



Estrutura Atômica

Moisés André Nisenbaum

Este documento tem nível de compartilhamento de acordo com a licença 3.0 do [Creative Commons](http://creativecommons.org).



<http://creativecommons.org.br>
<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/br/legalcode>

Parabéns! Você acaba de ganhar uma viagem ao mundo insólito do interior da matéria

Sumário

Introdução.....	3
O que compõe o mundo que nos rodeia?.....	3
Breve história dos elementos químicos.....	4
Modelos atômicos.....	6
Modelo atômico de Dalton.....	7
Alguns fatos da história da eletricidade.....	9
O átomo é indivisível mesmo?.....	11
Raios catódicos.....	11
Mas o que seriam os raios catódicos.....	12
Modelo atômico de Thomson.....	13
Modelo atômico de Rutherford.....	14
Radioatividade.....	14
O experimento de Geiger-Marsden.....	15
Partículas subatômicas.....	18
Descoberta do próton.....	18
Descoberta do nêutron.....	19
Números atuais relacionados às partículas subatômicas.....	20
Observação com relação à notação.....	20
A e o raio do núcleo.....	21
Z e a identidade dos elementos químicos.....	21
Isótopos.....	22
Mecânica Quântica.....	22
Ondas estacionárias em uma corda.....	23
Natureza ondulatória da luz.....	24

Difração da luz	25
Limitações nas observações causadas pela difração	25
Interferência	26
Como assim “comprimento de onda da luz”?	27
Planck e a radiação do corpo negro.....	28
Espectroscopia.....	29
Para pensar	32
O corpo negro.....	32
Resultados experimentais dos estudos da radiação emitida pelo corpo negro	33
Em busca de um modelo para a radiação do corpo negro	33
Lei de deslocamento de Wien.....	33
Lei de Stefan-Boltzmann	34
Em busca da equação da curva.....	34
O desenvolvimento teórico de Planck.....	36
Einstein e o os fótons	39
Modelo atômico de Bohr	41
Dualidade.....	45
Princípio da Incerteza de Heisenberg.....	47
Schrodinger e modelo moderno para o átomo.....	47
Spin.....	51
Princípio de exclusão de Pauli	53
Configuração eletrônica dos átomos	54
Espectros atômicos e evolução do universo.....	59
A identidade do átomo	59
Tecnologias para “enxergar” o átomo.....	60
Considerações finais	61

Introdução

Imagine-se pequeno, muito pequeno, tão pequeno quanto desejar e comece a observar em seu entorno, no interior da matéria. Que objetos haveria neste mundo? Será que eles obedeceriam às mesmas leis da física que estamos acostumados?

É nessa viagem que estamos entrando agora. E não estamos sozinhos. Grandes pensadores e cientistas estarão conosco e nos ajudarão a entender o mundo insólito do interior da matéria. Prepare-se para muitas surpresas e desafios.

O que compõe o mundo que nos rodeia?

Olhe a sua volta. Plantas, pedras, gente, computadores: de que tudo é feito? Será que existe um princípio comum? Se existe, como se faz para ter tanta coisa diferente? E em outras partes do universo, a matéria se compõe do mesmo jeito?

Ao longo dos séculos, os homens tentaram responder a essa pergunta. Na maioria das vezes, a busca era por entidades simples (os elementos) que, misturadas ou combinadas, formariam estruturas mais complexas. Essa lógica é usada no ocidente pelo menos há 25 séculos e pode ser classificada cronologicamente nas abordagens antiga, medieval e moderna.

No ocidente, a abordagem antiga ocorreu na Grécia, através das ideias de pensadores pré-socráticos, posteriormente documentadas e aprimoradas por Aristóteles (469 AC–399 AC). Segundo ele, as entidades simples eram os quatro elementos Terra, Fogo, Água e Ar, entremeados pelas qualidades opostas úmido/seco e quente/frio.

Você poderá visualizar a figura que representa os quatro elementos da Grécia antiga e suas qualidades em http://en.wikipedia.org/wiki/Classical_elements.

A ideia dos quatro elementos persistiu como principal base do pensamento no ocidente até a Idade Média. A Igreja, a Medicina e os Alquimistas (dentre outros) utilizaram e adaptaram as teorias dos antigos gregos.

Os elementos da Grécia antiga têm um significado diferente do que entendemos hoje por elementos químicos. Os quatro elementos e suas qualidades são arquétipos utilizados para explicar a existência e

o comportamento da matéria, enquanto os elementos químicos modernos são entidades concretas, que podem ser separadas e identificadas através do método científico.

Modernamente, os elementos químicos são as entidades fundamentais que, combinados ou misturados, formam toda a matéria que se conhece. Eles foram isolados ao longo de séculos e organizados primeiramente por Mendeleev em uma tabela periódica.

Você poderá visualizar a figura da tabela periódica moderna em <http://www.elementsdatabase.com>.
A imagem encontra-se com o título Periodic Table of Elements.

Breve história dos elementos químicos

Os alquimistas¹ desempenharam um importante papel na história da Química, principalmente por aliarem aos princípios filosóficos a parte experimental. Praticada em diferentes culturas e desenvolvida ao longo de milênios, a alquimia buscava principalmente (mas não somente) a transformação de metais comuns em ouro ou prata (transmutação) e o elixir da vida.

Em 1661, em sua histórica publicação *The Sceptical Chymist*², o cientista irlandês Robert Boyle baseia-se em experimentos para provar que a matéria não pode ser formada pelos clássicos quatro elementos e apresenta a hipótese que a matéria é formada por átomos e seus agrupamentos em movimento. Todos os fenômenos químicos eram resultado das colisões dessas partículas. Além do caráter científico da obra, Boyle reivindica que a Química não deveria mais ser subserviente à Medicina e à Alquimia, e que deveria ser elevada ao status de ciência. E ainda afirma, categoricamente, que qualquer teoria deveria ser provada experimentalmente antes de ser considerada verdadeira. Isaac Newton apoiava as ideias de Boyle e construiu sua própria teoria da natureza corpuscular da matéria.

¹ Alquimia (*Al-kimiya*) é uma palavra de origem árabe, os primeiros alquimistas a buscarem a Pedra Filosofal que chamavam de "Kimiya", influência da palavra egípcia "khem", que significa *terra negra*, por sua vez sinônimo de *vida*, já que terra negra nos desertos do Egito (onde provavelmente surgiu a alquimia em 5000 a.C.) representava terra fértil. O prefixo *Al* é o artigo "a".

² Obra disponível na íntegra e em formato original em:

<http://oldsite.library.upenn.edu/etext/collections/science/boyle/chymist/index.html>

Você poderá visualizar a figura com a capa da publicação de Boyle (1661) em http://en.wikipedia.org/wiki/The_Sceptical_Chymist.

Em 1785, o químico francês Antoine-Laurent de Lavoisier, após numerosos e cuidadosos experimentos *quantitativos*, provou que o ar não era um elemento e sim formado por elementos: "oxigênio" e "azoto". Também demonstrou que a água poderia ser decomposta em "hidrogênio" e "oxigênio". Enfim, enuncia uma das mais importantes leis da Química, a Lei da Conservação da Massa.

Em seguida, em 1789, baseado em seus experimentos, Lavoisier desenvolve a primeira lista moderna de elementos químicos, composta de 33 elementos (substâncias simples) devidamente classificados, incluindo a luz e o calórico³.

Entre 1797 e 1804, o químico francês Joseph Proust realizou uma série de experimentos quantitativos e em 1806 estabeleceu a lei das proporções definidas.

Por volta de 1818, o cientista sueco Jöns Jakob Berzelius descobriu mais elementos, aumentando para 49 o número de elementos aceitos na época. Reforçou a Lei das Proporções Definidas e determinou experimentalmente as massas relativas de 45 elementos. Uma das suas maiores contribuições para a Química foi a nomenclatura moderna dos elementos baseada em letras, ao invés de símbolos gráficos.

Em 1869, o químico russo Dmitri Mendeleev apresentou para a Sociedade Química da Rússia a sua Tabela Periódica. Baseado em experimentos que mediam as propriedades químicas dos elementos conhecidos, ele os classificou em forma de tabela. A tabela de Mendeleev ainda previa a existência de novos elementos que foram descobertos posteriormente.

Atualmente existem 118 elementos na tabela periódica, sendo que o elemento 117 ainda não foi sintetizado.

Você poderá visualizar a figura com a tabela periódica de Medeleev em http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Mendeleev%27s_1869_periodic_table.png.

³ Obras de Lavoisier na íntegra e em formato original disponíveis em:

http://www.lavoisier.cnrs.fr/ice/ice_book_list.php?lang=fr&type=text&bdd=lavosier&table=Lavoisier&typeofbookl d=6&num=

Por volta de V a.C. filósofos gregos discutiam, no campo das ideias, a natureza da matéria. Durante séculos foi aceita a teoria dos quatro elementos. Movidos pela curiosidade científica e suportados pelo experimento, ao longo da história, alquimistas e químicos descobriram que os elementos que formavam a matéria eram diferentes dos quatro propostos por Aristóteles. A história levou à redefinição do significado de *elementos* e os associou aos *átomos*.

Modelos atômicos

O que são *modelos* em ciência? Antes de responder a essa pergunta, acompanhe-me no seguinte exercício: desenhe uma árvore. Provavelmente você vai desenhar algo parecido com um dos desenhos abaixo.



Figura 1:

Você pode pegar uma folha ou fruto da sua árvore? Não. O que você desenhou não foi a árvore (real), foi um *modelo*, baseado em suas observações. A mesma árvore pode possuir diversos modelos diferentes, cada um com suas características e limitações que atendem a um determinado propósito. Pode ser que você decida ser detalhista, observe a árvore durante dias, faça anotações e faça outro desenho (modelo), com mais detalhes, que corrija erros dos desenhos anteriores. Parabéns, seu modelo poderá explicar muito bem o que é uma árvore, mesmo para quem nunca tenha visto uma. Mas... continua sendo um modelo.

Ao longo dos séculos XIX e XX, grandes cientistas “desenharam” modelos do átomo. Nenhum deles viu o átomo. Os modelos explicavam alguns resultados experimentais e possibilitavam a realização de previsões. À medida que algum detalhe novo era descoberto, “desenhava-se” um novo modelo, com mais detalhes, mais complexo.

Será que precisamos jogar fora um “desenho” só porque fizemos um “desenho” novo? Como veremos, os modelos atômicos evoluíram ao longo do tempo. Foram ficando mais completos, porém mais complexos. Será que precisamos utilizar *sempre* o modelo mais moderno e complexo?

Modelo atômico de Dalton

John Dalton (1766 – 1844), químico e meteorologista inglês, começou a lecionar cedo (com 12 anos), quando também começou a estudar a teoria de Sir Isaac Newton, bastante divulgada na Inglaterra. Teve aulas informais com John Gough (1757 – 1825), filósofo cego, com quem aprendeu francês, latim, grego, matemática e astronomia.

Dalton construiu uma teoria para a então chamada “cegueira das cores”, mal que ele mesmo sofria, conhecida hoje como daltonismo. A propósito, a teoria estava completamente errada, entretanto o daltonismo ficou bastante conhecido.

Pelas mais de 200 mil observações meteorológicas documentadas, a paixão pelos fenômenos atmosféricos era evidente, refletida na Química através de seus estudos experimentais com gases.

No final do século XVIII, início do XIX, podia-se dizer que a Química era uma ciência predominantemente experimental. Havia Leis, uma lista de elementos que, por meio de reações químicas – acreditava-se – poderiam formar tudo. Mas o que seriam esses *elementos químicos*? Qual a sua estrutura? Seria possível um modelo para esses elementos que explicasse as leis e os resultados experimentais? Dalton saiu em busca da resposta. Ele se apoiou na teoria corpuscular de Newton para explicar o comportamento dos gases, o que o levou a formular a importantíssima Lei de Dalton das pressões parciais. Ajudou William Henry (1744 – 1836) a formular a Lei de Henry, que relacionava solubilidade dos gases em líquidos com suas respectivas pressões parciais⁴.

Dalton estava convencido de que o que formava a matéria eram os átomos e, ainda, de que a massa dos átomos determinava o comportamento macroscópico das substâncias. Elaborou então um modelo⁵ para a estrutura da matéria baseado nos seguintes postulados:

1. Os elementos são formados por pequeníssimas partículas, os *átomos*.
2. Todos os átomos de um determinado elemento são idênticos entre si.

⁴ Henry, além de professor, era dono de uma indústria química de água artificialmente gaseificada.

⁵ A teoria atômica de Dalton foi publicada pela primeira vez em 1803 e desenvolvida numa série de conferências em 1804 e 1805.

3. Os átomos de um determinado elemento são diferentes dos átomos de outro elemento e o que os diferencia são suas massas relativas.
4. Os átomos de um elemento podem se combinar com átomos de outros elementos formando os *átomos compostos*. Um dado composto possui sempre o mesmo número relativo de tipos de átomos.
5. Os átomos não podem ser criados, divididos ou destruídos através de processos químicos. Uma reação química simplesmente altera o modo de agrupamento dos átomos.

A teoria de Dalton não apenas explicava como eram os átomos, mas também como eles se combinavam. De acordo com a teoria, átomos do mesmo elemento se repeliam e os diferentes que possuíam afinidade se atraíam. Entretanto, em torno de cada átomo, haveria uma nuvem de calórico que deveria ser superada por uma energia externa (uma faísca elétrica, por exemplo) para que os átomos afins pudessem se combinar. Para explicar os dados experimentais que Dalton tinha acesso, ele propôs a “regra da máxima simplicidade”, em que a Natureza favorecia a formação de “átomos compostos” *binários* (um átomo de cada elemento). Com base nessa regra, Dalton postulou a “Lei das Proporções Múltiplas” que ditava a ordem natural de formação dos “átomos compostos”.

Você poderá visualizar a figura com vários átomos e moléculas (átomos compostos) descritos pelo modelo de Dalton em http://en.wikipedia.org/wiki/File:A_New_System_of_Chemical_Philosophy_fp.jpg.

De acordo com a Lei de Proust, as reações químicas ocorriam com proporções definidas de massa dos reagentes envolvidos. Dalton pesquisou na literatura experimentos que documentavam essas proporções. De acordo com seu modelo, os átomos dos elementos se combinavam preferencialmente na relação 1:1. Então, as proporções macroscópicas poderiam ser transportadas para o mundo microscópico e assim determinadas as massas relativas dos diversos átomos.

Dalton e outros testaram com sucesso a tabela de massas relativas fazendo previsões das proporções de massas em outros experimentos.

Você poderá visualizar a figura com elementos químicos conhecidos e como eram representados na época por Dalton em http://www.meta-synthesis.com/webbook/35_pt/pt.html.
A imagem encontra-se com o título A fuller list of Dalton's elements and symbols (1808).

A limitação do modelo de Dalton estava na imposição da regra da máxima simplicidade que, apesar de fazer muito sentido lógico, não estava totalmente correta. Segundo ela, por exemplo, a água deveria possuir a fórmula HO e a amônia NH, o que sabemos hoje que não é verdadeiro.

Outra limitação estaria em não contemplar a natureza elétrica da matéria.

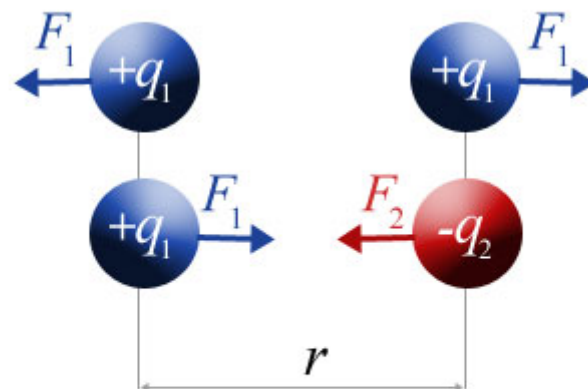
Entretanto, Dalton iniciou um caminho sem volta na Química: a certeza de que a matéria é formada por átomos.

