Mas obtivemos uma energia da mesma ordem de grandeza dos níveis de energia atômico.

Probabilidade e Normalização

Vamos olhar um pouco mais de perto as funções de onda para uma partícula em uma caixa, mantendo em mente a interpretação de probabilidade da função de onda ψ que discutimos anteriormente. Em nossa situação unidimensional a quantidade $|\psi(x)|^2 dx$ é proporcional à probabilidade de que a partícula seja encontrada dentro de um pequeno intervalo dx . Para uma partícula em uma caixa,

$$|\psi_n|^2 dx = c^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx. \quad \text{Equação 4.23}$$

Ambos $\psi(x)$ e $|\psi(x)|^2$ estão plotados na **Figura 4.6** para $n=1, 2$ e 3 . Notamos que nem todas as posições são igualmente prováveis. Isto está em contraste com a situação na mecânica clássica, em que todas as posições entre $x=0$ e $x=L$ são igualmente provável. Vemos na **Figura 4.6b** que $|\psi(x)|^2=0$ em alguns pontos, então a probabilidade de encontrar a partícula exatamente nestes pontos é zero. Não deixe que isso te incomode, o princípio da incerteza já nos mostrou que não podemos medir a posição exatamente. A partícula

é localizada apenas para estar em algum lugar entre $x=0$ e $x=L$, não em algum determinado valor de x .

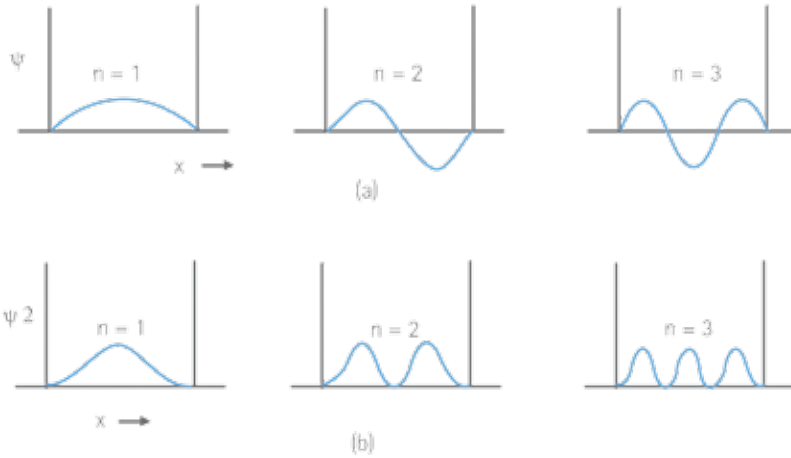


Figura 4.6

Sabemos que a partícula deve estar em algum lugar no universo, ou seja, entre $x=-\infty$ e $x=+\infty$. Assim, a soma das probabilidades para todos os pontos, dados pela integral em dx em todos os lugares (a probabilidade total de encontrar a partícula) deve ser igual a 1. Isto é:

Equação 4.24

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

Uma função de onda é dita ser normalizada se tiver uma constante C (Equação 4.23), com um valor de forma que quando se calcula a probabilidade total de encontrar a partícula resulte em um valor igual a 1 (Equação 4.24). O processo de determinação da constante é chamado normalização. Por que se preocupar com a normalização? Porque para uma função de onda normalizada, $|\psi(x)|^2$ não é apenas proporcional, mas é igual, à probabilidade de encontrar a partícula no intervalo dx . Lembre que nós chamamos $|\psi(x)|^2$ de função de distribuição de probabilidade.

Agora vamos normalizar a função de onda $\psi(x)$ dada pela Equação 4.23 para a partícula em uma caixa. Já que $\psi(x)$ é zero, exceto entre $x=0$ e $x=L$, a Equação 4.24 torna-se

Equação 4.25

$$\int_0^L C^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1.$$

Você pode avaliar esta integral usando a identidade trigo-

nométrica $(\sin \theta)^2 = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta)$; o resultado é $C^2 \frac{L}{2}$. Assim, a interpretação de probabilidade de nossa função de onda exige que $C^2 \frac{L}{2} = 1$ ou $C = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}$. Portanto, a constante C não é arbitrária. (Isso está em contraste com o problema cordas vibrante clássica, em que C representa uma amplitude que depende de condições iniciais.) Assim, as funções de estado estacionário de onda normalizada para uma partícula em uma caixa são da forma

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \text{Equação 4.26}$$

Em seguida, vamos verificar se os nossos resultados para a partícula em uma caixa são consistentes com o princípio da incerteza. Podemos escrever a posição da partícula como $x = \frac{L}{2} = \pm \frac{L}{2}$, de modo que é possível estimar a incerteza na posição como $\Delta x \approx \frac{L}{2}$. Da [Equação 4.21](#) o módulo do momento no estado n é dado por $p_n = \frac{nh}{2L}$. Uma estimativa razoável da incerteza no momento linear é a diferença de momento de dois níveis, que diferem por 1 em seus valores de n , isto é, $\Delta p_x \approx \frac{h}{2L}$. Então o produto $\Delta x \Delta p_x$ é:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{h}{4} \quad \text{Equação 4.27}$$

Isto é consistente com o princípio da incerteza, $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar = \frac{h}{2\pi}$, em que as incertezas eram mais precisamente definidas como desvio padrão.

Poço de Potencial

Um poço de potencial é uma função de energia potencial $U(x)$ que tem um mínimo. Na mecânica newtoniana uma partícula presa em um poço de potencial pode oscilar com movimento periódico. Nossa primeira aplicação da equação de Schrodinger, a partícula em uma caixa, envolveu um potencial rudimentar e uma função $U(x)$, que é igual a zero dentro de um determinado intervalo e infinito todos os outros lugares. Esta função corresponde a algumas situações encontradas na natureza, como mencionado, mas a correspondência é apenas aproximada.

Um poço de potencial que serve como uma melhor aproximação a várias situações físicas reais é um poço com lados retos, mas a altura finita. A **Figura 4.7** mostra uma função de energia potencial que é igual a zero no intervalo de $0 \leq x \leq L$ e tem o valor U_0 fora deste intervalo. Esta função é muitas vezes chamada de poço de potencial quadrado, que poderia servir como um modelo simples de um elétron dentro de uma chapa metálica com espessura L , movendo-se perpendicular à superfície da chapa. O elétron pode se mover livremente dentro do metal, mas tem que escalar uma barreira de energia potencial com a altura U_0 para escapar de qualquer superfície do metal. A energia U_0 está relacionada com a função trabalho que discutimos anteriormente em conexão com o fotoelétrico. Em uma aplicação tridimensional esférica, uma versão de um poço potencial pode ser usado para descrever de maneira aproximada os movimentos de prótons e nêutrons dentro de um núcleo atômico.

Estados Ligados de um Poço de Potencial Quadrado

Na mecânica newtoniana, a partícula está presa (localizado) em um poço quando sua energia total E é inferior a U_0 . Na mecânica quântica, um tal estado localizado é muitas vezes chamado de um estado ligado. Todos os estados são ligados quando o poço é infinitamente profundo, mas se E é maior do que U_0 para um poço finito, a partícula não está ligada.

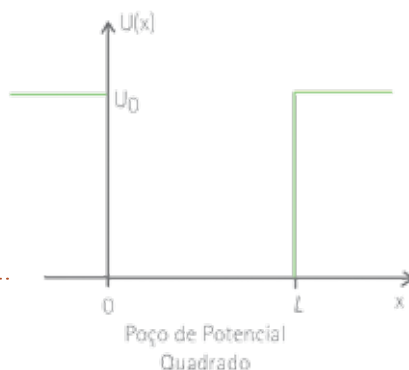


Figura 4.7

Para um poço quadrado finito, vamos considerar as soluções de estado ligado da equação de Schrodinger, correspondente a $E < U_0$. A abordagem mais simples é considerar separadamente as regiões onde $U=0$ e $U=U_0$. Quando $U=0$, a equação de Schrodinger se reduz à **Equação 4.15**. Reorganizando a equação, encontramos:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x). \quad \text{Equação 4.28}$$

Da **Equação 4.17**, podemos expressar as soluções desta equação como combinações de $\cos kx$ e $\sin kx$, onde $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ e assim $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Por isso dentro do poço quadrado $0 \leq x \leq L$, temos

$$\psi(x) = A \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + B \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x, \quad \text{Equação 4.29}$$

(dentro do poço) sendo A e B constantes.

Nas regiões $x < 0$ e $x > L$ usamos a **Equação 4.13** com $U=U_0$ e chegamos à

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x). \quad \text{Equação 4.30}$$

A quantidade $U_0 - E$ é positiva, por isso as soluções desta equação são exponenciais. Podemos escrever as soluções como

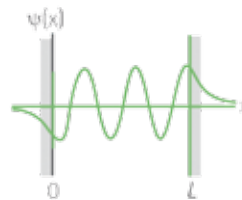
$$\psi(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}, \quad \text{Equação 4.31}$$

(fora do poço) onde C e D são constantes com valores diferentes nas regiões $x < 0$ e $x > L$.

Vemos que as funções de estados ligados de onda para este sistema são senoidais dentro do poço e exponenciais fora dele. Temos que usar o expoente positivo na região $x < 0$ e o expoente negativo na região $x > L$. Isto é, $D=0$ para $x < 0$, e $C=0$ para $x > L$. Sem essa escolha de constantes ψ tenderia para infinito quando $|x|$ se aproximasse de infinito, e a condição de normalização, **Equação 4.24**, não poderia ser atendida. Temos também obrigar as funções de onda a satisfazerem as condições de contorno que mencionamos na no início do capítulo $\psi(x)$ e $\frac{d\psi(x)}{dx}$ devem ser contínuos nos pontos de fronteira ($x=0$ e $x=L$). Se a função de onda $\psi(x)$ ou $\frac{d\psi(x)}{dx}$ fossem descontinuas em um ponto, a segunda derivada $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ seria

infinita nesse ponto. Mas isso violaria a equação de Schrödinger, que diz que em cada ponto, $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ é proporcional a $U-E$. Em nossa situação, $U-E$ é finito em toda parte, assim $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ também deve ser finita em todos os lugares. Combinando as funções senoidais e exponenciais nos pontos de fronteira de modo que eles se juntem suavemente só é possível para certos valores específicos da energia total E , então este requisito determina os níveis de energia do poço de potencial. Não existe uma fórmula simples para os níveis de energia como havia para o poço infinitamente profundo. Encontrar os níveis é um problema bastante complexo matematicamente, que requer a solução de uma equação transcendental por aproximação numérica, nós não vamos entrar em detalhes. A **Figura 4.8** mostra a forma geral de uma possível função de onda. As características mais marcantes desta função de onda são suas extremidades exponenciais, “caudas” que se estendem para fora do poço em penetrando em regiões que são proibidos pela mecânica newtoniana (porque nessas regiões a partícula teria energia cinética negativa). Vemos que há alguma probabilidade de encontrar a partícula fora do poço, apesar do fato de que na mecânica clássica isso é impossível. Esta penetração em regiões classicamente proibidas é um efeito quântico que não tem analogia clássica para partículas.

