✯ Notas de Aulas - Paulo Moscom

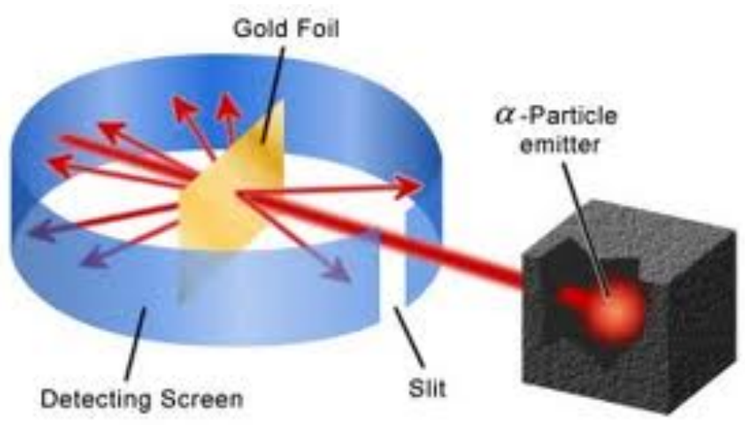
Obs Estas notas estarão em uma forma condensada (resumida) pois têm como propósito de apoio dinâmico às aulas, não tendo compromisso com aspectos didáticos.

Estrutura atômica

O átomo de Rutherford:

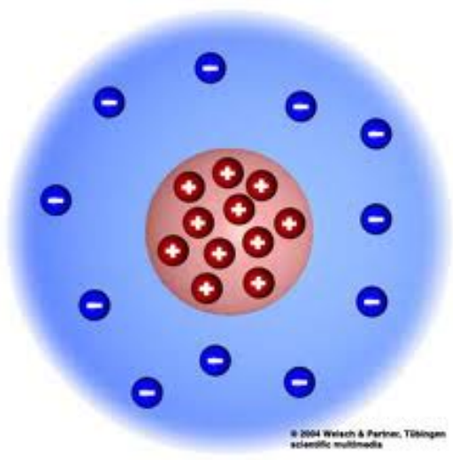
✯ O experimento

Partículas α (→ um agrupamento de 2 prótons + 2 meutrons.) obtidas por decaimento de átomos radioativos são direcionadas a colidirem na forma de um feixe, sobre uma folha fina de ouro.

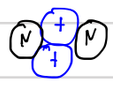


Resultado:

A matéria é composta por átomos, os quais possuem um núcleo "pesado" carregado positivamente, circundado por partículas leves, dispostas esfericamente simetricas ao redor do núcleo.



O que o levou a essa comclusão?

Partículas-α são eletricamente carregadas  ⇒ dois protons + 2 meutrons.

Rutherford observou, posicionamdo uma fita fotosemcivel ao redor da folha de ouro, que parte das particulas atravessavam a folha e parte rebatia de volta. Observava tambem que elas sofriam desvios somente após "pemetravem" na folha de ouro.

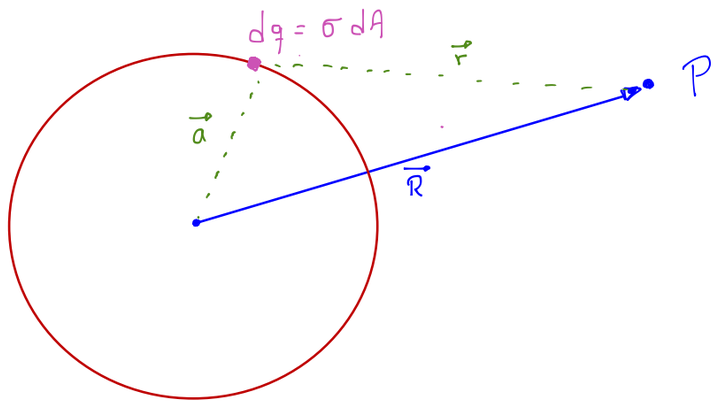
Como já era conhecido (o que pode ser "facilmente" mostrado matematicamente) que o campo elétrico de uma casca esférica carregada elétricamente é:

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{Q}{R^2}\hat{r}$$, na região fora da casca.

e $\vec{E} = \overrightarrow{zero}$ na região interna à casca.

Demomstrações: Obs: Estas demomstrações podem ser igmoradas pelo leitor, ficamdo apemas como forma de comvemcimemto aos mais questiomadores, que é assim mesmo:

Mostra que $\vec{E} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 R^2}\hat{r}$, em um ponto qualquer do espaco, sendo R a distâmcia do pomto P omde queremos obter o campo $\vec{E}$ e o centro da distribuição de carga esfericamente simétrica em tormo do centro, comstituimdo uma casca com carga Q uniformemente distribuída.