Alguns fatos da história da eletricidade

Desde a antiguidade o homem conhece a eletricidade⁶. As experiências de Thales de Mileto (624 A.C. – 556 A.C.), em que atritava um bastão de âmbar com pele de gato e em seguida o bastão passava a atrair objetos leves é reproduzida até hoje. Iria se passar um longo tempo até que os cientistas tentassem explicar a natureza da eletricidade. O cientista inglês William Gilbert (1554 – 1603) estudou sistematicamente a eletricidade estática e propôs que a eletricidade seria um “fluido”, que ao ser removido dos materiais deixava uma “emanação”.

Em 1785, o físico francês Charles Augustin de Coulomb (1736 – 1806) quantificou o “fluido elétrico” criando o conceito de *carga elétrica*. Coulomb se inspirou na Lei da Gravitação Universal de Newton para determinar experimentalmente uma relação matematicamente idêntica para a eletricidade, a Lei de Coulomb. Em homenagem a ele, a unidade internacional da carga elétrica recebeu o nome de Coulomb.

⁶ Eletricidade deriva da palavra grega ἤλεκτρον (elektron) que significa âmbar



$$F_1 = F_2 = k_c \frac{q_1 \times q_2}{r^2}$$

Figura 2: Lei de Coulomb

Em 1800, Conde Alessandro Volta (1745 – 1827) inventou a pilha que passou a ser usada também por outros cientistas em seus experimentos.

O cientista inglês Michael Faraday (1791 – 1867) fez diversos experimentos e descobertas no campo da eletricidade e magnetismo. Uma das maiores descobertas foi a *Indução Eletromagnética*, que tem como direta aplicação o gerador elétrico moderno.

Além disso, Faraday descobriu as leis da eletrólise e popularizou os termos *catodo*, *anodo* e *íon* criados por William Whewell (1794-1866).

Além de Faraday, Gauss (1777-1855) e Ampère (1775-1836) investigaram o eletromagnetismo. Mas foi a genialidade do cientista escocês James Clerk Maxwell (1831–1879) que reuniu todo o conhecimento do eletromagnetismo em seu *Treatise on Electricity and Magnetism*⁷ publicado em 1873, resumindo-o em 4 equações que ficariam para a história: as chamadas equações de Maxwell.

A resolução das equações de Maxwell leva naturalmente à equação da onda eletromagnética e à determinação da velocidade da luz a partir das constantes da eletricidade e do magnetismo.

Na época, a eletricidade ainda era considerada um “fluido”. Fosse fluido ou não, os cientistas estavam convencidos de que a eletricidade tinha que fazer parte da matéria. Será que o modelo atômico de Dalton poderia ser adaptado para que fossem explicados os efeitos elétricos?

⁷ Disponível em: <http://rack1.ul.cs.cmu.edu/is/maxwell1/> e <http://rack1.ul.cs.cmu.edu/is/maxwell2/>

O átomo é indivisível mesmo?

Raios catódicos

Em seu famoso experimento empinando uma pipa em dia de tempestade⁸, Benjamin Franklin (1706 – 1790) constatou que os relâmpagos eram de origem elétrica. A eletricidade fluía no ar! Isso provavelmente deixou os cientistas ávidos por controlar o efeito em laboratório. Como se fariam tais experimentos? Que tal colocar o relâmpago dentro de um tubo de vidro?

Foi o que fez o vidreiro alemão Heinrich Geissler em 1857. O *tubo de Geissler* é preenchido com um gás rarefeito (neônio, argônio ou ar) e mercúrio. Quando submetido a altas voltagens, aí está: relâmpago portátil. Esse é o fundamento usado nas lindas lâmpadas de neon dos modernos letreiros luminosos e também das lâmpadas fluorescentes.

Apesar de lindíssimos, os tubos de Geissler não nos davam muitas pistas da *natureza* da eletricidade. Havia muitos fatores envolvidos. A fim de analisar o efeito de maneira científica, William Crookes (1832 – 1919), químico e físico inglês, começou a fazer testes experimentais em tubos de vidro (que posteriormente foram batizados de Ampolas de Crookes) submetidos a baixíssimas pressões (10^{-6} a 10^{-8} atm). A voltagem era de 100.000 volts, obtidos graças à indução eletromagnética descoberta por Faraday. Em analogia aos trabalhos de *eletrólise* de Faraday, ao eletrodo negativo deu-se o nome de *catodo* e ao positivo *anodo*.

Os resultados foram impressionantes. À medida que se diminuía a pressão, a luminosidade ao longo do tubo ia sumindo. No entanto surgia no vidro uma fluorescência esverdeada! Que tipo de misterioso fluido elétrico poderia estar causando este efeito?

Você poderá visualizar a figura com tubo de crookes em <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Crookes-maltese-tube.jpg>.

As “sombras” formadas por obstáculos mostravam que, o que quer que estivesse se deslocando, o fazia em linha reta e ia do catodo para o anodo. Por esse motivo, os raios foram chamados de *raios catódicos*, isto é, originados no catodo.

⁸ Não repita este experimento em casa! Para se ter uma ideia são necessários pelo menos 30.000 volts para se produzir uma fâsca de 1 cm no ar seco.

Mas o que seriam os raios catódicos

Em 1897, o cientista britânico Sir Joseph John Thomson (1856-1940) respondeu a esta pergunta através de um artigo⁹, publicando os resultados de uma série de experimentos com tubos de raios catódicos. Fez meticulosas medições, interferindo na trajetória dos raios através de campos elétrico e magnético controlados.

Após descrever os experimentos em seu artigo, Thomson chega à sua primeira conclusão:

“Como os raios catódicos carregam uma carga negativa são defletidos por forças eletrostáticas, como se estivessem eletrizados negativamente, e são afetados por um campo magnético exatamente da mesma maneira; como corpos eletrizados em movimento ao longo do trajeto desses raios, eu não vejo alternativa, senão concluir que eles são cargas de eletricidade negativa carregadas por partículas de matéria”.

Thomson então questiona: o que são essas partículas? Átomos ou partículas ainda menores, talvez uma subdivisão do átomo?

Através de outros experimentos, Thomson determinou a relação massa/carga (m/e) bem como a velocidade v das partículas. O valor de m/e era independente do gás utilizado, bem como do material do catodo e ainda era muito inferior ao de íons¹⁰ de hidrogênio em movimento, o que sugeria partículas com carga maior e/ou massa menor do que o íon de hidrogênio. Através desses resultados, Thomson teve certeza de que essas partículas eram subdivisões do átomo.

Finalmente, Thomson chega a um modelo que tenta explicar o que seriam os raios catódicos: em um campo elétrico intenso, as moléculas do gás se decompõem, não em átomos da substância, mas em *átomos primordiais*, chamados de *corpúsculos* por Thomson. Esses corpúsculos com carga negativa sofrem a ação do campo elétrico intenso e se deslocam do anodo para o catodo. Posteriormente, os *corpúsculos* receberam o nome de *elétrons*¹¹.

Em 1909, Robert Millikan (1868 – 1953) mediu a carga do elétron (e) em seu famoso experimento da gota de óleo em queda. Como já se sabia a relação e/m , pôde-se determinar também a massa do elétron. Um dos resultados mais impressionantes desse experimento é a *quantização* da carga elétrica:

⁹ Philosophical Magazine, 44, 293 (1897). Disponível em <http://web.lemoyne.edu/~GIUNTA/thomson1897.html>.

¹⁰ Chamam-se *íons* os átomos que tenham sofrido algum processo de perda ou ganho de elétrons, deixando assim de ficar eletricamente neutro.

¹¹ A sugestão do nome *elétrons* foi feita pelo cientista irlandês George Johnstone Stoney (1826 –1911), que considerou os *corpúsculos* de Thomson os átomos da eletricidade.

1. Nada pode possuir carga menor do que a do elétron (chamada carga fundamental e);
2. Toda a carga elétrica é um múltiplo inteiro da carga fundamental, ou seja, $Q = N \cdot e$ (N é um inteiro).

Você poderá visualizar a figura com o modelo simplificado do experimento de Millikan em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Simplified_scheme_of_Millikan%E2%80%99s_oil-drop_experiment.png.

A tabela mostra os valores atuais da massa e carga do elétron e do íon de hidrogênio.

Partícula	Massa (kg)	Carga (C)	massa/carga (kg/C)
Íon de Hidrogênio	$1,7 \times 10^{-27}$	$+1,6 \times 10^{-19}$	$1,1 \times 10^{-8}$
Elétron	$9,1 \times 10^{-31}$	$-1,6 \times 10^{-19}$	$5,7 \times 10^{-12}$

Modelo atômico de Thomson

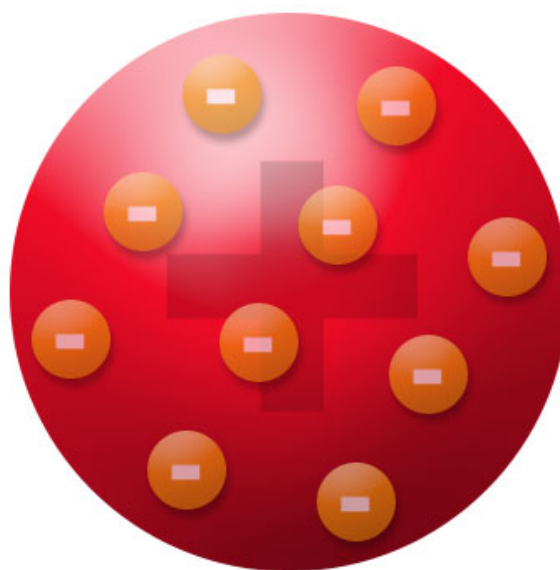


Figura 3: Figura representativa do modelo atômico de Thomson: elétrons (negativos) imersos em um fluido de carga positiva

Após a descoberta do elétron, estava claro que o átomo possuía uma estrutura. Em 1904, Thomson sugere o modelo do *pudim de ameixas* para o átomo, que consistia na maneira mais simples de explicar os raios catódicos e os processos de eletrização e ionização da matéria. De acordo com o modelo, o átomo seria constituído de elétrons que girariam em círculos imersos em uma bolha esférica de uma substância carregada positivamente. A estabilidade do átomo era garantida pelas leis da mecânica e do eletromagnetismo. A limitação do modelo de Thomson foi evidenciada por Rutherford, como veremos a seguir.

Modelo atômico de Rutherford

Radioatividade

A radioatividade, que foi descoberta em 1896 pelo cientista francês Antoine Henri Becquerel (1852 – 1908), consiste na emissão de partículas ou/radiação eletromagnética por certos materiais chamados *radioativos*. Além dele, o casal Pierre Curie (1859 – 1906) e Marie Curie (1867 – 1934), além de Rutherford, foram grandes estudiosos da radioatividade.

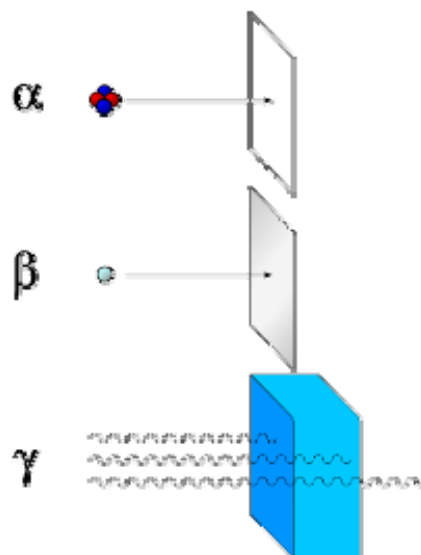


Figura 4: As partículas alfa, beta e gama e seus poderes de penetração.

A imagem digital está disponível para uso público segundo as licenças Creative Commons 3.0 e GNU Free Documentation License 1.2, em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Alfa_beta_gamma_radiation.svg. Os dados do autor da imagem encontra-se em <http://commons.wikimedia.org/wiki/User:Stanneded>

Rutherford nomeou e classificou os tipos de radioatividade conhecidas na época, de acordo com o seu poder de penetração. As radioatividades dos tipos alfa e beta são compostas por partículas e a gama é radiação eletromagnética. A radiação alfa possui carga positiva e é a mais massiva e a menos penetrante. A radiação beta possui uma pequena massa e carga negativa. A radiação gama é eletromagnética e a mais penetrante.

O experimento de Geiger-Marsden

Maio de 1909, Universidade de Manchester. Um aluno encontra o professor na escada.

- Sir!

- Yes?...

Uma das maiores descobertas experimentais da história da teoria atômica era anunciada. O *professor* era o cientista neozelandês Ernest Rutherford (1871 – 1937) e o *aluno* era o jovem Ernest Marsden (1889 - 1970) e a experiência...

Rutherford era um dos 12 filhos de uma família modesta de fazendeiros na Nova Zelândia. Passou a maior parte de sua vida profissional nas universidades de Montreal, Canadá (1895 – 1898), Manchester (1898 – 1907) e Cambridge (1919 – 1937), Inglaterra. Rutherford descobriu e nomeou as radiações alfa e beta, descobriu o núcleo do átomo e o próton e ainda sugeriu a existência do nêutron, realizou a primeira transmutação da história e ganhou o prêmio Nobel da Química, em 1908 (com apenas 37 anos), ao explicar a radioatividade.

Em 1908, Rutherford lecionava na Universidade de Manchester, onde tinha uma série de alunos brilhantes, dentre eles, Johannes (Hans) Wilhelm Geiger (1882 – 1945) e Ernest Marsden. Pediu aos dois que fizessem o que ficou conhecido como experimento de Geiger-Marsden, que consistia em bombardear uma folha finíssima de ouro com radiação alfa e medir o espalhamento dessas partículas.

Rutherford lembrou o momento em que ouvira os resultados, na escada da universidade: “Foi o momento mais extraordinário da minha vida. Era como se bombardeassem uma folha de papel com obuses de quarenta milímetros e alguns deles ricochetassem de volta”.

Foi o que aconteceu. A grande maioria das partículas alfa atravessava a folha de ouro quase sem desvio, como previa o modelo atômico de Thomson. O grande e surpreendente resultado foi que algumas poucas partículas (aproximadamente 1 em 20.000) eram ricocheteadas pelos átomos da folha de ouro a grandes ângulos. O experimento foi repetido usando folhas de outros materiais. Quanto maior o peso atômico do material, mais partículas eram espalhadas a grandes ângulos.

Você poderá visualizar a figura com o experimento em http://en.wikipedia.org/wiki/Geiger%E2%80%93Marsden_experiment.

De acordo com o modelo de Thomson, todas as partículas alfa deveriam atravessar a matéria. Rutherford descobriu que algumas delas eram defletidas.

Mas, se o modelo de Thomson não explicava o experimento de Geiger-Marsden, que modelo explicaria? Se o átomo não era um pudim de passas, qual o objeto de nosso conhecimento macroscópico que mais se aproximaria da realidade invisível do submicroscópico?

Em 1904, o cientista japonês Nagaoka Hantaro (1865 – 1950) desenvolveu um modelo para o átomo baseado no planeta Saturno (o *modelo saturniano*)¹². A estabilidade dos anéis de Saturno se deve ao planeta possuir uma grande massa. Analogamente, Nagaoka propôs um modelo para o átomo em que haveria um núcleo positivo massivo e, girando em torno dele, os elétrons. O modelo de Nagaoka explicava alguns experimentos, mas falhava em outros, e foi abandonado pelo cientista japonês, em 1908.

Você poderá visualizar a figura com o modelo saturniano do átomo em <http://skullsinthestars.files.wordpress.com/2008/05/saturnian.jpg>.