Figura 4.8



Comparando o Poço QuadradoFinito com o Poço Infinito

Vamos continuar a comparação do poço de potencial finito com o poço infinitamente profundo. Primeiro, porque as funções de onda do poço finito, não são zero em $x=0$ e $x=L$, isto acarreta que o comprimento de onda da parte senoidal de cada função de onda no poço finito é maior do que a correspondente no poço infinito

(a função de onda penetra na parede). De acordo com a relação $p=h/\lambda$ um aumento de λ corresponde a diminuição do momento linear e, portanto, uma redução na energia. Assim, comparando poços com mesma largura, vemos que cada nível de energia, incluindo o nível fundamental, é menor para um poço finito do que para um poço infinitamente profundo com mesma largura.

Segundo, um poço com profundidade finita U_0 tem um número finito de estados ligados e níveis de energia correspondentes, em relação ao número infinito de um poço infinitamente profundo. A quantidade de níveis existentes depende do valor de U_0 em comparação com a energia do estado fundamental do poço infinito, que chamaremos agora de E_∞ . De acordo com a **Equação 4.21**,

$$E_\infty = \frac{(\pi\hbar)^2}{2mL^2}$$

Equação 4.32

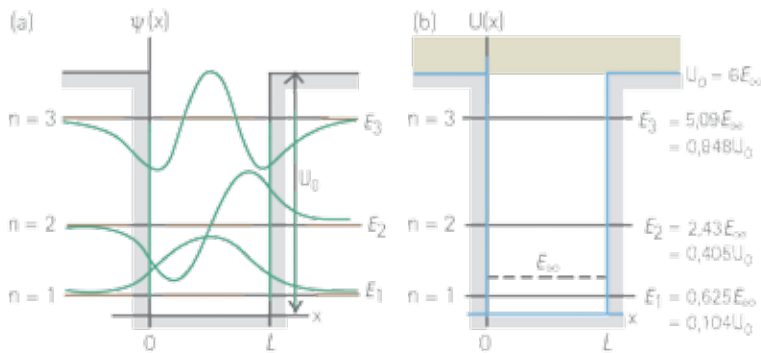


Figura 4.9

Quando o U_0 é muito maior do que E_∞ (um poço muito fundo), há muitos estados ligados, e as energias dos poucos níveis mais baixos são quase as mesmas que as energias para poço o infinitamente profundo. Quando U_0 é apenas um pouco maior que E_∞ , existem apenas alguns estados ligados. (Mas sempre há pelo menos um estado ligado, não importa o quão raso é o poço) Tal como acontece com o poço infinitamente profundo, não há nenhum estado com $E=0$; tal Estado violaria o princípio da incerteza. A **Figura 4.9** mostra o caso particular em que $U_0=6E_\infty$, e neste caso há três estados ligados. Os níveis de energia são expressos como frações da profundidade U_0 do poço e como múltiplos de E_∞ . Observe que, se o poço tivesse uma profundidade infinita, os três níveis mais

baixo, conforme é dada pela **Equação 4.21**, seria E_∞ , $4E_\infty$ e $9E_\infty$. As funções de onda para os três estados ligados também são mostradas. Acontece que quando o U_0 é menor do que E_∞ , há apenas um estado ligado. No limite quando o U_0 é muito menor do E_∞ (um poço muito raso ou muito estreito), a energia deste estado único é aproximadamente $E=0,68U_0$.

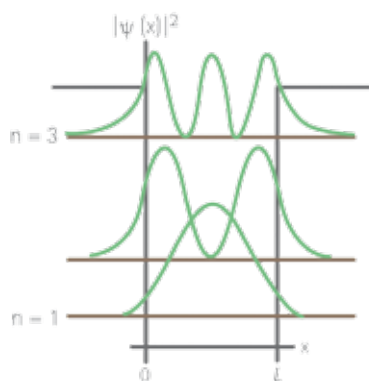


Figura 4.10

A **Figura 4.10** mostra gráficos da probabilidade distribuições, isto é, os valores de $|\psi(x)|^2$ para as funções de onda mostrado na **Figura 4.9a**. Tal como acontece com o poço infinito, nem todas as posições são igualmente prováveis. Nós já comentamos sobre a possibilidade de encontrar a partícula fora do poço, nas regiões classicamente proibida.

Existem também estados para os quais E é maior do que U_0 . Neste caso, a partícula está ligada, mas está livre para percorrer todos os valores de x . Assim, qualquer energia E maior do que o U_0 é possível. Estes estados de partículas livres, assim, formam um “continuum” em vez de um conjunto discreto de estados com níveis de energia determinados. As funções de onda de partícula livre são senoidais dentro e fora do poço. O comprimento de onda é menor no interior do poço do que fora, o que corresponde a uma maior energia cinética no interior do poço do que fora dele.

O poço de potencial quadrado descrito nesta seção tem inúmeras aplicações práticas. Mencionamos anteriormente o exemplo de um elétron dentro de uma chapa metálica. Uma versão tridimensional, em que U_0 é zero dentro de uma região esférica com raio R e tem valor U_0 , fornece um modelo simples para representar a interação de um nêutron com um núcleo em experimentos de espalhamento

de nêutrons. Neste contexto, o modelo é chamado de modelo de bola de cristal para o núcleo, porque nêutrons interagindo com um potencial deste tipo estão espalhados de uma forma que é análoga a dispersão da luz por uma bola de cristal.

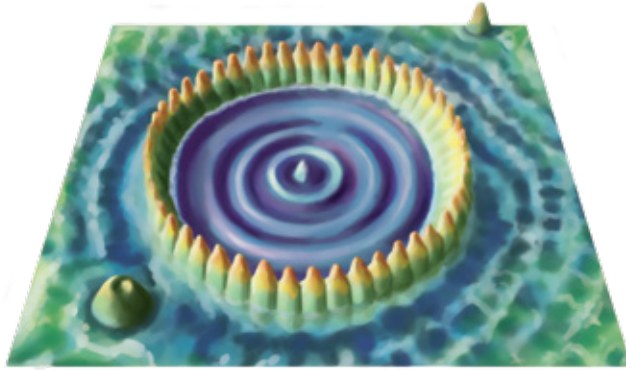


Figura 4.11

A **Figura 4.11** é uma demonstração gráfica de partículas em um poço de potencial finito de duas dimensões.



capítulo 5

Átomo de um Elétron, Átomos
Multieletrônicos e Excitações de Raio X

Estrutura Atômica

Alguns físicos afirmam que toda a química está contido na Equação de Schrodinger. Isso é um pouco de exagero, mas essa equação pode nos ensinar sobre o comportamento de elementos químicos e da natureza das ligações químicas. Ela fornece “insights” sobre como a tabela periódica dos elementos é organizada, e fornece a descrição microscópica do magnetismo.

Podemos aprender muito sobre a estrutura e propriedades de todos os átomos de as soluções para a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio. Estas soluções apresentam valores quantizados do momento angular; não precisamos fazer um postulado separado sobre a quantização como fizemos com o modelo de Bohr. Nós rotulamos os estados com um conjunto de números quânticos, que usaremos mais tarde, com átomos de muitos elétrons também. Veremos que o elétron também possui um intrínseco momento angular que chamamos de “spin”, além do momento angular orbital associado a seu movimento.

Também vamos estudar o princípio de exclusão, uma espécie de regra de ocupação microscópica que é a chave para compreender átomos de muitos elétrons. Este princípio diz que não existem dois elétrons em um átomo pode ter o mesmo Estado quântico. Finalmente, vamos usar os princípios deste capítulo para explicar a característica do espectro de raio X dos átomos.

O Átomo de Hidrogênio

No modelo de Bohr, os elétrons se movem em órbitas circulares, como partículas clássicas, mas com valores quantizados do momento angular. Embora este modelo forneça níveis de energia correto do átomo de hidrogênio, deduzidas a partir do espectro, possuía muitas dificuldades conceituais. No modelo de Bohr a física clássica aparece mesclada com os novos conceitos; isto gera situações aparentemente contraditórias. Ele não forneceu “insights” sobre o processo pelo qual os fótons são emitido e absorvido. Não poderia ser generalizado para átomos com mais de um elétron. Ele previu

propriedades magnéticas erradas para o átomo de hidrogênio. E talvez mais importante, a sua imagem do elétron como uma partícula pontual localizada era incompatível com a visão mais geral que desenvolvemos no capítulo anterior. Para ir além do modelo de Bohr, vamos aplicar a equação Schrodinger para encontrar as funções de onda para os estados estacionários (estados de energia definida) do hidrogênio átomo.

A equação de Schrodinger para o Átomo de Hidrogênio

O problema do átomo de hidrogênio é melhor formulado em coordenadas esféricas (r, θ, φ) , mostradas na **Figura 5.1**. A energia potencial é então simplesmente

Equação 5.1

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}.$$

A equação Schrodinger com esta função de energia potencial pode ser resolvida exatamente, e as soluções são combinações de funções familiares. Sem entrar em um monte de detalhes, podemos descrever as características mais importantes do procedimento e os resultados. Primeiro, as soluções são obtidas por um método chamado de separação de variáveis, no qual expressamos a função de onda $\psi(r, \theta, \varphi)$ como um produto de três funções, cada uma delas dependendo de apenas uma das três coordenadas:

Equação 5.2

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi).$$

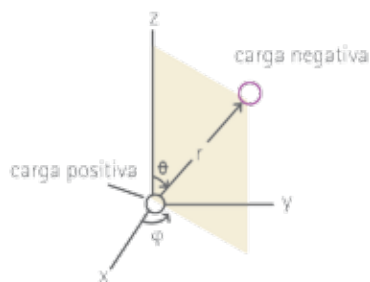


Figura 5.1

Isto é, a função $R(r)$ depende apenas de r , $\Theta(\theta)$ depende apenas de θ e $\Phi(\varphi)$ depende apenas de φ . Quando substituimos a **Equação 5.2** na equação de Schrodinger temos três equações separadas, cada uma contendo apenas uma das coordenadas. Esta é uma simplificação enorme, que reduz o problema de resolver uma equação diferencial parcial bastante complexa com três variáveis independentes, a um problema muito mais simples de resolver com

três diferentes equações diferenciais ordinárias, com uma variável independente cada uma.

As soluções fisicamente aceitáveis destes três equações são determinadas por condições de contorno. A função radial $R(r)$ deve se aproximar de zero em r grande, porque estamos descrevendo estados ligados do elétron que estão localizadas perto do núcleo. As funções angulares $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$ devem ser periódica. Por exemplo, (r, θ, φ) e $(r, \theta, \varphi + 2\pi)$ descrevem o mesmo ponto, então $\Phi(\varphi)$ deve ser igual a $\Phi(\varphi + 2\pi)$. Além disso, funções angulares devem ser finita para todos os valores relevantes dos ângulos. Por exemplo, há soluções da equação que se tornam infinitas em $\theta=0$ e $\theta=\pi$, estes valores são inaceitáveis, já que $\Psi(r, \theta, \varphi)$ deve ser normalizável.

A função radial $R(r)$ deve ser uma função exponencial do tipo $e^{-\alpha r}$, (sendo que α é positivo) multiplicado por um polinômio em r . As funções $\Theta(\theta)$ são constituídas por polinômios contendo diversas potências de $\sin\theta$ e de $\cos\theta$, e as funções $\Phi(\varphi)$ são simplesmente proporcionais a $e^{im_l\varphi}$, sendo que m_l é um número inteiro que pode ser positivo, zero, ou negativo. No processo de encontrar soluções que satisfaçam as condições de contorno, nós encontrar também os níveis de energia correspondentes. Suas energias, que denotamos por E_n ($n=1,2,3,\dots$), acabam por ser idênticos aos do modelo de Bohr, com a massa de repouso m de elétrons substituída pela massa reduzida. Reescrevemos essa equação usando $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, e temos

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi \epsilon_0)^2} \frac{m_r e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}. \quad \text{Equação 5.3}$$

Vamos chamar n o número quântico principal para o nível de energia E_n . O resultado da [Equação 5.3](#) pode ser obtidos a partir da equação é uma Schrodinger. A análise de Schrödinger é bastante diferente do modelo de Bohr, formal e conceitualmente, embora ambos forneçam o mesmo resultado para os níveis de energia, apresentam um esquema que concorda com as energias determinadas a partir de espectros dos experimentos. Como veremos, a análise Schrodinger pode explicar muitos aspectos do átomo de hidrogênio que o modelo de Bohr não explica.

Quantização de momento angular orbital

As soluções que satisfazem as condições de contorno acima mencionados também têm valores quantizados do momento angular orbital. Ou seja, apenas certos valores discretos da magnitude, e componentes do momento angular orbital são permitidos. Ao discutir o modelo de Bohr, nós mencionamos que quantização do momento angular foi um resultado sem nenhuma justificativa fundamental. Usando a Equação de Schrödinger ele aparece automaticamente!

Os valores possíveis do módulo L do momento angular orbital são determinado pela exigência de que o e função de onda $\Theta(\theta)$, que deve ser finita em $\theta=0$ e para $\theta=\pi$. Em um nível de energia E_n com número principal n , que informa em que camada está o elétron, os valores possíveis de L são

Equação 5.4

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots, n-1).$$

O número quântico do módulo do momento angular orbital, l , é chamado de número quântico orbital. No modelo de Bohr, cada nível de energia corresponde a um único valor do momento angular. Contudo a Equação 5.4 mostra que de fato existem n diferentes valores possíveis de L para o nível de energia n . Uma característica interessante da Equação 5.4 é que o momento angular orbital é zero para estados com $l=0$. Este resultado discorda do modelo de Bohr, no qual o elétron sempre se move em um círculo de raio definido, e L nunca é zero. A função de onda $\psi(r)$ para $l=0$ depende apenas de r ; as funções $\Theta(\theta)$ e $\phi(\varphi)$ são constantes. Assim, as funções de onda para estados $l=0$ são esfericamente simétricas; não há nada em sua distribuição de probabilidade $|\psi(x)|^2$ a favor de uma direção em relação a qualquer outra, e não há momento angular orbital.

Os valores permitidos dos componentes do vetor \vec{L} em determinadas direções, por exemplo, a componente L_z , são determinados impondo-se a seguinte condição: a função de onda $\phi(\varphi)$ deve ser igual a $\phi(\varphi+2\pi)$. Os valores possíveis de L_z são

Equação 5.5

$$L_z = \hbar m_l \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l).$$

Vemos que os valores de m_l podem ser zero ou um número inteiro positivo ou negativo, mas não maior em módulo do que l

(no máximo igual a l). Ou seja, $|m_l| \leq l$. Por exemplo, quando $l=1$, m_l , pode ser igual a 1, 0 ou -1. Vamos chamar m_l de número quântico magnético orbital, ou simplesmente **número quântico magnético**.

A componente L_z nunca pode ser igual a L (a menos que ambos sejam zero). Por exemplo, quando $l=2$, o maior valor possível de m_l é também igual a 2, então as Equações 5.4 e 5.5 dão

$$L = \hbar\sqrt{2(2+1)} = \hbar\sqrt{6}, \quad \text{e} \quad L_z = 2\hbar.$$

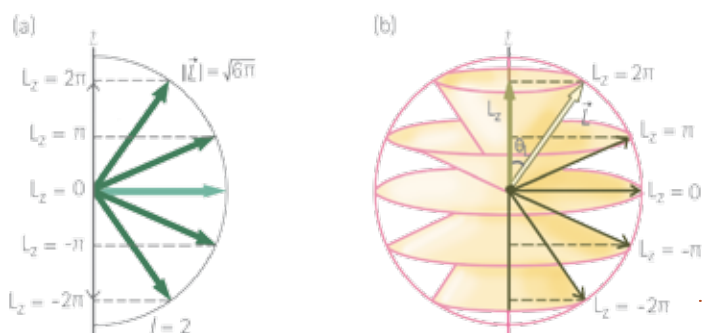


Figura 5.2

A Figura 5.2 mostra essa situação. O valor mínimo do ângulo θ_L entre o vetor \vec{L} e o eixo z é dado por:

$$\theta_L = \cos^{-1} \frac{L_z}{L}$$

A conclusão é que $|L_z|$ é sempre menor que L também é exigido pelo princípio da incerteza. Suponhamos que poderíamos conhecer a direção precisa do momento angular orbital: Então poderíamos deixar que esta seja a direção do eixo z , L_z e seria igual a L . Isso corresponde a uma partícula que se move somente no plano xy , caso em que a componente z do momento linear \vec{p} seria zero, e portanto não haveria incerteza Δp_z . Então o princípio da incerteza $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$, iria requerer uma incerteza infinita em Δz . Isso é impossível para um estado localizado; podemos concluir que não podemos saber a direção de \vec{L} com precisão. Assim, como já foi dito, a componente de \vec{L} em uma determinada direção nunca pode ser tão grande quanto a sua magnitude L . Além disso, se não podemos conhecer a direção de \vec{L} precisamente, não podemos determinar a componentes L_x e L_y precisamente. Assim nós mostramos cones de direções possíveis para \vec{L} na Figura 5.2b.

Você pode se perguntar por que destacamos do eixo z preferencialmente. Não há nenhuma razão fundamental para isso, o átomo, certamente não se importa com o sistema de coordenadas que usamos. O ponto é que não podemos determinar todas as três componentes do momento angular orbital com certeza, assim que nós arbitrariamente escolhemos uma como o componente que queremos medir. Quando discutimos as interações do átomo com um campo magnético, vamos sempre escolher o eixo positivo dos z para estar na direção e sentido de \vec{B} .

Notação dos Números Quânticos

AS FUNÇÕES DE ONDA PARA o átomo de hidrogênio são determinadas pelos valores de três números quânticos: n , l , e m_l . A energia E_n é determinado pelo número quântico principal n de acordo com [Equação 5.3](#). O módulo do momento angular orbital é determinado pelo número quântico orbital l , como na [Equação 5.4](#). O componente do momento angular orbital em uma direção de um eixo específico (habitualmente o eixo z) é determinado pelo número quântico magnético m_l , como na [Equação 5.5](#). A energia não depende dos valores de l , ou m_l , ([Figura 5.3](#)), então para cada nível de energia E_n dado pela [Equação 5.3](#), há mais de um estado distinto a ter a mesma energia, porém diferentes números quânticos. A existência de mais de um estado distinto, com a mesma energia é chamado de degenerescência, e não tem contrapartida no modelo de Bohr.

Estados com diferentes valores do número quântico orbital l são rotulados com letras, de acordo com o seguinte esquema:

l	Estado
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g
5	h

Tabela 5.1

e assim por diante em ordem alfabética. Esta escolha aparente-

mente irracional das letras s, p, d, e f tem sua origem no início dos estudos de espectroscopia e não tem significado fundamental. Em uma forma importante de notação espectroscópica que usaremos muitas vezes, um estado com $n=2$ e $l=1$ é chamado de estado 2p, um estado com $n=4$ e $l=0$ é um Estado 4s, e assim por diante. Apenas estados $s(l=0)$ são esfericamente simétricos.

Aqui está mais um pouco de notação. A extensão radial das funções de onda aumenta com o número quântico principal n , e podemos falar de uma região de espaço associado a um determinado valor de n como uma camada. Especialmente em discussões de átomos de muitos elétrons, essas camadas são indicados por letras maiúsculas:

n	Camada
1	K
2	L
3	M
4	N
5	O

Tabela 5.2

e assim por diante em ordem alfabética. Para cada n , valores diferentes de l correspondem a diferentes subcamadas. Por exemplo, a camada L ($n=2$) contém a 2s e 2p subcamadas.