Parece que Rutherford decidiu utilizar o sistema planetário inteiro, em vez de apenas Saturno, para desenvolver seu modelo. Em 1911, publicou um artigo¹³ em que descrevia seu modelo atômico. O átomo consistiria em um núcleo muito pequeno, positivamente carregado, rodeado por uma nuvem de elétrons (em forma de esfera e não de disco, como no modelo saturniano). A massa do átomo estaria quase que totalmente concentrada no núcleo. Seu modelo baseou-se no experimento de Geiger-Marsden e cálculos de espalhamento baseados em interações coulombianas. Com isso, Rutherford foi capaz de determinar uma fórmula para o espalhamento e estimar o raio do núcleo atômico.

¹² Artigo disponível em: <http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/webdocs/Chem-History/Nagaoka-1904.html>

¹³ Artigo disponível em: <http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/webdocs/Chem-History/Rutherford-1911/Rutherford-1911.html>

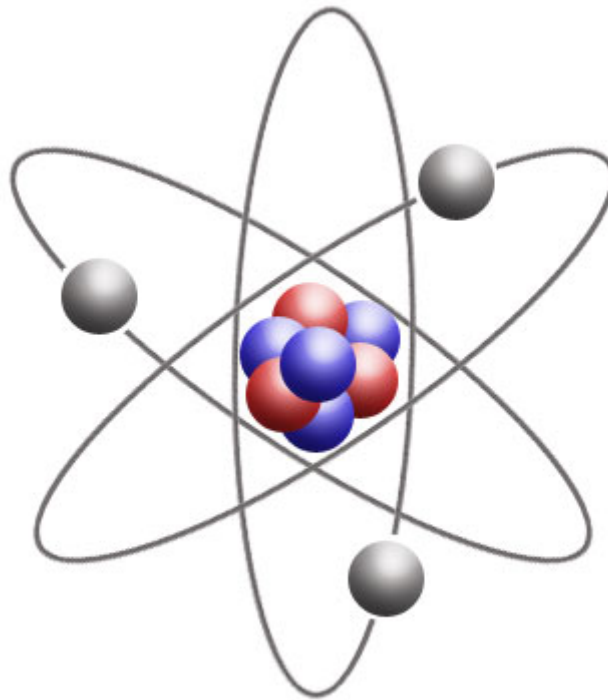


Figura 5: Imagem estilizada do modelo de Rutherford para o átomo de Lítio.

Interessante que apesar de outros modelos atômicos mais modernos terem sido desenvolvidos e explicarem melhor a natureza da matéria, a imagem do átomo que vem à cabeça das pessoas é a da figura acima. E, provavelmente, o desenho nem é de Rutherford, pois, em momento nenhum de sua teoria ele fala em trajetória dos elétrons, e sim numa *nuvem*.

Em termos quantitativos, o modelo de Rutherford estimou que o raio do núcleo do átomo de ouro devesse ser da ordem de 10^{-14} m, ou seja, 4 ordens de grandeza menores que o átomo (o raio do átomo é da ordem de 10^{-10} m). Mais um motivo para Rutherford não ter desenhado nosso simpático símbolo do átomo. Para se ter uma ideia, digamos que o núcleo do átomo fosse do tamanho de uma bola pingue-pongue e fosse colocado no centro de um estádio de futebol. O átomo então seria do tamanho do estádio inteiro!

Você poderá visualizar a figura com a ilustração do átomo moderno e a comparação qualitativa entre os tamanhos do núcleo e da eletrosfera em <http://en.wikipedia.org/wiki/Atom>.

Curiosamente, a teoria eletromagnética que fundamentou todos os cálculos de Rutherford seria aquela que tornaria seu modelo teoricamente inviável. De acordo com a teoria do eletromagnetismo, cargas aceleradas emitem energia. Elétrons orbitando em torno do núcleo (o movimento circular é acelerado) deveriam perder energia mecânica e, de acordo com a física clássica, sua trajetória seria uma espiral em direção ao núcleo. Se os átomos fossem como Rutherford sugeria, toda a matéria se desintegraria em fração de segundo! E agora? Como encontrar um modelo que explique tão bem os experimentos e ao mesmo tempo garanta a estabilidade do átomo? Mais um desafio para os cientistas.

Partículas subatômicas

O átomo, que era apenas esfera sem estrutura no modelo de Dalton, já estava dividido pelo menos em duas partes: o núcleo e os elétrons. Mas, e o núcleo, será que é maciço ou formado possui alguma estrutura? Quantos elétrons há em um átomo? Existe alguma relação entre a massa e a carga do núcleo? Rutherford e outros cientistas buscaram essas respostas.

Descoberta do próton

O início do século XX foi marcado por diversas e incríveis descobertas. Por isso, não se sabe ao certo quem descobriu o próton. A descoberta é geralmente atribuída a Rutherford, que foi também quem deu esse nome ao então conhecido núcleo do átomo de hidrogênio.

Em 1919, Rutherford e seus colaboradores realizaram o sonho dos alquimistas e conseguiram experimentalmente, pela primeira vez na história, transmutar um elemento em outro¹⁴. O experimento consistia em bombardear o gás nitrogênio com partículas alfa altamente energizadas. Como resultado, alguns núcleos de hidrogênio eram detectados, e Rutherford estava certo que eles somente poderiam ser provenientes dos núcleos dos átomos de nitrogênio. Nesse processo, o que ocorreu é que o nitrogênio era transmutado em oxigênio¹⁵, através de uma reação nuclear.

¹⁴ Artigo disponível em <http://web.lemoyne.edu/~giunta/RUTHERFORD.HTML>

¹⁵ Na verdade, na maioria dos processos radioativos, a transmutação acontece espontaneamente, e Rutherford sabia disso. Entretanto, nesse caso, a transmutação havia sido, pela primeira vez, produzida artificialmente.

Então, o núcleo do nitrogênio continha núcleos de hidrogênio! Como o hidrogênio era o elemento de menor massa, Rutherford concluiu que se tratava de uma partícula elementar dos núcleos de todos os átomos: o núcleo atômico possui uma estrutura, é formado por prótons!

Entretanto, duas questões importantíssimas estavam em aberto:

1. O número de prótons em um núcleo é insuficiente para justificar sua massa. De onde viria o restante da massa?
2. Cargas de sinais opostos se atraem. Cargas de mesmo sinal se repelem. Como é possível os prótons ficarem juntos em um espaço tão pequeno como o núcleo? De acordo com a Lei de Coulomb, a força de repulsão seria descomunal.

Descoberta do nêutron

Quando Rutherford descobriu que o número de prótons em um núcleo suficientes para justificar sua carga não era suficiente para justificar sua massa, imediatamente sugeriu a existência de outras partículas, eletricamente neutras, no núcleo. Rutherford atribuiu a seu aluno James Chadwick (1891 – 1974) a tarefa de descobrir essa partícula.

Em 1932 (13 anos depois da descoberta do próton), Chadwick finalmente conseguiu detectar o nêutron¹⁶ através do seguinte experimento:

Você poderá visualizar a figura com a ilustração do experimento de Chadwick que o levou à descoberta do nêutron em <http://www.uwec.edu/boulteje/Boulter103Notes/16September.htm>.
A imagem encontra-se no tópico 4. The Neutron.

Em 1930, descobriu-se que bombardeando Berílio com radiação alfa, era emitida outra radiação extremamente penetrante e sem carga elétrica, semelhante à radiação gama. Posteriormente, foi descoberto que incidindo esse novo tipo de radiação em uma substância rica em hidrogênio (como a parafina), prótons eram emitidos.

Em 1932, Chadwick, com seus estudos quantitativos desse e de outros experimentos, concluiu que a radiação emitida pelo Berílio era na verdade um feixe de partículas neutras com massa quase igual à do próton: Chadwick descobriu o nêutron!

¹⁶ Artigo disponível em <http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/webdocs/Chem-History/Chadwick-neutron-letter.html>

Para pensar:

1. Por que o nêutron é tão penetrante?
2. Pode-se dizer que a carga e a massa do núcleo atômico são quantizadas?
3. Por que foi mais fácil identificar o elétron e o próton do que o nêutron?

Números atuais relacionados às partículas subatômicas

	Partícula	Massa (kg)	Carga (C)
Núcleos	Próton	$1.672621636 \times 10^{-27}$	$1.602176487 \times 10^{-19}$
	Nêutron	$1.67492729 \times 10^{-27}$	0
	Elétron	$9.10938215 \times 10^{-31}$	$1.602176487 \times 10^{-19}$

Observação com relação à notação

O modelo de Rutherford, aliado à descoberta do próton, nêutron e elétron, permitiu o entendimento e a classificação das substâncias através de dois números:

- Número atômico Z : é o número de prótons de um átomo
- Número de massa A : é o número de prótons + o número de nêutrons de um átomo

Além da carga q do elemento, no caso de ser um íon.

Hoje, representa-se um átomo ou íon através da seguinte notação:



Os elementos e os processos nucleares tornaram-se simples de serem representados. Observe os exemplos:

Descrição	Notação	Observação
Partícula alfa	${}^4_2\text{He}^{+2}$	2 prótons + 2 nêutrons = núcleo de hélio
Elétron	e^-	
Próton	${}^1_1\text{H}^{+1}$	Íon de hidrogênio
Decaimento do urânio	${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\text{Th} + {}^4_2\text{He}^{+2}$	O urânio 238 transmuta em tório 234 emitindo uma partícula alfa.

A e o raio do núcleo

Já imaginou o quanto deve ser difícil medir o tamanho de um núcleo atômico? Já vimos que o modelo de Rutherford prevê que o raio do núcleo é da ordem de 10^{-14}m . Uma boa aproximação para calcular esse raio é considerar o núcleo uma esfera com densidade constante. Como a densidade é massa/volume, o raio do núcleo pode ser calculado usando a massa atômica A e a fórmula do volume da esfera. Após algumas simplificações, obtém-se o seguinte resultado:

$$R = r_0 \cdot \sqrt[3]{A}, \text{ onde o valor experimental de } r_0 = 1,25 \times 10^{-15} \text{ m}.$$

Z e a identidade dos elementos químicos

A massa atômica A já era conhecida antes da descoberta das partículas subatômicas e Mendeleev se baseou nela para ordenar os elementos em sua tabela periódica. Entretanto, ele teve que postular algumas exceções em deferência às propriedades químicas observadas experimentalmente. Após a descoberta do próton e do elétron, concluiu-se que usar o número atômico Z como referência na ordem dos elementos da tabela periódica era bem mais eficaz. Por esse motivo, se os elementos químicos possuísem um número de identidade, este número seria Z .

A definição moderna de "Elemento Químico" é dada pela IUPAC. Um elemento químico é uma entidade que representa um conjunto de átomos que possuem o mesmo número de prótons. Cada elemento químico ocupa uma posição na tabela periódica. Como a periodicidade dos elementos também é

verificada em propriedades macroscópicas, as substâncias químicas puras formadas por átomos com o mesmo número de prótons também são incluídas ao conjunto "Elemento Químico". Assim, por exemplo, o elemento Hidrogênio é o conjunto de átomos com 1 próton, mais todas as substâncias puras formadas apenas com esses átomos como, por exemplo, o gás hidrogênio.

A explicação teórica do número de prótons definir as propriedades físicas e químicas dos elementos só pode ser dada após a descoberta da Mecânica Quântica e será abordada posteriormente neste texto.

Isótopos

Um mesmo elemento poder possuir diferentes números de nêutrons, ou seja, mesmo número de prótons (isto é, mesmo número atômico) e diferentes números de nêutrons (ou seja, diferentes números de massa). Átomos do mesmo elemento, mas com números de massa diferentes, são chamados de isótopos¹⁷. Existem, na natureza, aproximadamente 340 núcleos¹⁸ diferentes, dos quais 250 são estáveis. Se incluirmos os núcleos gerados artificialmente, mais de 3.100 núcleos são atualmente conhecidos. Mas, apenas 105 elementos (pense nisso!)

Como é o número de prótons de um átomo (ou seja, A) que define a identidade química de um elemento, os isótopos de um mesmo elemento ocupam o mesmo lugar na tabela periódica.

Mecânica Quântica

No final do século XIX, a Física e a Química se apoiavam nas leis clássicas da Mecânica, Eletromagnetismo e Termodinâmica. As leis universais descobertas e a beleza matemática das equações que as representavam garantiam que a Natureza era perfeita e previsível. Restava aos cientistas, baseados nessas leis, construir os modelos adequados por meio de experimentos bem planejados, e chegar aos resultados corretos. Os grandes progressos da ciência já teriam sido feitos (a Mecânica de Newton, o Eletromagnetismo de Maxwell, a Termodinâmica de Clausius) e restava apenas aplicar corretamente esses princípios ou realizar medições mais corretas que levariam a se conhecer uma ou duas casas decimais da velocidade da luz, da constante da gravitação universal ou de outras constantes. Que coisa chata!

¹⁷ Isótopos vem do grego isos = "igual", tópos = "local".

¹⁸ Núcleos diferentes aqui significam núcleos com A e Z diferentes. A palavra aqui correta seria *nuclídeos*.

Mas havia alguns probleminhas¹⁹ que se recusavam a ser resolvidos pelas leis clássicas. E foi preciso ousar, ir além dos limites e transformar a virada do século num dos momentos mais ricos da ciência moderna, que de chatos não teve nada.

Ondas estacionárias em uma corda

Convidamos o leitor a fazer um experimento. Faça mesmo! Será muito mais fácil entender os parágrafos seguintes e ainda vai ser divertido.

Amarre uma corda na parede e comece a balançá-la. O número de balançadas por segundo é a frequência de oscilação. Varie-a até formar uma das figuras abaixo:

Você poderá visualizar a figura com ondas estacionárias em uma corda em http://cord.org/cm/leot/course01_mod07/mod01-07frame.htm.
A imagem encontra-se no tópico See Idea Bank.

As figuras são *ondas estacionárias* e representam, respectivamente, a formação de $\frac{1}{2}$ onda, 1 onda e 1 onda e meia. Se da mão até a parede a distância for de 1 metro, os *comprimentos de onda* serão, respectivamente, 2 metros, 1 metro e $\frac{2}{3}$ metro. Em qual das figuras a frequência é maior?

O mais importante nesse experimento é tentar notar que a frequência com que se vibra a mão é quantizada. A frequência com que se vibra a mão (por exemplo, quantas vezes sua mão vai para baixo e para cima por minuto) para formar a primeira figura é a metade da frequência necessária para formar a segunda, e um terço da necessária para formar a terceira. Ou seja, todas as frequências são múltiplas inteiras da primeira, desde que, em todos os experimentos, o comprimento da corda entre a mão e a parede tenha sido o mesmo. Se você tentar oscilar a corda em uma frequência intermediária entre aquelas necessárias para formar as figuras, as ondas estacionárias não serão formadas. É necessário saltar de uma frequência à outra para obter a sequência de ondas estacionárias.

O mesmo não acontece com a *amplitude A*, que é, na figura, o tamanho vertical da onda. É só balançar a mão mais alto ou mais baixo, que se pode obter qualquer amplitude.

A tabela abaixo resume as grandezas apresentadas no experimento e seus respectivos símbolos.

¹⁹ Problemas não resolvidos pela física clássica: espectro do corpo negro, linhas espectrais, estabilidade do átomo de Rutherford, capacidade térmica dos sólidos a baixas temperaturas, entre outros.

Grandeza	Símbolo	Unidade S.I.
Frequência	ν (letra grega <i>nu</i>)	Hertz (Hz)
Comprimento de onda	λ (letra grega <i>lambda</i>)	metro (m)
Amplitude	A	metro (m)

Você deve ter notado que o comprimento de onda varia inversamente com a frequência. Na verdade, elas são inversamente proporcionais e a *velocidade de propagação* (V) da onda na corda as relaciona da seguinte maneira:

$$V = \lambda \cdot \nu$$

A velocidade de propagação é a velocidade com que a onda se propaga pela corda. Por exemplo, estique bem uma corda entre dois pontos. Puxe um ponto da corda perto de um dos dois pontos pelos quais a corda está presa. Largue. Você verá que a deformação que você causou viaja pela corda, a certa velocidade. Essa é a velocidade de propagação.