A Tabela 5.3 mostra algumas das possíveis combinações dos números quânticos n , l , e m_l por funções de onda do átomo de hidrogênio. A notação espectroscópica e a notação para cada camada também são mostrados.

n	l	m_l	Notação Espectroscópica	Camada
1	0	0	1s	K
2	0	0	2s	} L
2	1	-1, 0, 1	2p	
3	0	0	3s	} M
3	1	-1, 0, 1	3p	
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	
4	0	0	4s	N

Tabela 5.3

Distribuições de Probabilidade do Elétron

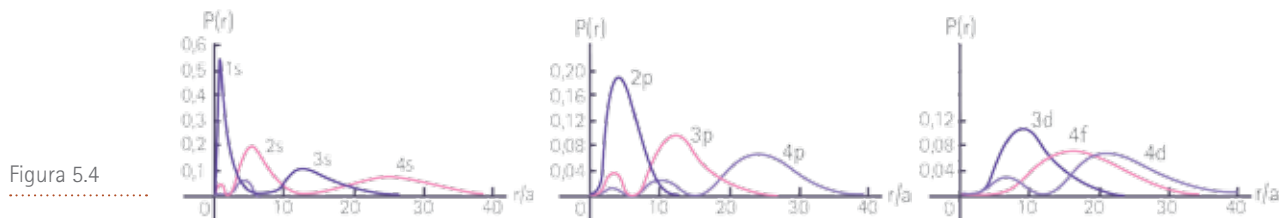
Ao invés de imaginar o elétron como uma partícula pontual que se move em um círculo preciso, a equação de Schrödinger dá uma distribuição de probabilidade em torno do núcleo. Porque as distribuições de probabilidade do átomo de hidrogênio são tridimensionais, são mais difíceis de visualizar do que as órbitas bidimensional circular do modelo de Bohr. É útil considerar a distribuição de probabilidade radial $P(r)$, que é a probabilidade por unidade de comprimento radial para o elétron a certa distância dos prótons. A probabilidade de encontrar o elétron em um elemento de pequeno volume dV é $|\psi|^2 dV$. (Supomos que ψ é normalizada, ou seja, que a integral de $|\psi|^2 dV$ sobre todo o espaço é igual a unidade, de modo que é 100% de probabilidade de encontrar o elétron em algum lugar do universo.) Vamos tomar como elemento de volume uma casca fina esférica de raio r interno e raio externo $r + dr$. O volume dV dessa casca é de aproximadamente sua área $4\pi r^2$ multiplicado por sua espessura dr :

Equação 5.6 $dV = 4\pi r^2 dr.$

Denotamos por $P(r)dr$ a probabilidade de encontrar a partícula dentro da camada radial dr , então,

Equação 5.7 $P(r)dr = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr.$

Para funções de onda que dependem de (r, θ, φ) , usamos o valor da média de $|\psi|^2$ sobre todos os ângulos na [Equação 5.7](#).



A [Figura 5.4](#) mostra gráficos de $P(r)$ para várias funções de onda do átomo de hidrogênio. As escalas em r é indicada em múltiplos de “ a ”, sendo “ a ” a menor distância entre o elétron e o núcleo do modelo de Bohr:

$$a = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m_e \pi e^2} = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m. (raio de Bohr)}$$

Equação 5.8

Assim como para uma partícula em uma caixa, existem algumas posições onde a probabilidade é zero. Mas, novamente, o princípio da incerteza nos diz para não se preocupar; não podemos localizar exatamente o elétron de qualquer maneira. Note-se que para os estados com valores de l maiores possíveis para cada n (como é para os estados 1s, 2p, 3d, e 4f), $P(r)$ tem um único máximo em $r=n^2a$. Para esses estados, o elétron é mais provável de ser encontrado na distância do núcleo que é previsto pelo modelo de Bohr, $r=n^2a$.

A **Figura 5.4** mostra funções de distribuição radial de probabilidade $P(r)=4\pi r^2|\psi|^2$, que indica a probabilidade relativa de encontrar o elétron dentro de uma fina camada esférica de raio r . Pelo contrário, as **Figuras 5.5 e 5.6** mostram, em três dimensões, funções distribuição de probabilidade $|\psi|^2$, que indica a probabilidade relativa de encontrar o elétron dentro de uma pequena caixa em uma determinada posição. Quanto mais escura a “nuvem” maior o valor de $|\psi|^2$.

A **Figura 5.5** mostra secções transversais das nuvens esfericamente simétrica de probabilidade das três subcamadas s, para o qual $|\psi|^2$ depende apenas da radial coordenada r .

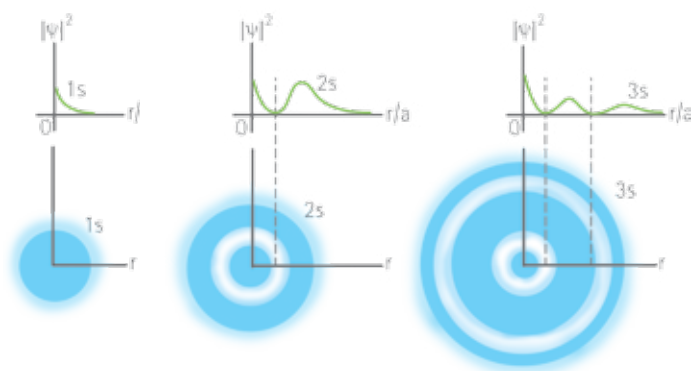


Figura 5.5

Átomo de Hidrogênio

A **Figura 5.6** mostra secções transversais das nuvens de elétrons para outros estados para os quais uma $|\psi|^2$ depende tanto de r quanto de θ . Em todos os estados estacionários do átomo de hidrogênio, $|\psi|^2$ é independente de ϕ .

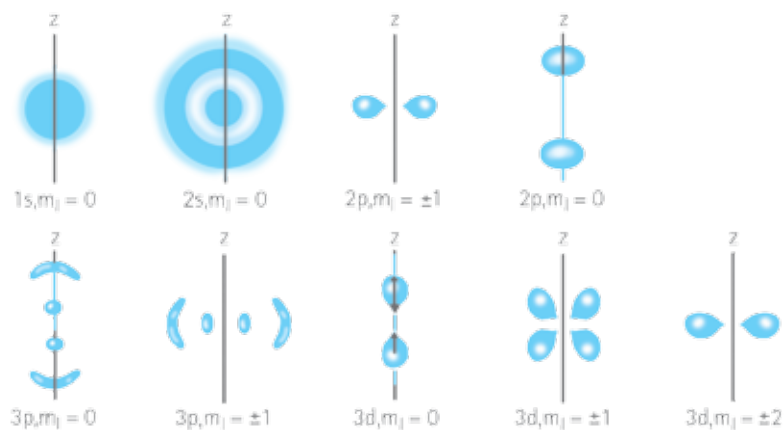


Figura 5.6

O spin do Elétron

Apesar do sucesso da equação de Schrodinger na previsão dos níveis de energia dos o átomo de hidrogênio, observações experimentais indicam que o modelo não diz toda a história do comportamento dos elétrons nos átomos. Primeiro, porque os espectroscopistas encontraram outros desdobramentos, além dos que já vimos.

O experimento de Stern-Gerlach

Otto Stern e Gerlach Walter, em 1922 na Alemanha, estavam pesquisando efeitos de campos magnéticos em feixe atômico. Quando eles fizeram um feixe de átomos neutros passar por um campo magnético não uniforme (Figura 5.7), os átomos eram desviada de acordo com a orientação dos seus momentos magnéticos com relação ao campo. Estas experiências demonstraram a quantização do momento angular de uma maneira muito direta. Se houvesse apenas momento angular orbital, o campo magnético causaria deflexões que iriam dividir o feixe em um número ímpar $(2l+1)$ de diferentes componentes. No entanto, alguns feixes atômicos foram divididos em um número par de componentes. Se usarmos um j símbolo diferente para um número quântico de momento angular, a configuração $2j+1$ igual a um número ainda dá $j=1/2, 3/2, 5/2, \dots$, sugerindo um momento angular semi-inteiro. Isso não pode ser

entendido com base no modelo de Bohr e imagens similares da estrutura atômica dadas somente pela Equação de Schrodinger.

Em 1925, dois estudantes de pós-graduação na Holanda, Samuel Goudsmidt e George Uhlenbeck, propuseram que o elétron pode ter algum movimento adicional. Usando um modelo semi-classico, eles sugeriram que o elétron pode se comportar como uma esfera de carga rodando, em vez de uma partícula. Se for assim, teria um adicional de momentum angular adicional de spin (rotação), e um correspondente momento angular magnético. Se estes eram quantizadas da mesma forma que o momento angular orbital e momento magnético, eles podem ajudar a explicar o que era observado nos nível de energia.

Uma analogia para o spin do Elétron

Para introduzir o conceito de spin do elétron, vamos começar com uma analogia. A terra viaja em uma órbita quase circular em torno do sol e, ao mesmo tempo em que gira em torno de seu eixo. Cada movimento tem seu momento angular associados: que chamamos de orbital (rotação em torno do Sol) e momento angular de spin (rotação em torno de seu eixo) respectivamente. O momento angular total da terra é a soma vetorial dos dois. Se fôssemos modelar a Terra como um único ponto, ele não teria nenhum momento de inércia sobre seu eixo de rotação e, portanto, nenhuma rotação momentum angular. Mas quando o nosso modelo inclui o tamanho finito da terra, o momento angular de rotação intrínseca-spin, torna-se possível.

No modelo de Bohr, suponha que o elétron não é apenas uma carga pontual, mas uma pequena esfera que se move em órbita. Seguindo o raciocínio, o elétron não só tem momento angular orbital, mas também momento angular de rotação em torno de seu eixo. A esfera carrega uma carga elétrica, de modo que o movimento de rotação leva a “loops” de corrente produzindo um momento magnético.

Números Quânticos de Spin

Como momento angular orbital o momento angular de spin de um elétron (indicado por \vec{S}) é quantizado. Suponha que temos alguns aparelhos que medem um determinado componente de \vec{S} , digamos que a componente S_z . Acharmos que o apenas os valores possíveis são

Equação 5.9

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar.$$

Esta relação lembra a expressão, $L_z = m_l \hbar$ para a componente z . A Equação 5.9 também sugere que a magnitude S do momentum angular de spin é dada por uma expressão análoga à Equação 5.4, com o número quântico orbital l substituído pelo número quântico de spin $s = \frac{1}{2}$,

Equação 5.10

$$S = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)} = \hbar \sqrt{\frac{3}{4}}.$$

O elétron é muitas vezes chamado de “partícula com spin- $\frac{1}{2}$ ”. O modelo de Bohr dá uma visão simplista do comportamento de elétrons. Em mecânica quântica, as órbitas de Bohr são substituídas por distribuições de probabilidade $|\psi|^2$, não podemos realmente ter uma imagem do spin do elétron. Se visualizarmos uma distribuição de probabilidade como uma nuvem que envolve o núcleo, então podemos imaginar minúscula setas distribuídas por toda a nuvem, com todas as setas apontadas para cima ou para baixo. Mas não tome essa imagem muito a sério. Para identificar completamente o estado do elétron em um átomo de hidrogênio, precisamos agora de um quarto número quântico m para especificar a orientação do spin do elétron. Para um elétron damos m o valor $+\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$ para concordar com a Equação 5.9:

Equação 5.11

$$S_z = m_s \hbar \quad \left(m_s = \pm \frac{1}{2} \right)$$

O momento angular de spin \vec{S} só pode ter duas orientações no espaço em relação ao eixo z : “spin up” com uma componente z de

$+1/2\hbar$ e “spin down” com uma componente de z $-1/2\hbar$. A componente z do momento magnético de spin associados (μ_z) acaba por estar relacionada com S_z por

$$\mu_z = -2,00232 \frac{e}{2m} S_z, \quad \text{Equação 5.12}$$

onde $-e$ e m são (como de costume) a carga e a massa do elétron; quando o átomo é colocado em um campo magnético, a energia de interação $-\vec{\mu} \cdot \vec{S}$ entre o momento de dipolo magnético de spin com o campo magnético faz com que apareçam desdobramentos adicionais nos níveis de energia e nas linhas de espectro correspondente. A Equação 5.12 mostra que a razão giromagnética para o spin do elétron é aproximadamente duas vezes o valor $e/2m$, que surge quando estudamos o momento angular orbital e momento de dipolo magnético. Este resultado não tem análogo clássico. Mas em 1928 Paul Dirac desenvolveu uma generalização relativística da equação de Schrodinger para elétrons. Sua equação deu uma razão de spin giromagnética de exatamente $2(e/2m)$. Demorou mais de duas décadas para se desenvolver a área da física chamada eletrodinâmica quântica, abreviado QED, que prevê o valor atual que temos, com “apenas” seis algarismos significativos que 2,00232. Na verdade, a QED agora prevê um valor que concorda com uma medição recente de (2006): 2,00231930436170 (152), tornando a QED teoria mais precisa em toda a ciência. Os físicos Sin-Itiro Tomonaga, Julian Schwinger e Richard Feynman foram conjuntamente premiados com um prêmio Nobel de Física em 1965 por seu trabalho nesta área.

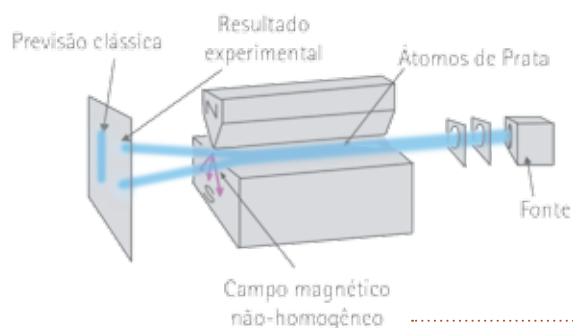


Figura 5.7

Átomos com Muitos Elétrons e o Princípio da Exclusão

Até agora, a nossa análise da estrutura atômica tem se concentrado sobre o átomo de hidrogênio. Isso é natural; hidrogênio neutro, com apenas um elétron, é o átomo mais simples. Se não podemos compreender o hidrogênio, nós certamente não podemos entender mais nada complexo. Mas agora vamos passar para átomos de muitos elétrons. Em geral, um átomo em seu estado (eletricamente neutros) normal tem Z elétrons e Z prótons. Lembre de que chamamos de Z o número atômico. O total de carga elétrica de um átomo é exatamente zero porque o nêutron não tem carga, enquanto os prótons e os elétrons têm a mesma magnitude de carga, mas de sinal contrário.

Podemos aplicar a equação Schrodinger para este átomo geral. No entanto, a complexidade da análise aumenta muito rapidamente com o aumento da Z . Cada um dos Z elétrons interage não só com o núcleo, mas também com outros elétrons. As funções de onda e a energia potencial são funções das $3Z$ coordenadas, e a equação contém derivadas de segunda ordem com respeito a todas essas variáveis. O problema matemático de encontrar soluções de equações tão complexas, que não foi resolvido exatamente até mesmo para o átomo de hélio neutro, que tem apenas dois elétrons.

Felizmente, vários esquemas de aproximação estão disponíveis. A mais simples aproximação é ignorar todas as interações entre elétrons e considerar cada elétron como se movendo sob a única ação do núcleo (considerado uma carga pontual). Nesta aproximação a função de onda de cada elétron é uma função como aqueles para o átomo de hidrogênio, especificado por quatro números quânticos (n, l, m_l, m_s) ; a carga nuclear é Ze , em vez de e . Isto requer a substituição de cada fator de e^2 nas funções de onda e nos níveis de energia por Ze^2 . Em particular, os níveis de energia são dadas pela [Equação 5.3](#), com o fator e^4 substituído por Ze^4 :

Equação 5.13

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2 13,6 \text{ eV}}{n^2}.$$

Esta aproximação é bastante drástica, quando existem muitos elétrons, as suas interações uns com os outros são tão importantes quanto a interação de cada um com o núcleo. Portanto, este modelo não é muito útil para previsões quantitativas.

A aproximação de Campo Central

A APROXIMAÇÃO MENOS DRÁSTICA E mais útil é pensar em todos os elétrons juntos, como uma nuvem que é, em média, de simetria esférica. Podemos, então, pensar em cada elétron individual, movendo-se no campo elétrico total devido ao núcleo e uma nuvem média em volta do núcleo de todos os outros elétrons. Há uma correspondente função $U(r)$ esfericamente simétrica para a energia potencial. Este receituário é chamado de aproximação de campo central, que fornece um ponto de partida útil para a compreensão da estrutura atômica. Se você está desapontado que nós temos que fazer aproximações em um estágio inicial em nossa discussão, tenha em mente que estamos lidando com problemas que, inicialmente, desafiou todas as tentativas de análise, com ou sem aproximações.

Na aproximação de campo central podemos novamente tratar funções de onda de apenas um elétron. A equação Schriidinger difere da equação para o hidrogênio somente no fato que a função de energia potencial $1/r$ é substituída por uma função diferente $U(r)$. Mas verifica-se que em $U(r)$ não entra nas equações diferenciais para $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$. Essas funções angulares são exatamente as mesmas que para o hidrogênio, e os estados de momento angular orbital também são os mesmos de antes. Os números quânticos l , m_l e m_s , têm o mesmo significado que antes, e da magnitude e componente z de o momentum angular orbital são novamente dadas pelas [Equações 5.4 e 5.5](#).

As funções de onda radial e as probabilidades são diferentes do átomo de hidrogênio por causa da mudança em $U(r)$, então os níveis de energia já não são dadas pela [Equação 5.3](#). Ainda podemos rotular um estado usando os quatro números quânticos (n , l , m_l , m_s). Em geral, a energia de um estado depende agora de ambos

os n e l , em vez de apenas em n como com hidrogênio. As restrições sobre os valores dos números quânticos são os mesmo de antes:

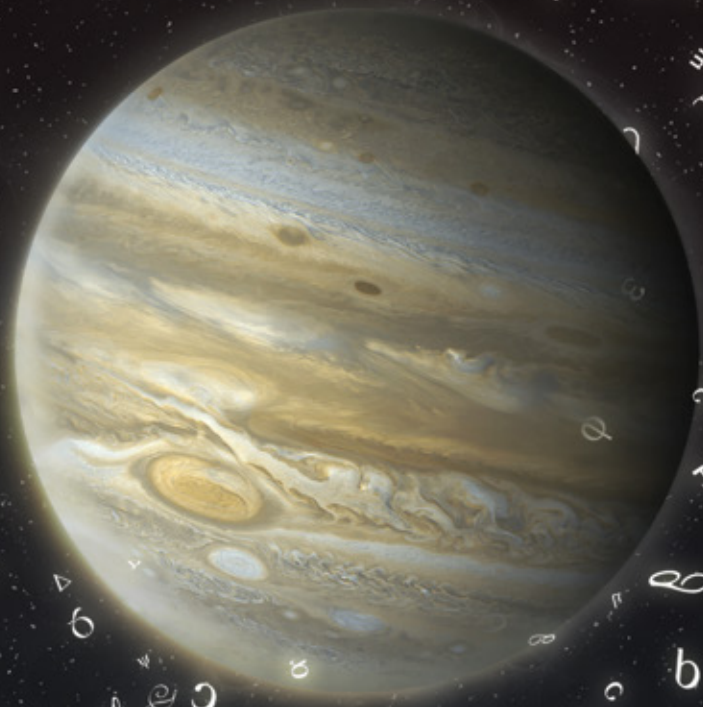
Equação 5.14

$$n \geq 1, \quad 0 \leq l \leq n - 1, \quad |m_l| \leq l, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

O Princípio de Exclusão

Para entender a estrutura de átomos com muitos elétrons, precisamos de um princípio adicional, o princípio de exclusão. Para ver por que esse princípio é necessário, vamos considerar o estado de menor energia ou estado fundamental de um átomo com muitos elétrons. Nos estados de um elétron do modelo de aproximação do campo central, há um estado de menor energia (correspondente a um estado $n=1$ do hidrogênio). Podemos esperar que no estado fundamental de um átomo complexo, todos os elétrons devem estar menor estado de energia. Se você concorda, então devemos ver apenas mudanças graduais nas propriedades físicas e químicas quando olharmos para o comportamento de átomos com um número crescente de elétrons (Z). Tais mudanças graduais não são observadas. Em vez disso, as propriedades dos elementos podem variar muito de um Z para o outro $Z+1$; cada elemento tendo sua própria e distinta “personalidade”. Por exemplo, os elementos: flúor, neon, e sódio têm 9, 10 e 11 elétrons, respectivamente, por átomo. Flúor ($Z=9$) é um halogéneo, que tende fortemente para formar compostos em que cada átomo de flúor adquire um elétron extra. O sódio ($Z=11$) é um metal alcalino, que formam compostos em que cada átomo de sódio perde um elétron. Neônio ($Z=10$) é um gás nobre, formando não se combinando com nenhum outro átomo. Essas observações mostram que no estado fundamental de um átomo complexo os elétrons não podem estar todos nos estados de menor energia. Mas por que não? A chave para este enigma, descoberta pelo físico austríaco Wolfgang Pauli em 1925, é chamado de princípio de exclusão. Este princípio estabelece que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico em um determinado do sistema. Ou seja, não há dois elétrons em um átomo que apresentem os mesmos valores de todos os quatro números quânticos (n, l, m_l, m_s).