Natureza ondulatória da luz

As ondas não se propagam apenas em cordas. Basta jogar uma pedra num lago para gerar belas ondas circulares na superfície da água. Os surfistas conhecem de perto a crista de uma onda (e muitas vezes também o vale...). Você sabia que o som se propaga através de ondas? Frequências altas, som agudo, frequências baixas, som grave. Qual o meio de propagação das ondas sonoras? As ondas na corda, na água e no ar são ondas *mecânicas*. Podemos medi-las usando aparelhos como a régua e medidores de pressão. Difícil mesmo é acreditar que a **luz** é uma onda. De onde veio essa ideia?

A primeira teoria moderna da luz foi de Isaac Newton, que acreditava ser ela formada por corpúsculos. Pela grande autoridade do propositos, essa foi a teoria aceita por muitos anos. Entretanto, já na segunda metade do século XVII, a teoria corpuscular de Newton competia com a teoria ondulatória da luz de Robert Hooke (1635 – 1703) e Christiaan Huygens (1629 – 1695), pois também havia muitos indícios de que a luz se propagava como ondas. Por volta de 1800, Thomas Young (1773 – 1829) provou, experimentalmente, que a luz sofre difração, interferência e polarização, fenômenos típicos das ondas e impossíveis de serem explicados pela teoria corpuscular de Newton. Mas, em que meio se propagariam essas ondas? Como a luz do Sol chegaria à Terra, se no caminho não existe meio algum?

Alguns postulavam a existência de um meio imaterial, a que chamaram éter. Em 1873, Maxwell publica sua teoria do eletromagnetismo e a luz, a partir de então, é considerada uma onda eletromagnética. De acordo com essa teoria, a onda luminosa é uma manifestação dos fenômenos elétrico e magnético, os quais ocorrem em diversos meios e inclusive...no vácuo! Mais tarde, os experimentos de Michelson e Morley evidenciaram a inexistência do éter.

Como decorrência das equações de Maxwell, as ondas eletromagnéticas poderiam ser geradas por cargas aceleradas, em particular, cargas em movimento oscilatório. É assim que funcionam as antenas transmissoras de rádio e TV. Para você ter uma ideia simples: se você colocar uma esfera carregada na ponta de uma vara, e fizer oscilar essa esfera de um lado para outro, serão emitidas ondas eletromagnéticas, cuja frequência será a de vibração do corpo carregado. Reciprocamente, as ondas eletromagnéticas podem fazer com que as cargas em um metal adquiram movimento vibratório, gerando correntes elétricas; daí, o funcionamento das antenas receptoras.

Difração da luz

Vamos analisar agora a *difração* da luz. Como sabemos, a luz se propaga em linha reta, certo? Será? Considere o seguinte experimento: faça incidir a luz solar em uma fenda. Como os raios de luz solares são praticamente paralelos, a luz projetada na parede é do tamanho da fenda. À medida que diminuimos o tamanho da fenda, a projeção vai diminuindo de tamanho. Mas, se a fenda fica muito pequena (por volta da espessura de um fio de cabelo), o tamanho da projeção para de diminuir e... começa a aumentar!

A difração é um fenômeno que ocorre com todas as ondas e começa a ser notado quando a fenda é da ordem de grandeza do *comprimento da onda*. Por que a difração da luz é observada apenas para fendas bem pequenas?

Limitações nas observações causadas pela difração

Você já ouviu falar na tecnologia *blu-ray*? Os filmes gravados em DVD blu-ray são de altíssima definição, pois um DVD blu-ray pode armazenar muito mais dados do que um DVD comum. Mas, por quê?

Os DVDs armazenam as informações através de um sistema binário cujos estados são normalmente representados pelos algarismos "0" e "1". Fisicamente, esses números podem ser gravados no DVD com ajuda de minúsculos sulcos na sua superfície. A leitura é feita através da reflexão de um feixe laser. Se a reflexão for detectada pelo sensor, o algarismo binário será "0", caso contrário será interpretado como algarismo "1".

Você poderá visualizar uma figura onde no leitor de DVD um feixe de laser incide na superfície do DVD e, se houver reflexão, é detectada pelo sensor em <http://encyclopedia2.thefreedictionary.com/CD-ROM>.
A imagem encontra-se no tópico Reading a CD-ROM.

Para atingir somente um ponto de cada vez, o feixe laser tem que ser extremamente estreito. Ocorre que o estreitamento de um feixe de luz pode ser feito até um limite após o qual a *difração* faz com que o feixe se alargue novamente. Quanto menor o *comprimento de onda* da luz, mais estreito ele pode ser. Enquanto o DVD utiliza laser com $\lambda = 650\text{nm}$ (*vermelho*), o blu-ray utiliza $\lambda = 405\text{nm}$ (*azul-violeta*), portanto o feixe blu-ray é mais fino. Assim, pode haver um maior número de sulcos no blu-ray e, por consequência, uma maior quantidade de dados pode ser armazenada.

Você poderá visualizar uma figura de Blu-ray vs. HD DVD em http://geekspk.org/articles/sony_bwu-100a_blu-ray_drive/.
OBS: Quanto menor o comprimento de onda do laser mais fino pode ser seu feixe.

De um modo geral, para poder ser observado, um objeto não poderá ser menor do que o comprimento de onda da luz que o ilumina.

Interferência

A *interferência* da luz é um fenômeno mais interessante ainda. Para observá-lo experimentalmente, Young usou um objeto com *duas* fendas. Para o efeito ser observado, a distância entre as duas fendas deve ser muito pequena (da ordem do comprimento de onda da luz). A interferência da luz produz na parede uma figura com pontos claros espaçados entre si. A distância entre os pontos claros depende do comprimento de onda da luz, ou seja, da cor.

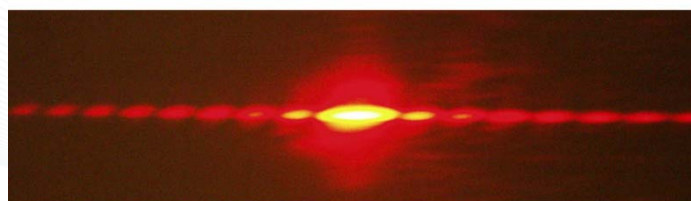


Figura 6: Padrão produzido pela interferência da luz

A imagem digital está disponível para uso público segundo a licença GNU Free Documentation License 1.2, em [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Single %26 double slit experiment.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Single_%26_double_slit_experiment.jpg).

Os dados do autor da imagem encontra-se em [http://commons.wikimedia.org/wiki/User:Patrick Edwin Moran](http://commons.wikimedia.org/wiki/User:Patrick_Edwin_Moran).

Você pode verificar facilmente o fenômeno da interferência, observando a luz de uma lâmpada através de uma pequena fenda entre seus dedos.

Como assim “comprimento de onda da luz”?

As grandezas estudadas através do experimento da corda (A , λ , v e V) são observadas de maneira diferente nas ondas eletromagnéticas. Em consequência, nós as percebemos diferentemente. Por exemplo, o comprimento de uma onda mecânica pode ser medido com a régua, já o comprimento de onda da luz visível é percebido como cor.

A tabela abaixo lista comprimentos de onda no vácuo referentes ao espectro da luz visível.

Cor	Comprimento de onda
Violeta (V)	380–450 nm ²⁰
Azul (B)	450–495 nm
Verde (G)	495–570 nm
Amarelo (Y)	570–590 nm
Laranja (O)	590–620 nm
Vermelho (R)	620–750 nm

²⁰ 1 nm = 1 x 10⁻⁹ m

Você poderá visualizar a figura de um espectro da luz em http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Inverse_visible_spectrum.svg.

A relação $V = \lambda \cdot \nu$ também é válida para as ondas eletromagnéticas e, através dela, podemos calcular as frequências do espectro visível, substituindo V pela velocidade da luz, que no vácuo e no ar possuem aproximadamente o seguinte valor: $c = 3 \times 10^8$ m/s

Você poderia imaginar que os raios X, as ondas de rádio, as micro-ondas, a radiação térmica (infravermelho) e a luz visível são ondas eletromagnéticas, só que de comprimentos diferentes?

Você poderá visualizar a figura de espectro eletromagnético em http://commons.wikimedia.org/wiki/File:EM_Spectrum_Properties_pl.svg.

Planck e a radiação do corpo negro



Figura 7: Um arame submetido ao calor incandesce.

Mais um experimento. Segure com um alicate um clips e leve-o à chama de um fogão. À medida que o metal esquenta começa a emitir luz. A cor vai mudando e a intensidade da luz emitida vai aumentando, de acordo com o aumento da temperatura. O clips ficou *incandescente*.

Você poderia citar outros exemplos em que ocorre o mesmo fenômeno? A incandescência é muito comum no nosso dia-a-dia, em fenômenos naturais ou não.

Ao controlar uma intensidade de uma lâmpada incandescente com um dimmer, nota-se facilmente que a cor da luz depende do quanto giramos o dimmer. Há como “medir” essa cor?

Você poderá visualizar uma figura com um dimmer em http://www.howtousea.com/detail/dimmer.jpg?id=light_switch&cache=cache.

Espectroscopia

O ótico alemão Joseph Fraunhofer (1787 –1826) estudou a luz do sol, utilizando um *espectroscópio*. O *espectroscópio* decompõe a luz do objeto observado através de uma rede de difração ou um prisma.

Você poderá visualizar uma figura com esquema do espectrômetro de chama em http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Flame_emission_schematic.gif.

Você poderá visualizar uma figura com espectro solar de Fraunhofer em <http://www.aip.org/history/cosmology/tools/pic-spectroscopy-fraunhofer-spectrum.htm>.

O resultado é uma bela figura com as cores do arco-íris. Dependendo das características do detector, podem-se medir as *intensidades* da luz para cada comprimento de onda do espectro visível e não visível.

Podemos dizer, então, que a cor do filamento de uma lâmpada ou a cor do sol é o resultado da composição de várias cores, cada uma com sua intensidade, resultando na cor final que observamos.

Uma propriedade importante do espectro solar observada em detalhe por Fraunhofer é que ele *não é contínuo*, contém *linhas escuras*. Fraunhofer catalogou mais de 400 linhas e as usava para testar as lentes que fabricava.

Os cientistas da época foram em busca da causa daquelas linhas escuras. Em 1859, o químico Robert Wilhelm Eberhard Bunsen (1811 – 1899) e o físico Gustav Robert Kirchhoff (1824 – 1887), ambos alemães, uniram forças no estudo do espectro da luz emitido por diversas substâncias aquecidas por uma chama²¹, inaugurando a *espectroscopia*, método usado até hoje para identificação de elementos.

No espectroscópio, o prisma decompõe da luz proveniente de uma estrela. Repare que há raias escuras no espectro que podem ajudar a identificar o que há na superfície da estrela.

²¹ Artigo original disponível em: <http://dbhs.wvusd.k12.ca.us/webdocs/Chem-History/Kirchhoff-Bunsen-1860.html>

Você poderá visualizar uma figura do espectroscópio em
<http://www.gutenberg.org/files/20417/20417-h/images/image056.jpg>.

Você poderá visualizar uma figura do espectroscópio desenhado por Kirchhoff e Bunsen em seu artigo de 1860 em
<http://www.gutenberg.org/files/20417/20417-h/images/image056.jpg>.

O funcionamento do espectroscópio é simples. A fonte de luz a ser analisada é colocada em frente ao aparelho. Um prisma no interior dele decompõe a luz e, através de uma lente é observado o espectro assim formado.

Kirchhoff e Bunsen observaram os espectros em três diferentes situações:

Situação 1: Espectro contínuo.

Fonte de luz: materiais de alta densidade (como metais) aquecidos. É o caso do filamento de tungstênio de uma lâmpada ligada.

O espectro contínuo é um caso particular do espectro de emissão.

Você poderá visualizar uma figura do espectro contínuo em
<http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/610/625137/Chaisson/CH.00.002/HTML/CH.00.002.s5.htm>.
A imagem encontra-se no tópico Figure 2.11 Spectroscope.

Situação 2: Espectro de emissão.

Fonte de luz: qualquer material aquecido. Em especial, os gases são muito usados.

Você poderá visualizar uma figura do espectro de emissão em
<http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/610/625137/Chaisson/CH.00.002/HTML/CH.00.002.s5.htm>.
A imagem encontra-se no tópico Figure 2.12 Emission Spectrum.

Situação 3: Espectro de absorção.

A amostra (normalmente um gás) é colocada entre a fonte de luz (normalmente de espectro contínuo) e o espectrômetro.

Você poderá visualizar uma figura do espectro de absorção em <http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/610/625137/Chaisson/CH.00.002/HTML/CH.00.002.s5.htm>.

A imagem encontra-se no tópico Figure 2.15 Absorption Spectrum.

Resultados:

Você poderá visualizar uma figura com o resultado em

<http://www.astro.bas.bg/~petrov/herter00.html>.

A imagem encontra-se no tópico Types of Spectra.

Um resultado importantíssimo é que, para um dado gás, as linhas do espectro de emissão são exatamente aquelas que faltam no espectro de absorção.

Cada elemento possui um espectro de emissão (e, conseqüentemente, de absorção) característico, ou seja, o espectro é como se fosse a “impressão digital” do elemento químico. Kirchhoff e Bunsen levantaram o espectro de emissão de vários elementos conhecidos e ainda descobriram o céσιο e o rubídio²².

Você poderá visualizar uma figura com o espectro de emissão de diversos elementos em <http://www2.selu.edu/Academics/Faculty/delbers/emission-spectra-2.jpg>.

E as linhas escuras no espectro solar, o que são afinal? Estava claro, pela imagem, que se tratava de um espectro de absorção (situação 3). Mas quem seria a fonte de luz e qual seria o gás no caminho? Após tantos experimentos em laboratório, ficava claro que a fonte de luz é o núcleo do sol e o gás era sua atmosfera. E mais: pôde-se determinar que a atmosfera solar era composta principalmente de hidrogênio e de um outro novíssimo gás, batizado de *hélío*, em homenagem à Helios, o deus grego do sol.

²² Céσιο, do grego caesius = azul-celeste, pois o espectro de emissão apresentava linhas azuis e rubídio, do grego rubidus, pois o seu espectro de emissão continha linhas vermelhas, da cor de um rubi.

Você poderá visualizar uma figura com o espectro de absorção solar em <http://www2.selu.edu/Academics/Faculty/delbers/emission-spectra-2.jpg>.

Você poderá visualizar uma figura com gases na superfície solar (NASA) em http://science.nasa.gov/headlines/y2003/images/superstorm/eit_big.gif.

Para pensar

1. Através da espectroscopia, podem-se determinar os elementos da superfície das estrelas? Como?
2. Como deveria ser o espectro da luz da lua? E dos planetas do sistema solar?
3. Os fogos de artifício queimam sais. Como se obtém as suas diversas cores?
4. A observação espectroscópica dos astros mostrou que o universo é formado pelo mesmo tipo de matéria que a Terra. Que consequências teriam essa conclusão para os aristotélicos?

O corpo negro

Vamos nos concentrar agora no *espectro contínuo* emitido, por exemplo, pelo filamento de uma lâmpada. O que acontece se trocarmos o filamento de tungstênio por outro material? Experimentalmente, observa-se que o espectro não depende muito do material incandescente. A **temperatura** é que determina a cor do filamento.

Em 1859, Kirchhoff definiu um objeto ideal em que a radiação por ele emitida dependesse **somente** da sua temperatura. Seria um corpo material, capaz de absorver toda a radiação emitida sobre ele e que, quando aquecido, “devolveria” a energia recebida. Na prática, um objeto formado pelo *negro de fumo* ou *fuligem* se aproximaria muito desse ideal. À temperatura ambiente, esse objeto idealizado não emite radiação visível, é *negro*. Por esse motivo, Kirchhoff o batizou de *corpo negro*.