Cada estado quântico corresponde a uma certa distribuição da “nuvem” de elétrons no espaço. Portanto decorre que, não mais que dois elétrons com valores opostos de spin pode ocupar a mesma região do espaço. Nós não devemos tomar esta última declaração muito a sério, porque as funções de probabilidade de elétrons não têm fronteiras definidas. Mas o princípio de exclusão limita a quantidade que funções de onda de elétrons que podem se sobrepor. Pense nisso como uma mecânica quântica análoga a anterior somente com uma regra a mais: como uma regra que permite que a ocupação de sala de aula, por exemplo, seja de apenas um aluno por carteira.



capítulo 6

Sólidos: Condutores,
Semicondutores e Supercondutores

Bandas de Energia

O conceito de banda de energia, lançado em 1928 (Figura 6.1), é de grande ajuda para se compreender várias propriedades de sólidos. Para introduzir a idéia, suponha que exista um grande número N de átomos idênticos, longe o suficiente para que suas interações sejam desprezíveis. Cada átomo tem o mesmo diagrama de níveis de energia. Podemos traçar um diagrama de níveis de energia para o sistema como um todo. Ele será uma superposição de orbitais de átomos individuais, e vai se parecer com o diagrama de um único átomo, mas o princípio de exclusão, aplicado a todo o sistema, permitirá a cada estado ser ocupado por elétrons N , em vez de apenas um.

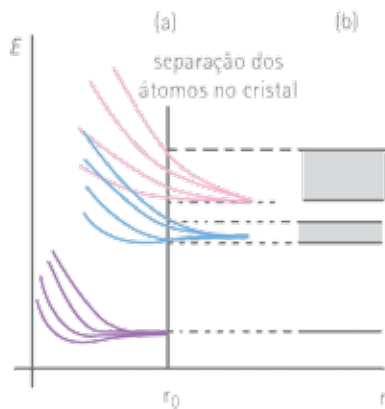


Figura 6.1

Vamos descrever como isto ocorre: começamos a empurrar os átomos uniformemente mais próximos. Por interações elétrica e pelo princípio de exclusão, as funções de onda se superpõem e começam a se distorcer, especialmente as que descrevem o elétron das camadas mais externas, ou os elétrons de valência. As correspondentes energias de ocupação das camadas eletrônicas também mudam, alguns para cima e algumas para baixo. Então as funções de onda de elétrons tornam-se menos localizadas e se estendem por mais e mais átomos. Assim, os estados de valência (das camadas eletrônicas de um átomo) que anteriormente eram bem definidas, estabelecendo onde cada elétron iria habitar, começam a se fundir em regiões que chamamos de bandas (Figura 6.1). Ordinariamente, N é muito grande, da ordem do número de Avogadro (10^{24}), deste

modo possamos a tratar os níveis que colapsaram para formar a banda, como formando uma distribuição contínua de energias dentro da banda. Entre as bandas de energia adjacentes existem lacunas ou regiões proibidas. Os elétrons internos são menos influenciados pelos átomos vizinhos, e seus níveis tem uma superposição menor, formando uma banda muito estreita.

Isolantes, semicondutores e condutores

A natureza das bandas de energia determina se o material é um isolante elétrico, um semicondutor ou um condutor. Em particular, o que importa é em que medida os estados em cada banda estão ocupados e o espaçamento, ou lacuna de energia entre bandas adjacentes. Um fator crucial é o princípio de exclusão, que afirma que apenas um elétron pode ocupar um dado estado da mecânica quântica.

Em isolantes à temperatura do zero absoluto, a banda de maior energia que está completamente cheia, é chamada de banda de valência. Pode ser também a maior banda que tenha qualquer elétron. A banda imediatamente superior, chamada de banda de condução, é completamente vazia há elétrons em seus estados (Figura 6.1a). Imagine o que acontece se um campo elétrico for aplicado a um material deste tipo. Para mover-se em resposta ao campo, um elétron teria que entrar em um estado quântico diferente, com uma energia um pouco diferente. Ele não pode fazer isso, no entanto, porque todos os estados vizinhos já estão ocupados. A única maneira desse elétron pode mover-se é saltar através do gap de energia, e alcançar a banda de condução, onde há abundância de estados vizinhos desocupados. Em qualquer temperatura acima do zero absoluto há alguma probabilidade desse salto poder acontecer, porque um elétron pode ganhar energia a partir de movimento térmico. Em um isolante, no entanto, a lacuna de energia (gap) entre bandas de valência e de condução pode ser de 5eV ou mais. Esta quantidade de energia térmica a ser fornecida para o salto do elétron não está normalmente disponível. Portanto pouca ou nenhuma corrente flui em resposta a um campo elétrico aplicado,

e a condutividade elétrica é baixa. A condutividade térmica, que também depende da mobilidade dos elétrons é igualmente baixa.

Um isolante se torna um condutor, se for submetido a um campo elétrico suficientemente grande, o que é chamado de ruptura dielétrica. Se o elétrico campo é da ordem de $10^{10}V/m$, há uma diferença de potencial de alguns volts a uma distância comparável às dimensões de um átomo. Neste caso, o campo pode fazer um trabalho suficiente em um elétron de valência para impulsioná-lo através do gap de energia para a banda de condução. (Na prática, ocorre ruptura dielétrica para campos muito menor do que $10^{10}V/m$ por causa das imperfeições da rede, que fornecer alguns estados de energia mais acessível dentro do gap de energia.)

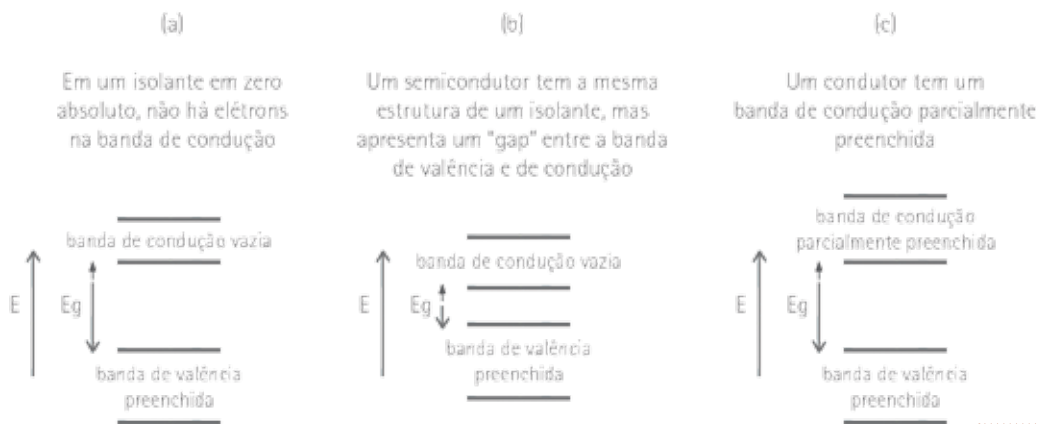


Figura 6.2

Como em um isolante, um semicondutor no zero absoluto tem uma banda de condução vazia acima da banda de valência completa. A diferença é que em um semicondutor a diferença de energia entre essas bandas é relativamente pequena e os elétrons podem mais facilmente saltar para a banda de condução (Figura 6.2b). À medida que a temperatura de um semicondutor aumenta, a população na banda de condução aumenta muito rapidamente, assim como a condutividade elétrica. Por exemplo, em um semicondutor perto da temperatura ambiente, com um gap de energia de $1eV$, o número de elétrons de condução dobra quando a temperatura se eleva de apenas $10^\circ C$. Em um condutor, como um metal, há elétrons na banda de condução, mesmo no zero absoluto (Figura 6.2c).

O Elétron em Metais

Estudar os estados de energia dos elétrons em metais pode nos dar um monte de “insights” para explicar suas propriedades elétricas e magnéticas, as contribuições de elétrons ao calor específico, e outros comportamentos. Uma das características distintivas de um metal é que um ou mais elétrons de valência estão separadas seu átomo de origem e podem se mover livremente dentro do metal, com funções de onda que se estendem por muitos átomos.

No modelo de elétrons livres, se assume que esses elétrons estão completamente livres no interior do material, que eles não interagem com nada com os íons ou uns com os outros, mas que existe uma barreira de potencial de energia infinita nas superfícies do metal. As funções de onda e níveis de energia são, então, as versões tridimensionais daqueles para as partículas em uma caixa que analisamos anteriormente em uma dimensão.

Suponha que o caixa é um cubo com lados de comprimento L (Figura 6.3). Em seguida, as funções de onda possíveis, análogas à Equação 4.21, são

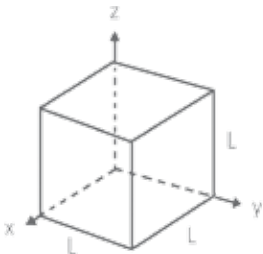


Figura 6.3

Equação 6.1

$$\psi(x, y, z) = A \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L},$$

sendo (n_x, n_y, n_z) um conjunto de três números quânticos positivos inteiros que identificam o estado. Convido você a verificar que estas funções são zero nas superfícies do cubo, satisfazendo as condições de contorno. Você também pode substituir a Equação 6.1 na equação Schroedinger tridimensional, com $U=0$ para mostram que as energias dos estados são,

Equação 6.2

$$E = \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Esta equação é o análogo tridimensional da Equação 4.20 para os níveis de energia de uma partícula em uma caixa.

Densidade de Estados

Mais tarde vamos precisar saber o número dn de estados quânticos, cujas energias se encontram dentro de um dado intervalo dE . O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia dn/dE é chamado de densidade de estados, denotado por $g(E)$. Vamos começar por deduzir uma expressão para $g(E)$. Pense em um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) (Figura 6.4). O raio obtido por $n_{rs}^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. Cada ponto com coordenada inteira nesse espaço representa um número quântico espacial.