Um forno que se comunique com a sua vizinhança apenas através de um pequeno orifício é um corpo negro muito próximo do ideal. A radiação que ele emite pelo buraquinho só depende da temperatura interna do forno e a radiação que entrar pelo buraquinho raramente sairá por ele. É este tipo de forno que os cientistas usam para estudar o *espectro de emissão do corpo negro*.

Você poderá visualizar uma figura do forno com um orifício – um corpo negro em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Extended_Source_Black_Body.JPG.

Resultados experimentais dos estudos da radiação emitida pelo corpo negro

O espectro de emissão do corpo negro foi estudado por Kirchoff e outros. Fixando uma temperatura, a intensidade emitida em cada comprimento de onda de radiação foi medida. Em seguida, fixava-se outra temperatura e repetia-se o experimento. Os resultados estão resumidos no gráfico abaixo:

Você poderá visualizar uma figura com espectro do corpo negro para diversas temperaturas em http://commons.wikimedia.org/wiki/File:BlackbodySpectrum_loglog_150dpi_en.png.

Vemos que o experimento mediu as intensidades de radiações visíveis e não visíveis. À 300K (temperatura ambiente), o corpo negro só emite radiação térmica (infravermelho). Você seria capaz de determinar, pelo gráfico, qual a cor da luz visível emitida à 5777K (temperatura da superfície solar)?

A partir do conceito de corpo negro, pôde-se desenvolver um novo e surpreendente método de medição da **temperatura**. A relação **direta** entre temperatura e radiação eletromagnética eliminou a necessidade de acessar diretamente um corpo para saber sua temperatura. O corpo poderia ser imenso, microscópico, estar escondido, ser invisível – bastava investigar a radiação por ele emitida, determinando seu espectro, que teríamos a sua temperatura. Sem termômetros! Incrível. É assim que se pode determinar hoje, por exemplo, a temperatura do espaço sideral : 2,725K; ou a temperatura da superfície solar: 5777K. Uma aplicação prática foi a criação de uma escala de *temperatura da cor* utilizada por fotógrafos e designers que relaciona cada cor a uma temperatura.

Você poderá visualizar uma figura com uma escala da temperatura da cor em <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Black-body-in-mireds-reversed.png>.

Em busca de um modelo para a radiação do corpo negro

O final do século XIX era também um momento de avanços impressionantes na *Termodinâmica*²³, área da Física inaugurada em 1824 pelo físico francês Sadi Carnot (1796 – 1832). Ela tinha como propósito inicial melhorar o rendimento de máquinas térmicas mas, a partir da segunda metade do século XIX, esse limite foi quebrado. A Termodinâmica aliou-se à estatística e se tornou o principal elo entre o micro e o macro e o alicerce dos desenvolvimentos teóricos da físico-química. Não seria de se estranhar que a Termodinâmica estatística fosse a base teórica do modelo da radiação do corpo negro.

Lei de deslocamento de Wien

Buscar um modelo para esses fenômenos significaria encontrar uma expressão matemática que descrevesse as curvas encontradas ($I \times \lambda$, em diferentes temperaturas – Fig. 38), utilizando o conhecimento existente, e talvez algum novo, mas que não entrasse em choque com os conhecimentos anteriores. Veja as curvas de emissão do corpo negro obtidas experimentalmente (Fig. 38), cada uma a certa temperatura. Além da intensidade máxima (pico) da radiação ser diferente para cada curva (mais alta quanto maior a temperatura), à medida que a temperatura vai aumentando, o comprimento de onda associado ao pico ($\lambda_{\text{máx}}$) vai se deslocando para a esquerda na figura, ou seja, quanto maior a temperatura, menor o $\lambda_{\text{máx}}$.

Você poderá visualizar uma figura com o gráfico de intensidade da emissão em função do comprimento de onda para várias temperaturas em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Wiens_law.svg.

Em 1896, o físico alemão Wilhelm Wien (1864 – 1928) conseguiu ajustar esse comportamento à Termodinâmica. E a expressão que o descreve ficou conhecida como *lei de deslocamento de Wien*, sendo que sua expressão matemática é:

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T}$$

Onde $b = 2.9 \times 10^6 \text{ nm K}$ é a constante de Wien, obtida experimentalmente.

²³ Do grego θερμη, therme, que significa "calor" e δυναμις, dunamis, que significa "poder, força, capacidade"

Observando a unidade b , você seria capaz de determinar as unidades de λ_{\max} e T ?

Os comprimentos de onda emitidos com maior intensidade (λ_{\max} e sua vizinhança) dão o tom predominante na cor que observamos do corpo negro, se ele está no visível. Que cores seriam essas para o sol (5777K)?

Lei de Stefan-Boltzmann

Como já vimos, a *intensidade* da radiação emitida pelo corpo negro varia de acordo com a temperatura. Quanto mais quente, a radiação é emitida com maior intensidade. Em 1879, o físico esloveno Jožef Stefan (1835-1893) deduziu, a partir de resultados experimentais, que a potência P (energia irradiada por segundo) de um corpo negro é diretamente proporcional à sua temperatura T elevada à quarta potência e também diretamente proporcional à área A da superfície emissora. Essa relação foi chamada de Lei de Stefan.

$$P = \sigma \cdot T^4 \cdot A$$

Onde $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ é a constante de Stefan.

Mais tarde, em 1884, o físico austríaco Ludwig Boltzmann (1844-1906) deduziu a Lei de Stefan teoricamente, utilizando a Termodinâmica estatística. O modelo utilizado por Boltzmann foi uma máquina térmica que, em vez de usar gás como substância, usava... a luz!

Vale aqui um parênteses importantíssimo: em 1871, Boltzmann, baseado nos trabalhos pioneiros de Maxwell em física-estatística, desenvolveu, junto com outros cientistas, a *teoria cinética dos gases*, a qual relaciona o micro com o macro. Um dos resultados mais impressionantes é a relação entre a temperatura T de um gás (o macro) e o movimento das suas moléculas (o micro), mais especificamente a energia cinética média E_c das moléculas. Utilizando recursos da Termodinâmica e da estatística e um modelo extremamente simples para os gases, Boltzmann deduziu que:

$$E_c = \frac{3}{2} k_B T$$

Onde $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ é a constante de Boltzmann: o elo entre o microscópico e o macroscópico. Em outras palavras, a média das energias cinéticas de cada uma das moléculas de um gás é $\frac{3}{2} k_B T$. Veja a ordem de grandeza da constante de Boltzmann: ela é muito, muito pequena, tal como esperado, pois a energia cinética de uma única molécula de um gás deve ser mesmo pequena.

Em busca da equação da curva

Pelo formato das curvas da intensidade da radiação do corpo negro X comprimento de onda a diferentes temperaturas, nota-se que sua expressão matemática não seria tão simples como a Lei de Stefan e a Lei de Deslocamento de Wien.

Em 1893, o mesmo Wilhelm Wien, baseado nos dados experimentais e na sua intuição, “ajustou” uma expressão matemática aos dados experimentais (hoje um computador faz isso instantaneamente), que ficou conhecida como a Lei da Radiação de Wien:

$$I(\nu, T) = \alpha \cdot \nu^3 \cdot e^{-\beta\nu/T} \quad \text{Onde: } \alpha \text{ e } \beta \text{ são constantes.}$$

Em 1900, na Inglaterra, Lord Rayleigh (1842 – 1919) derivou teoricamente uma outra expressão matemática, baseando-se nas leis clássicas de Newton e Maxwell e com o auxílio da mecânica estatística de Boltzmann.

O modelo teórico de Rayleigh foi o de uma “cavidade radiante” onde as ondas eletromagnéticas refletem nas paredes formando ondas estacionárias semelhantes às da experiência da corda, só que em 3 dimensões.

Os resultados de Rayleigh foram corrigidos pelo físico James Hopwood Jeans (1877 – 1946), e a expressão final ficou conhecida com Lei da Radiação de Rayleigh-Jeans:

$$I(\nu, T) = \frac{8\pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot k_B T$$

Onde: k_B é a constante de Boltzmann e c é a velocidade da luz.

Entretanto, a aproximação de Wien só explicava bem a radiação do corpo negro para comprimentos de onda baixos (frequências altas); e, a de Rayleigh, só funcionava bem para comprimentos de onda altos (frequências baixas)²⁴. A figura 39 mostra o problema: a curva verde é a curva experimental, ou seja, a realidade dos fatos; a curva vermelha é aquela derivada pela equação de Rayleigh-Jeans: ela só se ajusta bem à curva experimental em frequências baixas. A curva em azul é a curva derivada da equação de Wien: só se ajusta bem à curva verde, experimental, em frequências altas. Ou seja, nenhuma das duas curvas derivadas da teoria explicava a curva experimental. Disso os cientistas não gostam, pois a ciência

²⁴ Lembre-se: a frequência ν e o comprimento de onda λ se relacionam através da expressão $c = \lambda \cdot \nu$ onde c é a velocidade da luz. Logo, frequências baixas significam comprimentos de onda grandes e vice-versa.

parte do pressuposto de que existe uma explicação unitária para um mesmo fenômeno. Por exemplo: imagine que a Lei da Atração Gravitacional valesse tal como é até a distância entre a Terra e a Lua, mas na distância entre a Terra e o Sol tivéssemos que usar uma outra lei. Ela não seria mais uma lei universal e perderia, certamente, em sua força e beleza.

Você poderá visualizar uma figura com o gráfico de comparação entre as emissões do corpo negro previstas por Rayleigh-Jeans, Wien e Planck em <http://en.wikipedia.org/wiki/File:RWP-comparison.svg>.

O desenvolvimento teórico de Planck

O cientista alemão Max Planck (1858 – 1947) veio de uma família de estudiosos famosos, teólogos e advogados. Tradicionalista e conservador, era descrente das teorias atômicas. Especialista em Termodinâmica e teoria dos campos, Planck assumiu a cátedra da universidade de Berlim, após a morte de Kirchhoff.

Planck começou a se interessar pelo corpo negro em 1895 e suas pesquisas nesse campo durariam 5 anos. Planck desejava construir um modelo teórico que encontrasse as correções necessárias na Lei da Radiação de Wien para entrar em concordância com os dados experimentais em *qualquer* frequência. O modelo de Planck baseava-se no que ele chamou de “osciladores”²⁵, ou seja, os geradores das ondas que estariam nas paredes do forno. Era como se bolinhas infinitamente pequenas, atadas a molas idem, estivessem presas na parede interna do corpo negro e a absorção de radiação se desse com as bolinhas passando a vibrar mais, enquanto a radiação se desse com as bolinhas passando a vibrar menos. O desenvolvimento teórico seguiu, chegando a uma expressão final muito interessante, como veremos.

Em outubro de 1900, Planck convidou para um chá em sua casa, Heinrich Rubens (1865 – 1922) que, juntamente com Ferdinand Kurlbaum (1857 – 1927), obtivera dados de alta precisão da radiação do corpo negro, especialmente nas frequências onde a Lei da Radiação de Wien falhava. Horas depois que seu convidado foi embora, Planck intuiu uma expressão que se ajustava perfeitamente aos dados experimentais, a *Lei de Planck, da radiação térmica*:

²⁵ Planck evitava a palavra “átomo” em seus artigos.

$$I(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Variável	Descrição	Unidade
I	radiância espectral	$\text{J}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}\cdot\text{Hz}^{-1}$
ν	frequencia	hertz
T	temperatura do corpo negro	kelvin
h	constante de Planck	joule / hertz
c	velocidade da luz	metros / segundo
e	número de Euler	sem dimensão
k	constante de Boltzmann	joule / kelvin

Muito bem, o grande objetivo de se alcançar uma fórmula que se ajustava à curva foi alcançado! Mas... o que significa essa fórmula? O que ela pode nos dizer sobre o que acontece *fisicamente* com as ondas eletromagnéticas dentro do forno, mais especificamente, da interação da radiação com as paredes do forno? Planck partiu, então, para um desenvolvimento teórico que chegasse ao resultado.

Baseado na Termodinâmica e nos estudos de mecânica estatística de Boltzmann, Planck desenvolveu seu modelo teórico. Boltzmann tinha um trabalho com átomos que era *matematicamente* semelhante. Nele, as *energias* dos átomos eram múltiplos inteiros de uma energia mínima ϵ . Planck fez uma analogia com os "osciladores" das paredes do forno e obteve, estupefato, o seguinte resultado: para uma determinada frequência ν , a energia dos osciladores somente poderia ser um *múltiplo inteiro* de $h\nu$, onde $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ j}\cdot\text{s}$ é a *constante de Planck*. A energia não era absorvida ou emitida de modo contínuo, mas apenas em múltiplos de uma unidade mínima, que dependia da frequência da radiação! Ou seja, se estamos trabalhando com apenas uma frequência (ν), toda a energia que o corpo negro pode absorver ou emitir tem que ser múltiplo inteiro de $h\nu$! O *quantum*²⁶ de energia dos osciladores deveria ser $h\nu$. Devido à pequeníssima magnitude da constante de Planck, não notamos isso no nosso dia-a-dia.

Devido à natureza conservadora de Planck era muito difícil pensar que a energia, grandeza fundamental de toda a Física, que todos pensavam que podia ser emitida ou absorvida continuamente, pudesse ser discreta, ou seja, emitida ou absorvida apenas em unidades múltiplas de um certo valor mínimo. Deve ter sido muito difícil para Planck admitir sequer essa possibilidade. Mas, mesmo assim, Planck publicou seu trabalho, e numa das mais magníficas páginas da história da ciência, deu início ao que chamamos hoje de Mecânica Quântica.

²⁶ Quantum, do latim, significa "Quantidade de algo". O plural de quantum é quanta.

Uma analogia para isso: quando se tem uma torneira pingando, a menor quantidade de água que se pode obter é igual ao volume de uma gota; mesmo enchendo o balde até a metade ou o balde todo, qualquer volume de água será um múltiplo inteiro do valor do volume de uma gota. Isso quer dizer que temos um volume mínimo discreto (o volume da gota) e todos os volumes que poderão ser obtidos daí serão múltiplos desse mínimo. Se, ao lado, temos uma outra torneira também pingando, mas com gotas de um volume diferente, o mesmo acontecerá, só que o volume discreto, mínimo, será diferente. Algo análogo se passa com a radiação eletromagnética: o menor "volume" (na verdade, quantidade) de energia que podemos obter de uma radiação com frequência ν_1 é $h\nu_1$; se tivermos outra fonte de radiação, com frequência ν_2 , então a menor quantidade de energia que pode ser obtida dessa fonte é $h\nu_2$. Ou seja, cada frequência leva ao seu próprio quanta de energia.

Olhando o valor da constante de Planck, vemos que os valores desses mínimos são realmente muito pequenos. Tão pequenos que, no nosso dia-a-dia, não os percebemos. Quando acendemos uma luz, não percebemos uma "chuva" de fótons, mas um fenômeno contínuo. Uma outra analogia poderá nos ajudar: digamos que você tenha um tubo em posição oblíqua, pelo qual descem pedras que se chocam contra um anteparo (um pedaço de madeira plana, por exemplo, uma tábua), pendurado por um eixo que se deixa a tábua ir para frente ou para trás. Se as pedras forem grandes, a madeira vai oscilar para frente e para trás, conforme as pedras a vão atingindo ou não. Entretanto, se ao invés de pedras grandes, tivermos britas (pedrinhas de construção), a madeira vai oscilar muito menos. Se, mais ainda, ao invés de pedrinhas de brita, o que descer pelo tubo for areia, vamos ver o anteparo praticamente parado, como se estivesse recebendo um fluxo constante de energia, que a deixa naquela posição. Mas, na verdade, mesmo com no caso da areia, a energia é transmitida ao anteparo em pequenas porções, relativas ao coque de cada um dos grãos de areia contra ela. E a energia total transferida é a soma das energias de cada um dos choques, embora não percebamos.

Einstein e o os fótons

Albert Einstein (1879 – 1955) era, por assim dizer, Planck elevado a -1. Seu pai era dono de uma empresa de eletricidade que competia com a Siemens e faliu. Os seus relacionamentos matrimoniais não se encaixavam muito nos padrões da época. Em 1900, Einstein era um jovem de 21 anos, às vezes insolente e petulante, sem medo de desafiar as autoridades da época. Talvez por isso, apesar de inteligentíssimo, não conseguia emprego como professor e passou algumas vezes sérias dificuldades financeiras.

Mas gênio é gênio. Ao conhecer os trabalhos de Planck, Einstein teve a certeza de estar sendo quebrada uma fronteira da Física com algo totalmente novo e revolucionário.

Um dos estudos de Einstein foi a formulação teórica para o efeito fotoelétrico, que também trata da interação entre a radiação eletromagnética e a matéria. O físico húngaro Philipp Lenard (1862 – 1947), estudou experimentalmente, em detalhes, esse fenômeno. A montagem experimental está diagramada na Figura 40. Nela, vê-se um cátodo (pólo negativo) de metal (césio, por exemplo) côncavo, e um anodo (pólo positivo). Há uma diferença de potencial entre eles e tudo está dentro de um tubo de vidro, no qual há vácuo. Quando a luz atinge o cátodo, ela “expulsa” elétrons da superfície do metal, e esses elétrons (que são negativos) são capturados no anodo (positivo), fechando o circuito, dando-se assim uma passagem de corrente, que é medida no amperímetro mostrado. Daí, ser chamado efeito fotoelétrico, ou seja, fótons de luz causando o aparecimento de corrente elétrica.

Você poderá visualizar uma figura com o esquema da montagem experimental para investigar o efeito fotoelétrico em http://galileo.phys.virginia.edu/classes/252/photoelectric_effect.html.

Esse efeito já era esperado, pois os elétrons de um metal são fracamente ligados aos seus núcleos²⁷ e a radiação eletromagnética incidente os aceleraria. Se a energia transferida aos elétrons for suficiente, alguns deles poderiam saltar do metal.

Para estudar melhor o efeito fotoelétrico, Lenard estudou a influência da frequência da intensidade da radiação e de sua frequência: em princípio, era de se esperar que quanto maior fosse a intensidade da radiação incidente, maior fosse a corrente medida, pois maior intensidade significa mais energia a ser transferida para a superfície do metal, então, mais elétrons saltariam fora da superfície do metal. Mas os resultados obtidos por Lenard não mostraram isso...

Ao contrário do esperado, para radiações abaixo de certa frequência, por maior que fosse sua intensidade, nada ocorria, ou seja, a corrente era sempre zero: não havia efeito fotoelétrico. Para as frequências acima de certo valor, aí sim, quanto maior a intensidade, maior a intensidade da corrente medida. Mas Lenard observou que mesmo nesses casos, em que o aumento da intensidade da radiação aumentava a corrente, o responsável pelo aumento da corrente não era um aumento na velocidade dos elétrons emitidos (que não se alterava), mas o aumento do número de elétrons emitidos.

²⁷ Por isso os metais são bons condutores de eletricidade.

Você poderá visualizar uma figura com o esquema da energia dos elétrons em http://galileo.phys.virginia.edu/classes/252/photoelectric_effect.html.
A energia dos elétrons emitidos depende do comprimento de onda da luz incidente, ou seja, da energia dos fótons incidentes.

As coisas estavam dessa forma, quando, em 1905, Einstein explicou o efeito fotoelétrico lançando mão de uma interpretação da radiação do corpo negro diferente da de Planck. Para Einstein, a quantização da energia deveria ser uma propriedade da *luz* e não dos “osciladores”. Sendo assim, a interação da luz com a matéria se daria através de *pacotes de energia* discretos, mais tarde chamados de *fótons* – as “partículas” de luz. Mas por que os fótons explicam o efeito fotoelétrico? De acordo com a teoria de Einstein, a *intensidade* da luz se traduz no *número de fótons*, e a energia que cada fóton transporta é $h\nu$. Cada elétron é ejetado do metal como resultado da interação com um fóton. Se o fóton tem energia suficiente, consegue ejetar o elétron. Se não tem, não haverá ejeção de elétrons. Isso explica porque o efeito fotoelétrico só era observado a partir de determinadas frequências: só a partir daquelas frequências, cujos fótons associados tinham energia suficiente ($h\nu$), haveria expulsão do elétron. O aumento da intensidade da luz só aumenta o número de fótons e, por consequência, o número de elétrons emitidos, e não sua velocidade. Estavam explicados os comportamentos observados. Um fato curioso é que o fóton não possui massa, mas mesmo assim possui quantidade de energia suficiente para expulsar o elétron da superfície do metal. A ideia de considerar a luz como “partículas” era tão absurda para a época, que o próprio Einstein teve cuidado com as palavras ao escrever seu histórico artigo “*On a Heuristic Viewpoint Concerning the Production and Transformation of Light*” (Sobre um ponto de vista *heurístico*²⁸ a respeito da produção e transformação da luz). Einstein ganhou, em 1921, o prêmio Nobel pela sua explicação do efeito fotoelétrico.

O fóton só foi reconhecidamente aceito pelos cientistas após a descoberta do *efeito Compton*, em 1923, no qual a colisão de fótons e elétrons foi diretamente observada.

Modelo atômico de Bohr

O cientista dinamarquês Niels Henrik David Bohr (1885 – 1962) terminou seu doutorado em 1909, na universidade de Copenhague. Em 1911, Bohr conseguiu uma bolsa que o levou à Cambridge, no laboratório de Thomson. A estada de Bohr na Inglaterra foi uma decepção. Em seguida, quem acolheu o

²⁸ Heurístico: diz-se de hipótese de trabalho que, a despeito de ser verdadeira ou falsa, é adotada a título provisório como ideia da diretriz na investigação dos fatos (dicionário Houaiss).

jovem cientista, em 1912, foi nada menos que Rutherford, o homem que sabia escolher alunos brilhantes. Rutherford incentivou Bohr, que passou a trabalhar na área da física teórica, interpretando os resultados experimentais da equipe de Rutherford.

Em 1913, Bohr publicou o histórico artigo *On the Constitution of Atoms and Molecules (Sobre a constituição de átomos e moléculas)*, descrevendo seu revolucionário modelo atômico. Bohr teve como base o modelo planetário de Rutherford e iniciou atacando sua principal fragilidade: a instabilidade. De acordo com a Eletrodinâmica clássica de Maxwell, o elétron em órbita irradia e perde energia. Sendo assim, a trajetória do elétron seria uma espiral “suicida” em direção ao núcleo, durante a qual emitiria continuamente ondas eletromagnéticas com frequências cada vez mais altas.

Você poderá visualizar uma figura com a instabilidade do átomo no modelo de Rutherford em http://www.iop.org/activity/education/Projects/Teaching%20Advanced%20Physics/Atomic%20and%20Nuclei/Wave%20particle%20duality/page_5494.html.

Certamente, não é isso que acontece na prática. Os átomos são estáveis, e seus espectros de emissão são discretos, isto é, mostram apenas algumas frequências bem definidas, específicas de cada elemento, como já vimos. Bohr sabia que, no âmbito microscópico, acontecia alguma “coisa” que era imperceptível em situações do nosso dia-a-dia. Mas o que seria?

Bohr conhecia os trabalhos de Planck e Einstein e sabia que no mundo das partículas subatômicas reinava um comportamento quântico (isto é, relacionado a grandezas discretas) e ainda que a *constante de Planck, h*, desempenhava um papel fundamental.

Vamos analisar a *unidade* da constante de Planck ($h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$). *Joule.segundo* é a unidade do *momento angular (L)*. Essa grandeza está relacionada aos movimentos circulares! O momento angular de uma partícula em uma órbita de raio r é dado por mvr . A jogada genial de Bohr foi *postular* que o *momento angular* do elétron deveria ser *quantizado* e o quantum de momento angular deveria ser $\hbar = h/2\pi$. $L = mvr = n \cdot \hbar$, onde n é um inteiro.

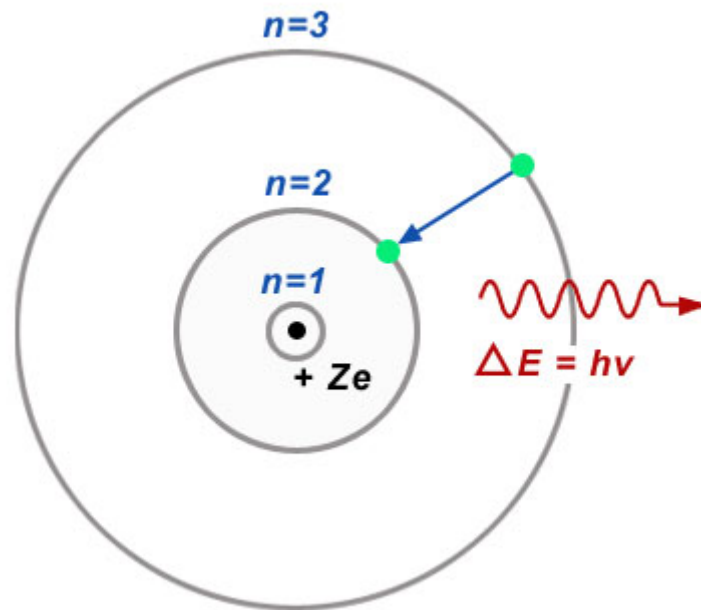


Figura 8: Relação entre as órbitas e as energias no modelo de Bohr. A cada órbita está relacionado um número quântico n e uma energia. Para o elétron saltar de uma órbita à outra ele emite ou absorve um fóton de energia $h\nu$ igual à diferença ΔE de energia entre as órbitas.

Cada valor de n corresponde a um *estado quântico* do elétron. As leis clássicas do movimento circular do elétron em torno do núcleo conduziriam aos valores de energia e raio da órbita correspondentes a cada estado quântico. Se os valores teóricos correspondessem aos experimentais, o modelo seria válido.

Bohr trabalhou com o átomo de hidrogênio ou íons de apenas um elétron. Os resultados teóricos finais para o raio e energia do elétron no átomo de hidrogênio são os seguintes:

$$r_n = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{k \cdot e^2 \cdot m_e}$$

$$E_n = \frac{(k \cdot e^2)^2 \cdot m_e}{2\hbar^2 \cdot n^2}$$

Onde: n é o número quântico, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , k é a constante eletrostática, e é a carga do elétron e m_e é a massa do elétron.

Os valores numéricos para o *estado fundamental* ($n = 1$) são os seguintes:

$r_1 = 0,510 \times 10^{-10}$ m, que é chamado de *Raio de Bohr*.

$E_1 = -13,6$ eV = $2,2 \times 10^{-18}$ J, que é a energia de ionização do hidrogênio.

Esses resultados coincidem perfeitamente com os dados experimentais.

O mais impressionante, porém, ainda estava por vir, ao ser estudada a *diferença* entre as energias de dois estados quânticos diferentes ($E_n - E_m$). A cada diferença de energia correspondia, exatamente, a energia do fóton relativo a uma das raias do espectro de hidrogênio:

$$E_n - E_m = h\nu$$

Você poderá visualizar uma figura de um espectro de emissão do hidrogênio que era explicado pelo modelo de Bohr em <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hyde.html>. A imagem encontra-se no tópico Hydrogen Spectrum.

O *mecanismo* dos espectros eletromagnéticos estava explicado: quando um átomo recebia energia (excitado por uma chama ou uma descarga elétrica, por exemplo), seu elétron saltava para uma órbita de maior energia. Quando esse elétron voltava ao estado fundamental, emitia a energia recebida, mas na forma de um fóton, cuja energia ($h\nu$) era exatamente igual à diferença entre a energia da órbita mais energética e a menos energética, $E_n - E_m$. O espectro então era formado por essas transições eletrônicas, como mostrado na Figura 43. Mais ainda, era possível explicar a correspondência entre as linhas de emissão e de absorção, fenômeno evidenciado por Bunsen e Kirchhoff, cerca de 50 anos antes: se a radiação incidente tivesse um fóton com energia igual à diferença de energia entre duas órbitas, apenas assim ela poderia ser absorvida. Não haveria absorção de radiações cujos fótons não correspondessem, exatamente, a alguma diferença de energia entre as órbitas ocupadas por elétrons e alguma outra. Ao mesmo tempo, como as energias associadas às orbitas permitidas eram dependentes de Z , o número atômico, evidentemente, como cada elemento tem seu Z , cada elemento teria suas órbitas permitidas em valores de energia diferentes e, portanto, os valores da diferença de energia entre essas órbitas seriam próprios de cada elemento. Ou seja, cada elemento teria seu próprio espectro, conforme realmente observado na prática.

Mas, para tudo isso funcionar, tinha-se que admitir que, enquanto o elétron estivesse em alguma órbita permitida (aquelas cujos raios ou valores de energia eram calculadas pelo modelo de Bohr), ele não emitia radiação nenhuma, mas sim ao *saltar* de um estado quântico (órbita) para outro. Por isso, cada estado quântico foi chamado de *estado estacionário*. Esse comportamento não era explicável pela Mecânica clássica, era uma das “coisas” que só aconteciam no mundo submicroscópico e foi *postulado* por Bohr. Mas o sucesso do modelo em explicar o espectro do átomo de hidrogênio dava robustez a esse postulado...O termo *salto quântico* é usado, pois, de acordo com o modelo de Bohr: o elétron passa

de um estado para outro *sem passar por estados intermediários*. É como se o elétron se “teletransportasse” de uma órbita à outra.

O diagrama de níveis energéticos do elétron do átomo de hidrogênio mostra que, à medida que o número quântico n aumenta, o intervalo entre as energias diminui. Ou seja, para números quânticos altos, a quantização da energia vai ficando imperceptível, aproximando-se cada vez mais do contínuo. Através dessa observação, Bohr formulou um dos princípios mais importantes da Mecânica Quântica – o *princípio da correspondência* –, cuja afirmação é a de que as teorias quânticas vão se aproximando das clássicas à medida que o número quântico aumenta. Em outras palavras, a Mecânica e a Eletrodinâmica clássicas devem ser naturalmente obtidas pela teoria quântica, à medida que saímos do limite submicroscópico.

O modelo de Bohr ampliou o modelo de Rutherford, removendo (embora através de um postulado) sua principal limitação: a instabilidade. Além disso, esse modelo explicou com sucesso o espectro do átomo de hidrogênio (e de outras espécies monoelétrônicas). Porém, apesar de ser realmente grande esse sucesso, abrindo caminho para que os cientistas entendessem que, ao nível da estrutura da matéria, conceitos diferentes dos clássicos teriam de ser empregados, sendo necessário fazer uso da teoria quântica, logo apareceram sérias limitações. A principal estava no fato de não ser possível prever, com precisão, as linhas dos espectros de átomos com mais de um elétron. Ou seja, o modelo de Bohr concorda quantitativamente apenas com os dados experimentais do átomo de hidrogênio, íons com apenas um elétron e sistemas similares.

A teoria atômica sempre andou lado a lado com os experimentos de espectroscopia. O espectro é a *impressão digital* do átomo, pois as linhas espectrais estão diretamente ligadas às energias permitidas aos elétrons, que, por sua vez, como já vimos, é um conjunto único para cada elemento. Mesmo em relação ao átomo de hidrogênio, o modelo de Bohr explica o espectro do átomo de hidrogênio só até certo limite. Experimentos posteriores, mais sensíveis, mostraram que as raias espectrais do hidrogênio se desdobravam em raias muito próximas umas das outras, indicando a presença de níveis de energia bem próximos entre si: são os chamados desdobramentos das raias espectrais. O que deveria ser acrescentado na teoria de Bohr para explicar esses e outros resultados experimentais?