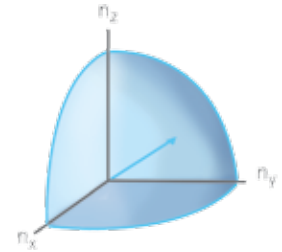


Figura 6.4

Assim, cada ponto corresponde a uma unidade de volume no espaço, e o número total de pontos com coordenadas inteiras no interior de uma esfera é igual ao volume da esfera, $\frac{4}{3}\pi n_{rs}^3$. Porque todos os nossos n são positivos, devemos ter apenas um octante da esfera, com um volume total, ou $\frac{1}{8}(\frac{4}{3}\pi n_{rs}^3)$. As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos ($m_s = \pm 1/2$), e o número total n estados de elétron correspondentes aos pontos dentro do octante é duas vezes, $\frac{1}{8}(\frac{4}{3}\pi n_{rs}^3)$, ou

$$n = \frac{\pi n_{rs}^3}{3}. \quad \text{Equação 6.3}$$

A energia E de estados na superfície da esfera pode ser expresso em termos de n_{rs} . A Equação 6.2 torna-se

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_{rs}^2}{2mL^2}. \quad \text{Equação 6.4}$$

Podemos combinar as Equações 6.3 e 6.4 para obter uma relação entre E e n que não tenha n_{rs} . Nós vamos deixar os detalhes como um exercício e o resultado é

$$n = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V E^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3}, \quad \text{Equação 6.5}$$

sendo que $V=L^3$ é o volume da caixa. A Equação 6.3 dá o número total de estados com energias até E .

Para obter o número de estados dn em uma energia de intervalo dE , nós tratamos n e E como variáveis contínuas e diferenciamos a

equação anterior para chegar a

Equação 6.6

$$dn = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V E^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} dE.$$

A densidade de estados $g(E)$ é igual a dn/dE , e de acordo com a Equação 6.6,

Equação 6.7

$$g(E) = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V}{2\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{1}{2}}.$$

Distribuição de Fermi-Dirac

Precisamos saber qual é a influência da temperatura em nosso comportamento quântico, ou seja, como os elétrons estão distribuídos entre os vários estados quânticos em qualquer temperatura. A distribuição de Maxwell-Boltzmann estados nos diz que o número médio de partículas em um estado de energia E é proporcional a $e^{-E/kT}$. No entanto, há duas razões muito importantes por que não se deva usar a distribuição de Maxwell-Boltzmann. A primeira razão é o princípio de exclusão. No zero absoluto a função Maxwell-Boltzmann prevê que todos os elétrons entrariam nos dois estados fundamentais do sistema com $n_x = n_y = n_z = 1$ e $m_s = \pm 1/2$. Mas o princípio de exclusão permite apenas um de elétrons em cada estado. No zero absoluto os elétrons podem preencher os menores estados disponíveis, mas, pelo princípio de exclusão, não há espaço suficiente para acomodar todos no menor estado. Assim, uma suposição razoável quanto à forma da distribuição seria **Figura 6.5**. À temperatura zero absoluto os estados são preenchidos até algum valor E_F e todos os estados acima deste valor estão vazios.

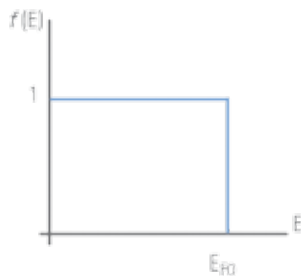


Figura 6.5

A segunda razão pela qual não podemos usar a distribuição de Maxwell-Boltzmann é mais sutil. A distribuição assume que estamos lidando com partículas distinguíveis. Pode parecer que poderíamos colocar uma etiqueta em cada elétron para identificá-los. Mas os elétrons se superpõem em sistemas quânticos como um metal, e portanto são indistinguíveis. Suponha que temos dois elétrons: um no estado E_1 e outro no estado E_2 . Supondo que houvesse uma

inversão de estados não teríamos como distinguir esta nova situação da anterior. Então concluímos que, devido à impossibilidade de acompanhar os elétrons em todos os instantes não podemos dizer dos elétrons qual é qual. A função de distribuição estatística que emerge do princípio de exclusão e a exigência indistinguibilidade é chamado de distribuição de Fermi-Dirac (em homenagem a seus criadores). De acordo com o princípio de exclusão, a probabilidade de que um determinado estado com energia E seja ocupado é dada por $f(E)$, ou seja, a fração de estados ocupados com essa energia:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1} \quad \text{Equação 6.8}$$

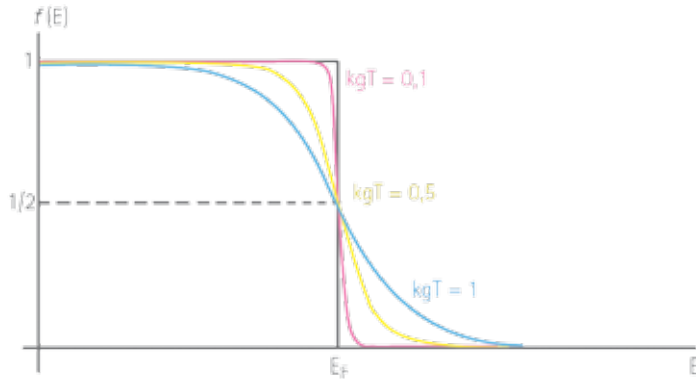


Figura 6.6

Concentração de Elétrons e Energia de Fermi

A **Equação 6.8** dá a probabilidade de que qualquer estado específico com energia E seja ocupado em uma temperatura T . Para obter o número real de elétrons em qualquer faixa de energia dE , temos de multiplicar esta probabilidade pelo número dn de estados na faixa de $g(E)dE$. Assim, o número dN de elétrons com energias no intervalo dE é

$$dN = g(E)f(E)dE = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}VE^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} \frac{1}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1} dE \quad \text{Equação 6.9}$$

A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons; em qualquer temperatura os estados de elétrons são pre-

enchidos até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados. No zero absoluto, há uma relação simples entre E_F e N . Todos os estados abaixo E_F são preenchidos; na [Equação 6.5](#) estabelecemos n igual ao número total de elétrons N e igualamos a E com a energia de Fermi no zero absoluto:

Equação 6.10

$$N = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V E_F^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Isolando E_F ,

Equação 6.11

$$E_F = \frac{3^{\frac{2}{3}} \pi^{\frac{4}{3}} \hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{3^{\frac{2}{3}} \pi^{\frac{4}{3}} \hbar^2}{2m} (n)^{\frac{2}{3}}.$$

A grandeza $\frac{N}{V} = n$ é chamada de concentração de elétrons.

Energia média de elétrons livres

Podemos calcular a energia média de elétrons livres em um metal no zero absoluto utilizando as mesmas idéias que foram empregadas para encontrar E_F . Da [Equação 6.9](#) o número dN de elétrons com energias na faixa dE é igual a $g(E)f(E)dE$. A energia dessas elétrons é $E dN = E g(E) f(E) dE$. No zero absoluto temos que substituir $f(E) = 1$ desde $E = 0$ até $E = E_F$ e $f(E) = 0$ para todas as demais energias. Então a energia total de todos os N elétrons é

Equação 6.12

$$E_{tot} = \int_0^{E_F} E g(E) (1) dE + \int_{E_F}^{\infty} E g(E) (0) dE = \int_0^{E_F} E g(E) (1) dE.$$

A maneira mais simples para avaliar esta expressão é comparar as [Equações 6.7](#) e [6.11](#), observando que

Equação 6.13

$$g(E) = \frac{3NE^{\frac{1}{2}}}{2E_F^{\frac{3}{2}}} = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V E_F^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Substituindo esta expressão na integral e usando que $E_{média} = \frac{E_{tot}}{N}$, nós obtemos:

$$E_{\text{m\u00e9dia}} = \frac{3}{2E_F^2} \int_0^{E_F} E^{\frac{3}{2}} dE = \frac{3}{5} E_F$$

Equa\u00e7\u00e3o 6.14

Isto \u00e9, no zero absoluto a energia de el\u00e9trons livres m\u00e9dia igual a $\frac{3}{5} E_F$ da correspondente energia de Fermi. Note que este resultado \u00e9 bastante surpreendente, pois a f\u00edsica cl\u00e1ssica esperaria que os el\u00e9trons estivessem parados! Se voc\u00ea fizer um calculo da velocidade associada ao el\u00e9tron vai ficar mais surpreso ainda!

Supercondutividade

O f\u00edsico holand\u00eas H. Kamerlingh Onnes, em 1911, poucos anos depois de ter conseguido liquefa\u00e7\u00e3o de h\u00e9lio, enquanto estava investigando as propriedades de materiais em baixas temperaturas, banhadas por h\u00e9lio l\u00edquido, ele descobriu que, para alguns materiais, existe uma determinada temperatura, chamado de temperatura cr\u00edtica T_c , em que abaixo dela a resistividade \u00e9 zero e que portanto, a condutividade torna-se infinita. Ele chamou esse fen\u00f4meno da supercondutividade. A **Figura 6.7** mostra o gr\u00e1fico obtido por Kamerlingh Onnes da resist\u00eancia do merc\u00farrio versus temperatura. A temperatura cr\u00edtica para o merc\u00farrio \u00e9 de 4.2K.

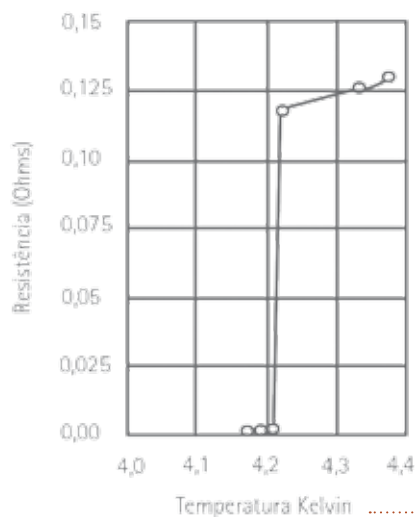


Figura 6.7

A temperatura cr\u00edtica varia de material para material, mas abaixo dessa temperatura a resist\u00eancia el\u00e9trica do material \u00e9 zero.

As temperaturas críticas de diversos materiais supercondutores são apresentados na [Tabela 6.1](#).