Uma alternativa, sugerida por Arnold Sommerfeld (1868 – 1951), foi ampliar o modelo de Bohr e considerar que os elétrons poderiam se movimentar em órbitas elípticas. Assim, para um mesmo número quântico n , o elétron poderia possuir *momentos angulares* diferentes e quantizados. Sommerfeld introduz então o número quântico l , relacionado ao momento angular do elétron.

Espectros emitidos por amostras sob influência de campos magnéticos revelaram ainda mais raias e a necessidade de um terceiro número quântico, o número quântico magnético m . Infelizmente, o modelo

de Sommerfeld levava a uma série de inconsistências. Foi abandonado e o problema só foi solucionado através do modelo moderno do átomo.

Dualidade onda-partícula

Os estudos sobre fotoemissão de Einstein levavam a uma interpretação física incômoda para os cientistas. A luz tinha um comportamento dúbio, uma “dupla identidade”. Dependendo do experimento, a luz poderia se comportar como partícula (fóton) ou onda (radiação). Para entendermos o efeito fotoelétrico, necessitamos considerar que a luz tem sua energia quantizada e “trocada” em quantidades unitárias, que chamamos de fótons, enquanto fenômenos como interferência e difração à luz são explicados apenas considerando que a luz se desloca na forma de ondas. A chamada dualidade onda-partícula era uma “dificuldade” que o próprio Einstein achava que seria superada através de uma teoria que unificasse esses dois conceitos. Por ser essa uma questão mais filosófica do que física, não existe até hoje unanimidade se as teorias quânticas modernas resolveram ou não o dilema. Entretanto, a *eletrodinâmica quântica*²⁹, desenvolvida por Richard Phillips Feynman (1918 – 1988) e outros na década de 1960, certamente é a teoria unificada da interação da luz com a matéria que Einstein havia imaginado. De modo genialmente original, Feynman coloca fótons e elétrons³⁰ no mesmo patamar de partículas e constrói um modelo de interação inovador que é usado hoje nos mais modernos estudos teóricos e experimentais no campo da física das partículas.

Mas, na época, independente das questões filosóficas, o fato era que a teoria explicava o experimental e, em termos práticos (e tecnológicos) isso era mais do que satisfatório.

Ao invés de amenizar o dilema, um *historiador* foi escolhido para colocar ainda mais lenha nessa fogueira. O cientista francês Louis de Broglie (1892 – 1987) era formado em História! Quando a Primeira Guerra estourou em 1914, de Broglie serviu como voluntário na área de telecomunicações. Como ele viria afirmar posteriormente, essa experiência despertou nele interesse nas áreas de Matemática e Física, especialmente na área de estrutura atômica. Além disso, seu irmão, Maurice, era físico, e eles discutiam muito sobre o assunto.

Entre 1922 e 1923 de Broglie escreveu diversos artigos e, em 1924, apresentou sua tese de doutoramento com uma ideia genial: se a *luz* possui comportamento dual por que a *matéria* não apresentaria também esse comportamento? Ou seja, será que a matéria também se comporta em

²⁹ Quantum ElectroDynamics é abreviada como QED fazendo uma alusão à frase em latim "quod erat demonstrandum" (como se queria demonstrar) presente nos mais famosos históricos tratados de Física e outras ciências.

³⁰ É provado experimentalmente que a QED se aplica também a outras partículas submicroscópicas como neutrinos, prótons, quarks, gluons e outras. Tudo indica que a QED se aplica a *TODAS* as partículas.

certos experimentos como uma onda? A ideia era tão inusitada que a universidade ficou em dúvida se aceitava ou não. A tese foi enviada a Einstein, que não hesitou em dar seu parecer positivo e o trabalho foi aceito.

Certamente não vemos por aí um feixe de partículas se comportando como onda. Se as ideias de de Broglie estavam corretas, elas deveriam ser percebidas a nível submicroscópico e, naturalmente, a partícula mais apropriada a ser estudada era o *elétron*. Mas, se o elétron era uma onda, qual seria seu comprimento de onda λ ? Baseado nas ideias de Einstein para o fóton, de Broglie partiu da hipótese de que os elétrons seriam *ondas estacionárias* com comprimento de onda:

$$\lambda = h/p$$

Onde h é a constante de Planck e p a quantidade de movimento do elétron³¹.

Sendo assim, o elétron pode ser interpretado como uma *onda de matéria* e pode sofrer reflexão, difração, interferência e polarização como qualquer outra onda.

As hipóteses de de Broglie foram confirmadas teoricamente no modelo atômico de Bohr, e três anos mais tarde, no experimento de *difração de elétrons*. Uma aplicação tecnológica direta é o *microscópio eletrônico*, que utiliza um feixe de elétrons (onda de matéria) para “enxergarmos” o que a luz não mostra. De Broglie viria a ser o primeiro (e talvez o único) cientista a ganhar o prêmio Nobel (1929) em uma tese de doutorado.

Princípio da Incerteza de Heisenberg

Em 1924, Niels Bohr era diretor do Instituto de Física de Copenhague, sua cidade natal. Em 1925, o jovem Werner Karl Heisenberg (1901-1976) foi trabalhar no grupo de Bohr, tornando-se professor assistente de Bohr, em 1927. Nesse período, Heisenberg desenvolveu a *Mecânica das Matrizes*, o formalismo matemático que faltava à teoria quântica. Decorrente desse formalismo, Heisenberg demonstrou, pela primeira vez, uma indeterminação intrínseca ao mundo quântico: o *princípio da incerteza*.

Para explicar qualitativamente o princípio da incerteza, Heisenberg elaborou um experimento mental. Ele propôs um microscópio para observar o movimento do elétron. Mas qual deveria ser o comprimento de onda da luz usada nesse microscópio?

³¹ Como a constante de Planck h é muito pequena, o comprimento de onda λ da matéria só pode ser observado se p for muito pequeno também, caso do elétron.

Você poderá visualizar uma figura com o experimento mental de Heisenberg em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Heisenberg%27s_Microscope_1.gif.

O raio de Bohr é da ordem de 10^{-12}m . A luz com comprimento de onda dessa ordem é a radiação gama. Muito bem, vamos usar a radiação gama para tirar uma série de fotos do elétron em sua órbita. Ocorre que a frequência ν é inversamente proporcional ao comprimento de onda λ ; conseqüentemente, a *energia* $h\nu$ da radiação gama é enorme. No instante em que a radiação gama interagir com o elétron vai arrancá-lo da órbita. Se tentarmos minimizar o problema usando uma radiação menos energética, a foto ficaria "fora de foco" devido à difração. Em resumo: para tirar uma foto da posição exata de um elétron, estragamos seu movimento. E se quisermos interagir o mínimo possível no movimento do elétron, a foto fica "fora de foco" e não sabemos a posição do elétron.

Você poderá visualizar uma figura do gráfico com a radiação gama em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Heisenberg_gamma_ray_microscope.svg. No microscópio de Heisenberg, a radiação gama é utilizada para "observar" o elétron. Mas ela é muito energética e interage com o elétron.

Bohr interpretou que a posição x e a quantidade de movimento p são grandezas *complementares* e demonstrou que a energia E e o tempo t também são.

Matematicamente, o princípio da incerteza é formulado da seguinte maneira:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

Devido ao princípio da incerteza, o conceito de *trajetória* em Mecânica Quântica perde o sentido. Ele é substituído pela *probabilidade* de encontrar a partícula em determinada região do espaço.

Schrödinger e modelo moderno para o átomo

As ideias de de Broglie sobre as *ondas de matéria* influenciaram o cientista austríaco Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887-1961). A mecânica das matrizes de Heisenberg era muito abstrata e totalmente nova. Schrödinger buscava um formalismo para a Mecânica Quântica semelhante ao já bastante conhecido aplicado às ondas mecânicas e eletromagnéticas. Em 1926, Schrödinger publicou

seu famoso artigo "A quantização como um problema de autovalores" no qual apresentou a equação de onda de matéria, mais conhecida como equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

A equação de Schrödinger³² está para Mecânica Quântica como a Segunda Lei de Newton ou as equações de Maxwell estão para a Física clássica. Assim como as leis de Newton explicam o movimento planetário, a equação de Schrödinger pode, teoricamente, solucionar qualquer problema não relativístico do mundo quântico³³, incluindo os átomos, moléculas e reações químicas.

O *modelo moderno do átomo* é simplesmente a solução da equação de Schrödinger para o problema de corpos (núcleo e elétrons) que interagem através de forças elétricas.

Os físicos teóricos utilizam a equação de Schrödinger para determinar a função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Para isso, deve ser inserido o operador H que é normalmente associado a uma situação clássica. No caso do átomo de hidrogênio, ele é considerado um elétron girando em torno de um próton e a interação de atração elétrica entre eles. O processo matemático é complexo, mas a lógica é simples: é feita a entrada de dados (H) na equação que, uma vez resolvida, fornece os resultados ($\Psi(\mathbf{r}, t)$).

Você poderá visualizar uma figura representando as coordenadas esféricas usadas na resolução da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio em <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/hydsch.html>.

Apresentaremos agora os *resultados* para o átomo de hidrogênio.

Em lugar das órbitas do átomo de Bohr, o modelo moderno insere o conceito de *orbital* que é a região do espaço *mais provável* de encontrar o elétron. Os números quânticos (n, l, m) do elétron determinam o orbital por ele ocupado e também seu nível de energia.

³² Não é objetivo desse texto explicar matematicamente a equação de Schrödinger, muito menos resolvê-la.

³³ Os métodos matemáticos para resolução da equação de Schrödinger não são dos mais simples. Ainda assim existem somente três situações em que a solução da equação de Schrödinger é exata: partícula livre, oscilador harmônico e átomo de hidrogênio. No restante dos casos, são usados métodos matemáticos de aproximações.

Os números quânticos somente podem assumir os seguintes valores:

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

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

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

Os números quânticos definem a geometria dos orbitais da seguinte forma:

$n \rightarrow$ a distância do orbital ao núcleo do átomo.

$l \rightarrow$ o formato do orbital.

$m \rightarrow$ a direção espacial do orbital.

Os valores do número quântico principal n são normalmente chamados de *camadas* e associados às letras K para $n=1$, L para $n=2$, M para $n=3$ e assim por diante.

Os valores do número quântico orbital l são normalmente chamados de *subníveis* e associados às letras:

$l = 1 \rightarrow s = \text{sharp}$

$l = 2 \rightarrow p = \text{principal}$

$l = 3 \rightarrow d = \text{diffuse}$

$l = 4 \rightarrow f = \text{fundamental}$

de 5 em diante, segue-se a ordem alfabética, $l = 5 \rightarrow g$; $l = 6 \rightarrow h$, e assim por diante.

Os orbitais são obtidos através das funções de onda Ψ e podem ser exibidos graficamente:



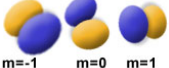


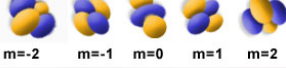

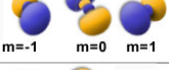
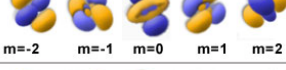
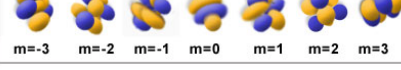




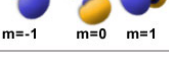

	s ($l=0$)	p ($l=1$)	d ($l=2$)	f ($l=3$)
n=1	 m=0			
n=2	 m=0	 m=-1 m=0 m=1		
n=3	 m=0	 m=-1 m=0 m=1	 m=-2 m=-1 m=0 m=1 m=2	
n=4	 m=0	 m=-1 m=0 m=1	 m=-2 m=-1 m=0 m=1 m=2	 m=-3 m=-2 m=-1 m=0 m=1 m=2 m=3
n=5	 m=0	 m=-1 m=0 m=1	 m=-2 m=-1 m=0 m=1 m=2	...
n=6	 m=0	 m=-1 m=0 m=1
n=7	 m=0

Figura 9: Ilustração dos orbitais do átomo de hidrogênio em função dos números quânticos.

O formalismo matemático trazido pela equação de Schrödinger à Mecânica Quântica foi a ferramenta usada pelos físicos, químicos e matemáticos teóricos para explicar com sucesso diversos experimentos. Por sua vez, os teóricos faziam previsões que os físicos e químicos experimentais buscariam demonstrar também com bastante sucesso.

Spin

Em 1896, o cientista alemão Pieter Zeeman (1865 – 1943) descobriu que, em certos experimentos de espectroscopia, a aplicação de um campo magnético à amostra causava o desdobramento do espectro de emissão. O chamado *efeito Zeeman* ocorre devido ao fato do elétron possuir *momento angular*, era perfeitamente explicado para o átomo de hidrogênio e (*antes* da equação Schrödinger) foi associado ao número quântico m . Entretanto, em outros átomos, ocorre o desdobramento em mais linhas do que o esperado, o que foi chamado de *efeito Zeeman anômalo*. Era como se os elétrons possuíssem um momento angular *a mais*. De onde viria esse *momento angular adicional*?

Você poderá visualizar uma figura com efeito do Zeeman normal e Zeeman anômalo em <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/hydsch.html>.
A imagem encontra-se no tópico "Anomalous" Zeeman Effect.

Antes do modelo moderno do átomo não havia um formalismo matemático através do qual os físicos teóricos poderiam se apoiar. A chamada Física Quântica *antiga* era uma Física clássica *adaptada* (modelos semiclássicos), muitas vezes com intuições e “chutes”. A descoberta do *spin do elétron*³⁴ ocorreu justamente nesse contexto.

Em 1925, os físicos alemães George Uhlenbeck (1900 – 1988) e Samuel Abraham Goudsmit (1902 – 1978) deduziram que a explicação do efeito Zeeman anômalo poderia vir do elétron girando em torno do seu próprio eixo. Ou seja, após muitos cálculos, Goudsmit e Uhlenbeck chegaram à conclusão que, assim como a Terra, os elétrons tinham, além do movimento de translação, o de rotação.

Eles escreveram um artigo sobre o spin do elétron, em 1926, e enviaram para apreciação dos seus professores Paul Ehrenfest (1880 – 1933) e Lorentz (1853 – 1928). Lorentz alertou para um erro fundamental: se o elétron girasse em torno do próprio eixo com as energias envolvidas, teria sua velocidade superior à da luz, o que é fisicamente impossível. Os jovens cientistas Goudsmit e Uhlenbeck correram para avisar Ehrenfest sobre o erro, mas já era tarde. O spin do elétron explicava tão perfeitamente o efeito Zeeman anômalo e outros dados experimentais que Ehrenfest já havia submetido o artigo para publicação. O artigo teve tanta repercussão que o próprio Heisenberg escreveu para a dupla de jovens cientistas apontando outras questões. Além disso, outros cientistas se interessaram pelo assunto, dentre eles o próprio Einstein.

Em 1927, o cientista austríaco Wolfgang Pauli (1900 – 1958) introduziu o spin e seu respectivo número quântico no formalismo moderno da Mecânica Quântica. O momento angular quântico total do elétron deveria ser composto do momento angular orbital e do momento angular de spin. Então, no modelo moderno do átomo, o estado quântico do elétron é definido por *quatro* (e não por apenas três) números quânticos, a saber:

nome	símbolo	significado do orbital	faixa de valores
número quântico principal	n	camada	1, 2, 3...
número quântico azimutal	ℓ	subnível	0, 1, 2, ..., $n - 1$
número quântico magnético	m_ℓ	deslocamento de energia	$-\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \ell - 1, \ell$
número quântico de spin	m_s	spin	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

³⁴ A história da descoberta do spin do elétron foi contada com muito bom humor por um de seus descobridores, S. A. Goudsmit, em 1971, numa palestra traduzida do alemão para o inglês por J.H. van der Waals. Disponível em <http://www.lorentz.leidenuniv.nl/history/spin/goudsmit.html>.

Note que o momento angular intrínseco (o spin) do elétron é quantizado e só pode haver dois valores para ele: $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$.

O spin somente foi deduzido teoricamente somente através do formalismo *relativístico* da Mecânica Quântica criado pelo cientista inglês Paul Dirac (1902 – 1984). Ficou provado que o spin não é o movimento de rotação do elétron em torno do seu eixo e sim um conceito completamente novo, que a Física clássica não tinha como explicar. O spin, também chamado de *momento angular intrínseco*, não é exclusividade do elétron. Praticamente todas as partículas quânticas possuem spin. As partículas chamadas *Férmions* possuem spin com valores fracionários, enquanto os *Bósons* possuem valores de spin inteiros. Dentre os principais férmions estão o elétron, próton e nêutron. O mais conhecido bóson é o fóton.

Você poderá visualizar uma figura com o movimento de precessão do momento magnético intrínseco em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Quantum_projection_of_S_onto_z_for_spin_half_particles.PNG.

A comprovação experimental do spin já havia ocorrido mesmo antes do formalismo moderno da Mecânica Quântica. Em 1922, os cientistas alemães Otto Stern (1888 – 1969) e Walter Gerlach (1889 – 1979) elaboraram um experimento no qual faziam passar um feixe de átomos de prata através de um campo magnético *não uniforme*³⁵. Na época, desejava-se investigar a quantização do momento angular.

Os resultados mostravam dois momentos angulares possíveis para os átomos em contraste com os infinitos valores previstos pela Física clássica. O experimento de Stern-Gerlach somente foi totalmente compreendido após a descoberta do spin e é usado como base para vários desenvolvimentos teóricos da Mecânica Quântica.

Você poderá visualizar uma figura com o experimento de Stern-Gerlach em http://en.wikipedia.org/wiki/File:Stern-Gerlach_experiment.PNG.

³⁵ O campo magnético uniforme somente desvia partículas com carga. O campo magnético não uniforme causa desvio também em átomos eletricamente neutros que possuam alguma estrutura de dipolo.

Princípio de exclusão de Pauli

“Dois corpos não podem ocupar o mesmo lugar no espaço”. Qual seria o equivalente quântico dessa expressão?

Wolfgang Pauli analisou diversos experimentos sobre a distribuição eletrônica nos átomos e em 1925 descobriu que os complexos resultados poderiam ser explicados através de uma regra simples:

“Dois elétrons não podem possuir o mesmo estado quântico em um átomo”. Esse é o princípio de exclusão de Pauli.

Isso significa que, em um átomo, cada conjunto de números quânticos (n, l, m_l, m_s) corresponde a apenas um elétron.

O princípio de exclusão de Pauli não se restringe aos elétrons, é uma propriedade de todos os férmions. E mais, eles não precisam estar em átomos. O princípio de exclusão gera um tipo de “força de repulsão” entre os férmions, já que eles não podem ocupar o mesmo estado. Se você está sentado em uma cadeira lendo esse texto é por causa do princípio de exclusão de Pauli. Caso ele não existisse, seu corpo atravessaria a cadeira! Isso mesmo, a repulsão elétrica entre os elétrons não é suficiente para causar a chamada *força normal*, que é a interação de contato entre os objetos, no caso entre a cadeira e os seus glúteos. O fato de prótons, nêutrons e elétrons estarem sujeitos ao princípio de exclusão de Pauli é fundamental para a explicação de diversos fenômenos químicos e físicos como, por exemplo, as estrelas de nêutrons e anãs brancas e as ligações iônicas e covalentes.

O princípio de exclusão de Pauli é derivado teoricamente da *teoria relativística quântica de campos*.

O princípio de exclusão de Pauli não se aplica aos bósons.

Configuração eletrônica dos átomos

Como os elétrons se distribuem nos átomos? De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, em um átomo, dois elétrons não podem possuir o mesmo estado quântico. Mas o que determina *quais* estados quânticos eles vão ocupar, ou seja, como deve ser a *configuração eletrônica* de um átomo?

Antes de responder essa pergunta, vamos falar um pouco sobre outro princípio que não se aplica apenas ao mundo quântico, mas a *toda* a Física. É o *princípio da energia mínima*. Por algum motivo, as coisas no universo ficam estáveis ao atingir o menor nível de energia possível. Por isso os corpos caem, as pilhas geram corrente elétrica, a Terra gira em torno do Sol e muitos outros fenômenos acontecem. A natureza sempre busca o estado de menor energia possível.

O princípio da energia mínima garante que o átomo atinge sua estabilidade quando está no chamado *estado fundamental* que é o estado de energia mínima. Então, a configuração eletrônica de um átomo no estado fundamental deve ser tal que minimize a sua energia.

Cada estado quântico possui seu nível de energia que, para o átomo de Bohr, é simples, só depende do valor do número quântico n . Se todos os átomos seguissem essa lógica, seria muito fácil determinar a configuração eletrônica, bastava colocar *dois* elétrons em cada *camada* em sequência crescente do número quântico n . Assim, por exemplo, o sódio que possui 11 elétrons, teria a seguinte configuração eletrônica:

Configuração eletrônica do Na no modelo de Bohr.

n	Spin para cima	Spin para baixo
1	↑	↓
2	↑	↓
3	↑	↓
4	↑	↓
5	↑	↓
6	↑	

Entretanto, no modelo moderno do átomo, o estado quântico do elétron depende de *quatro* números quânticos. Como saber a *sequência energética* desses estados? É claro que a equação de Schrödinger nos fornece essa resposta e poderíamos apresentar aqui esses resultados em termos de quadras ordenadas (n, l, m_l, m_s) em ordem de energia. Acontece que resolver a equação de Schrödinger para átomos com mais de um elétron não é das tarefas mais fáceis e, além disso, os químicos descobriram regras relativamente simples para compor a configuração eletrônica da maioria dos átomos.

A tabela abaixo é um passo nesse sentido e apresenta a sequência energética do elétron em função do nível (definidos pelo número quântico n) e subnível (definido pelo número quântico l) que ele ocupa. Um exercício: consulte a tabela para completar a seguinte ordem energética: 1s, 2s, 2p, 3s...

$n \setminus l$	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>
1	1				
2	2	3			
3	4	5	7		
4	6	8	10	13	
5	9	11	14	17	21
6	12	15	18	22	26
7	16	19	23	27	31
8	20	24	28	32	36

A fim de exibir de forma sucinta a configuração eletrônica de um átomo, criou-se a seguinte notação para os estados ocupados pelos elétrons:

$$X \text{ tipo}^y$$

Onde: X é o valor de n , tipo é uma das letras associadas à l (s, p, d, f) e y é o número de elétrons que ocupam o subnível.

A tabela abaixo mostra os valores *máximo* de y que são determinados pelos números quânticos m_l e m_s :

Subnível	Número de orbitais	Máximo número de elétrons
<i>s</i>	1	2
<i>p</i>	3	6
<i>d</i>	5	10
<i>f</i>	7	14

Abaixo, exemplos de uso das tabelas apresentadas para exibir a configuração eletrônica de alguns átomos.

Átomo	Número de elétrons nos átomos	Configuração eletrônica
He	2	$1s^2$
Li	3	$1s^2 2s^1$
Be	4	$1s^2 2s^2$
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Uma maneira mais prática de preencher os subníveis eletrônicos na ordem energética é utilizar o chamado diagrama de Pauling. A sequência a ser preenchida é dada pelas setas. Exercício: refaça a tabela acima usando o diagrama de Pauling³⁶.

Você poderá visualizar uma figura com o Diagrama de Pauling em <http://www.fordhamprep.org/gcurran/sho/sho/lessons/lesson36.htm>. A imagem encontra-se no tópico Order of Filling Sublevels with Electrons.

A chamada *Regra de Hund* completa nosso conjunto. Ela se aplica aos subníveis *incompletos*. Um orbital de determinado subnível só é preenchido totalmente com 2 elétrons (de spins contrários) depois que todos os orbitais daquele subnível estiverem com pelo menos 1 elétron. Veja os exemplos:

³⁶ Não há referência na literatura estrangeira relacionando Linus Pauling ao diagrama da Figura 52. Entretanto, é hábito no Brasil chamá-lo de diagrama de Pauling.

Elemento	n=1	n=2			
	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
H ₁	↑				
He ₂	↓↑				
Li ₃	↓↑	↑			
Be ₄	↓↑	↓↑			
B ₅	↓↑	↓↑	↑		
C ₆	↓↑	↓↑	↑	↑	
N ₇	↓↑	↓↑	↑	↑	↑
O ₈	↓↑	↓↑	↓↑	↑	↑
F ₉	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↑
Ne ₁₀	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑

Os *gases nobres* apresentam uma configuração eletrônica tal que *todos* os seus subníveis ficam completos, o que os confere uma grande estabilidade química.

As regras acima apresentadas não funcionam para alguns átomos mais pesados onde as interações elétron-elétron e efeitos relativísticos devem ser considerados. Entretanto, o princípio de exclusão de Pauli e o princípio da mínima energia são sempre válidos.

Espectros atômicos e evolução do universo

Nas seções anteriores, discutimos a estrutura do átomo. Mas de onde vieram os átomos? Como eles foram formados?

Você já notou que o som dos carros de Fórmula 1 se altera quando se aproxima e quando se afasta? O mesmo acontece com o som da sirene de uma ambulância. O som é mais agudo quando o carro se aproxima e mais grave quando se afasta. Esse é o chamado *efeito Doppler* e é um fenômeno inerente às ondas. Com a luz não é diferente. Se uma fonte de luz se aproxima ou se afasta de um observador, a cor muda. Só que para observar o efeito Doppler da luz, a fonte deverá estar se movimentando a uma velocidade altíssima, próxima à velocidade da luz.

Em 1929, o astrônomo Edwin Powell Hubble (1889 – 1953), ao observar o espectro eletromagnético de estrelas distantes notou um desvio das riscas com relação ao espectro de estrelas mais próximas. Hubble descobriu que as galáxias estão se afastando umas das outras a uma velocidade proporcional à distância entre elas. Hubble descobriu experimentalmente que o universo está se *expandindo*.

Com base nessa descoberta, o cientista russo George Gamow formulou a seguinte pergunta: se o universo está se expandindo, o que aconteceria se voltássemos no tempo? O universo diminuiria gradativamente até chegar a... um *ponto*. Essa é a ideia primordial da teoria do Big Bang da origem do universo, que Gamow publicou em um artigo com o sugestivo título “A origem dos elementos químicos”.

De acordo com a Teoria da Relatividade de Einstein, matéria e energia são equivalentes e a famosa equação $E = m.c^2$ é a expressão matemática dessa equivalência. No início dos tempos, o espaço ocupado pelo universo era tão pequeno que *tudo* era energia. À medida que o universo foi se expandindo, a energia foi se *condensando*, formando a matéria na forma de partículas elementares. Só depois de muito tempo as partículas elementares formaram o primeiro e mais simples dos átomos, o hidrogênio; em seguida, veio o helio e assim sucessivamente. O que Gamow explicou com sucesso foi por que 99% da matéria de todo universo é formada por hidrogênio e helio.

A identidade do átomo

Vamos voltar agora a uma questão que ficou pendente: a explicação teórica da identidade do elemento químico estar relacionada ao número atômico Z.

A primeira questão é: *o que* são as propriedades físicas e químicas dos elementos químicos?

As propriedades químicas influenciam nas reações químicas e as propriedades físicas são geralmente grandezas macroscópicas. Você é capaz de identificar em nosso modelo qual ou quais as partículas subatômicas que são responsáveis pela diferença dessas propriedades de elemento para elemento químico?

Os processos físicos e químicos são consequência da interação entre os *elétrons* dos átomos. Apenas eles participam das reações químicas e das transformações físicas. Os núcleos são exatamente os mesmos antes e depois desses processos. Os elétrons é que são trocados, compartilhados, mudam de nível energético, enfim, eles são os *atores* dos processos.

Mas o que determina *como* os elétrons irão agir? Uma pedra cai mais rápido na Terra do que na Lua. É a pedra que cai (ator), mas é o campo gravitacional gerado pela Terra ou pela Lua que vai reger o movimento dela. Da mesma forma, o *Campo Elétrico* dos núcleos dos átomos é que vai reger o comportamento dos elétrons durante os processos físicos e químicos. O campo elétrico do núcleo é totalmente definido pela sua carga elétrica, ou seja, pelo número de prótons que ele possui.

Apesar de não participar dos processos químicos, é o núcleo que determina como os elétrons irão se distribuir nos átomos e, conseqüentemente, como eles irão interagir.

Por isso, o número Z é considerado a identidade de um elemento químico.

Tecnologias para “enxergar” o átomo

O entendimento moderno da Mecânica Quântica possibilitou uma evolução tecnológica impressionante no campo da microscopia. Ficava claro que era necessário utilizar efeitos quânticos para observar o mundo submicroscópico.

O *efeito de tunelamento* é um fenômeno quântico no qual uma partícula consegue atravessar uma barreira de potencial maior do que sua energia cinética. Isso é completamente inviável no mundo macroscópico, mas ocorre a nível submicroscópico. O *microscópio de tunelamento* inventado em 1981 pelos cientistas Heinrich Rohrer and Gerd Binnig faz um minucioso escaneamento da superfície dos materiais, átomo a átomo, traçando o mapa atômico da superfície através do tunelamento de elétrons entre a ponta do microscópio e a superfície da amostra. Rohrer e Binnig foram laureados com o prêmio Nobel em 1986 pela descoberta.

Você poderá visualizar uma figura com o esquema de funcionamento do microscópio de tunelamento em

http://en.wikipedia.org/wiki/File:ScanningTunnelingMicroscope_schematic.png.

O tunelamento é um efeito quântico que é utilizado para investigar efeitos nessa escala.

Você poderá visualizar uma figura com o microscópio de tunelamento em

<http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/atomo.html>.

É possível não apenas observar os átomos, mas também interagir com eles, mudando-os de posição. A IBM escreveu seu logo com... átomos!

Considerações finais

Ao longo do tempo, o homem investigou a origem e a estrutura do mundo que nos rodeia. Foi um longo caminho trilhado que explicou a estrutura da matéria de diversas formas, dentre elas, pela filosófica, religião, alquimia e pelo método científico. Estudamos em detalhes os modelos atômicos. Vimos como os trabalhos de cientistas (e até de não cientistas) em uma determinada época influenciaram os trabalhos da geração seguinte num processo contínuo de construção do conhecimento. Se um modelo mostrava limitações, não se jogava fora o que foi construído; o estudo das limitações e a luta para superá-las levava, via de regra, a um modelo novo, também com limitações.

Hoje o modelo mais aceito para a estrutura da matéria é o quântico. Através das leis peculiares da Física Quântica o muito pequeno pode ser explicado, proporcionando à Química moderna fortes alicerces, tanto para compreender os fenômenos químicos quanto para fazer previsões. Mas a Química não abandonou todo conhecimento construído ao longo dos séculos, mantém e usa diversas leis desenvolvidas antes da Mecânica Quântica ser descoberta. Através da compreensão do mundo quântico, o homem pode responder a perguntas tão simples como “por que a água é transparente?” e tão complexas quanto “qual o motivo dos mecanismo das ligações e reações químicas?”.

Depois de tanto tempo, será que já podemos responder à pergunta “do que é composto o mundo que nos rodeia?”. Temos que admitir que a resposta ainda é “não”. Quanto mais investigamos, mais surgem indagações provenientes de experimentos ou de inconsistências teóricas. Ainda bem! Afinal, o que mais motiva e gratifica o homem não é o conhecimento em si mas sim a sua busca.