Tipo I Elemento	$T_c(K)$	$B_c(T)$ em OK	Tipo II Elemento	$T_c(K)$	$B_{c2}(T)$ em OK
Al	1,175	0,0105	Nb ₃ Sn	18,1	24,5
Cd	0,517	0,0028	Nb ₃ Ge	23,2	34,0
Hg	4,154	0,0411	NbN	16,0	35,0
Nb	9,25	0,2060	V ₃ Si	17,1	15,6

Tabela 6.1

Na presença de um campo magnético B , a temperatura crítica é inferior ao que é quando não há nenhum campo. À medida que se aumenta o campo magnético, a temperatura crítica diminui, como ilustrado na [Figura 6.9](#). Quando o campo magnético aplicado na amostra supercondutora ultrapassar um valor crítico B_c , a supercondutividade deixa de existir em qualquer temperatura. Os valores de T_c na tabela são para $B=0$.

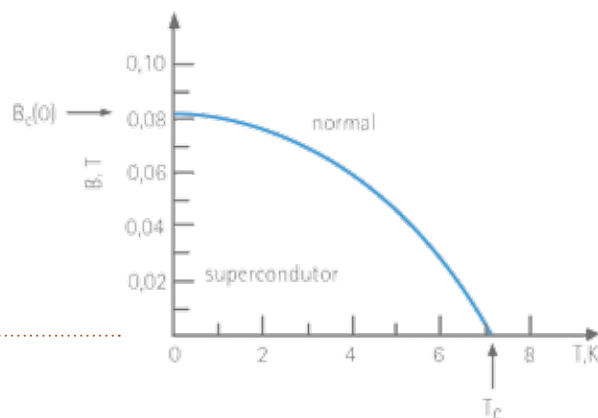


Figura 6.8

Muitos compostos metálicos também são supercondutores. Por exemplo, a liga supercondutora Nb₃Ge, descoberta em 1973, tem uma temperatura crítica de 23,2K, que foi o mais alto conhecido até 1986, quando a primeira cerâmica supercondutora foi descoberta. Mais recentemente, em junho de 2001 Akimitsu descobriu que o MgB₂ composto metálico, tornou-se supercondutor a 39K, considerado hoje como o composto metálico de mais alto T_c (Veja a [Tabela 6.1](#)). Apesar de o custo e a inconveniência de de refrigeração com hélio líquido (é bastante caro), que ferve a 4,2K, muitos ímãs supercondutores têm sido construídos com esses materiais.

Efeito Meissner

Considere um material supercondutor que está originalmente em uma temperatura superior à temperatura crítica e está na presença de um campo magnético externo pequeno $B < B_c$. Agora resfriamos o material abaixo da temperatura crítica modo que a se tornar supercondutor. Deste modo, resistência agora é zero, e não pode haver diferença de potencial no supercondutor. Assim, pela lei de indução de Faraday, os elétrons vão se mover de modo a se opor a variação do campo magnético no interior do supercondutor. Esperamos, portanto, pela física clássica que o campo magnético no supercondutor permanecerá constante. No entanto, observa-se experimentalmente que, quando um supercondutor é resfriado abaixo da temperatura crítica em um campo magnético externo, as linhas do campo magnético são expulsas do supercondutor e, portanto, o campo magnético dentro do supercondutor é zero. (Veja a [Figura 6.9](#)).

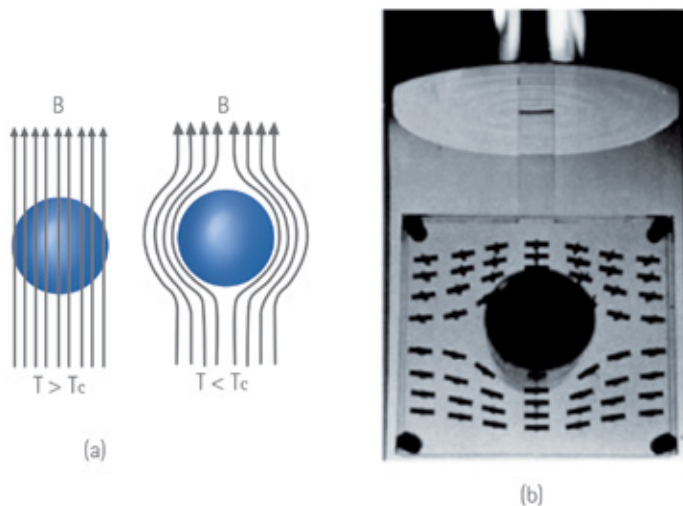


Figura 6.9

Este efeito foi descoberto por H. W. Meissner e R. Ochsenfeld em 1933 e ficou conhecido como efeito Meissner. O mecanismo pelo qual as linhas de campo são expelidas é o seguinte: uma supercorrente (chamada de corrente de blindagem) é induzida na superfície da amostra supercondutora. Esta corrente se organiza de modo a produzir um campo magnético na mesma direção, de modo a exatamente anular o campo externo dentro do material. Assim,

o supercondutor apresenta diamagnetismo perfeito. A criação desta supercorrente “custa” ao supercondutor uma quantidade de energia por unidade de volume proporcional a B^2 (energia magnética). Quando o campo B torna-se maior do que B_c , não há energia suficiente disponível para barrar o campo externo, e o material é revertido para seu estado “normal” com resistência não nula. A levitação magnética mostrado na foto abaixo, resulta da repulsão entre o ímã permanente que produz o campo magnético externo e do campo produzido pelas correntes induzidas no supercondutor.

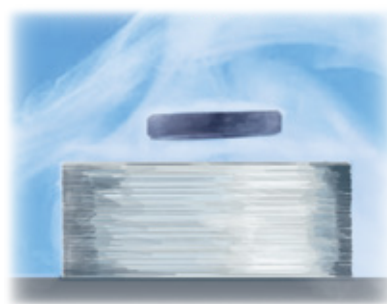


Figura 6.10
Flutuação Magnética

Apenas certos supercondutores, os chamado **Supercondutores do Tipo I**, ou “*soft*”, apresentam o efeito Meissner completo. Supercondutores do Tipo I são principalmente elementos metálicos muito puros. A **Figura 6.11** mostra um gráfico da magnetização M vezes contra o campo magnético aplicado para um supercondutor do tipo I.

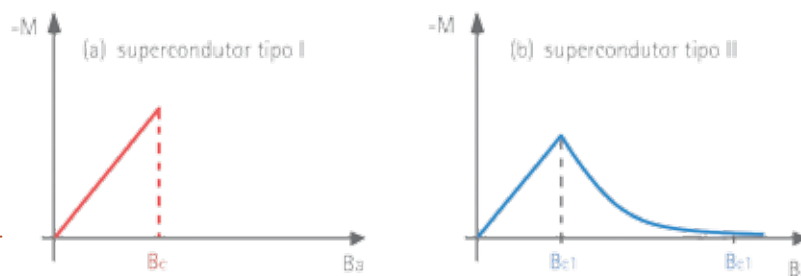


Figura 6.11

Para um campo magnético menor que o campo crítico B_c , o campo magnético induzido no supercondutor é igual e oposto ao campo magnético externo, ou seja, o supercondutor é um diamagneto perfeito. Os valores de B_c para os supercondutores do Tipo I são todos muito pequeno para tais materiais serem usados como bobinas supercondutoras. (Veja a **Tabela 6.1**). Outros materiais,

conhecidos como Supercondutores do Tipo II, ou supercondutores “hard”, têm uma curva de magnetização semelhante ao da **Figura 6.11b**. Tais materiais são geralmente ligas ou metais que têm resistividade grande no estado normal. Os Supercondutores do Tipo II exibem dois campos críticos magnéticos, B_{c1} e B_{c2} , como mostrado na **Figura 6.11b**, os supercondutores do Tipo II possuem dois campos magnéticos críticos B_{c1} e B_{c2} .

Para campos aplicados menores que B_{c1} , a blindagem do campo magnético é total, e a amostra inteira permanece supercondutora. Se o campo aplicado é maior que B_{c2} , o campo magnético penetra em toda amostra e ela volta ao estado normal. Para campos aplicados entre B_{c1} e B_{c2} há uma penetração parcial do campo magnético, e as linhas de campo se concentram em tubos de fluxo chamados de vórtices. No interior dos vórtices o material fica em seu estado normal.

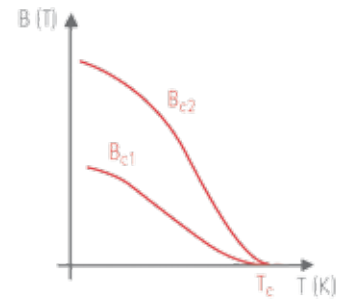


Figura 6.12

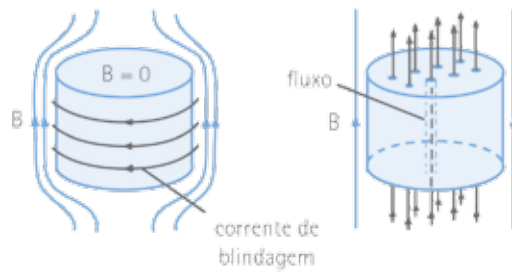


Figura 6.13

Referências Bibliográficas

ALONSO, M.; FINN, E. J. Física: um curso universitário. Edgard Blücher, vol. II, 2003.

FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. Lições de Física de Feynman. Bookman, vol. I., 2008.

HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J., Fundamentos de Física. 8a. Edição LTC, 2008.

SEARS, F.; ZEMANSKY, M. W.; YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A., Física IV: ótica e física moderna. 10a. Ed. Pearson Addison Wesley, vol. IV, 2004.

Humberto Belich Junior

Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq - Nível 2, possui graduação em Física pela Universidade de São Paulo (1992), mestrado em Física pelo Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (1997), doutorado em Física pelo Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (2003), pós-doutorado pela Universidade Federal do Espírito Santo (2005), pós-doutorado pela The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (2008), pós-doutorado pelo Centro Internacional de Física da Matéria Condensada (2009) e pós-doutorado pela International Institute of Physics-UFRN (2010). Atualmente é Adjunto da Universidade Federal do Espírito Santo e Scientific Journal Referee da Annalen der Physik (Leipzig). Tem experiência na área de Física, com ênfase em Física das Partículas Elementares e Campos. Atuando principalmente nos seguintes temas: Física além do modelo Padrão, Planar Gauge Theories, supersimetria, Quebra de simetria de Lorentz.



UFES

www.neaad.ufes.br

(27) 4009 2208