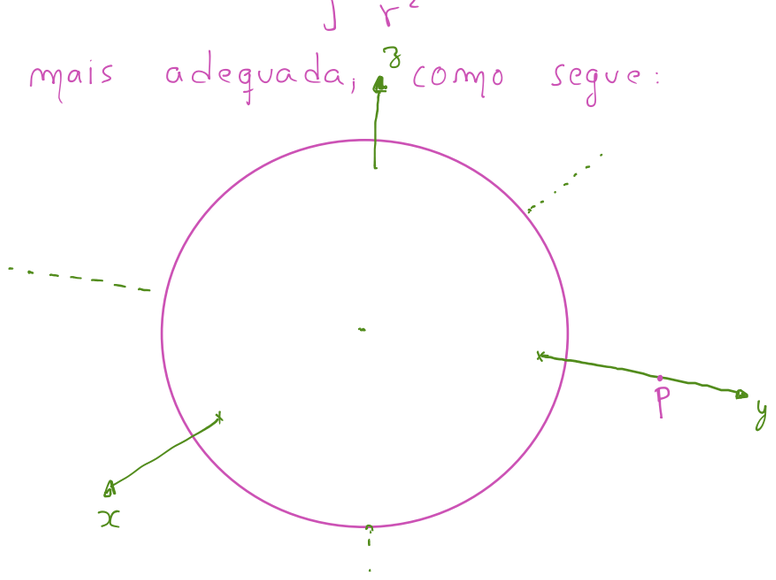


⇒ No pomto P o campo elétrico $d\vec{E}$ devido à carga dq é dado por:

$$\vec{dE} = \frac{k\,dq}{r^2}\hat{r}$$ "omde $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ ⇒ uma comstamte

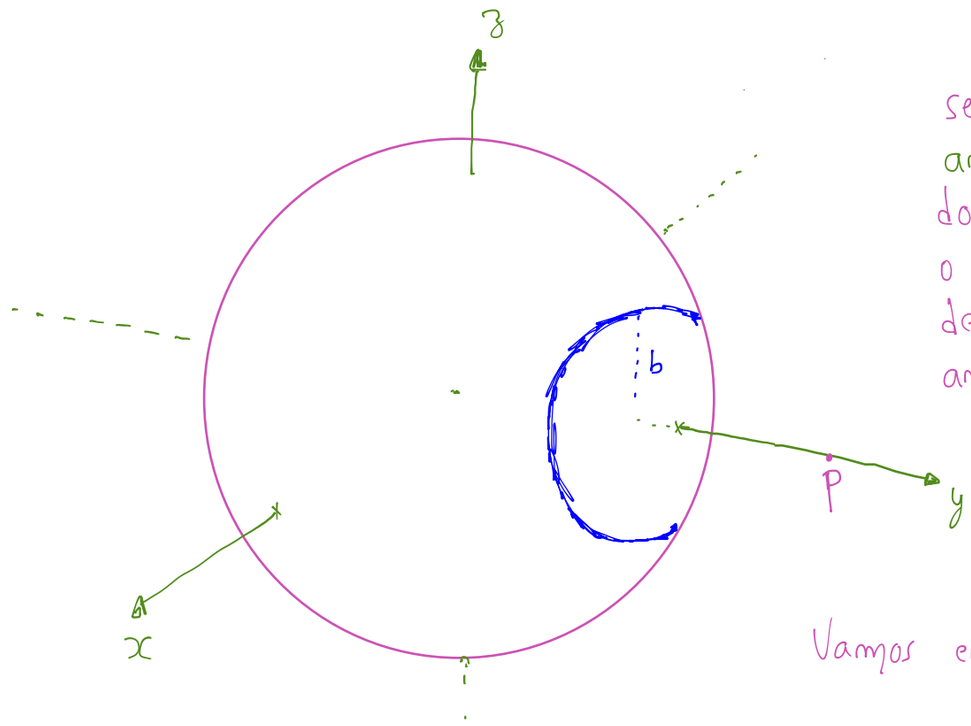
$$\vec{E} = \int d\vec{E}$$, omde o símbolo integral represemta uma soma que deve ser realizada sobre todas as comtribuições de cada elemento de área sobre a casca.

⇒ $\vec{E} = k\int \frac{dq}{r^2}\hat{r}$ A simetria esférica nos permite situar o pomto P de uma forma visualmemmais adequada, como segue:



Note que o pomto P foi colocado sobre o eixo y.

Desta forma, inserimdo os vetores que limcam o pomto P a um dq qualquer sobre a esfera temos



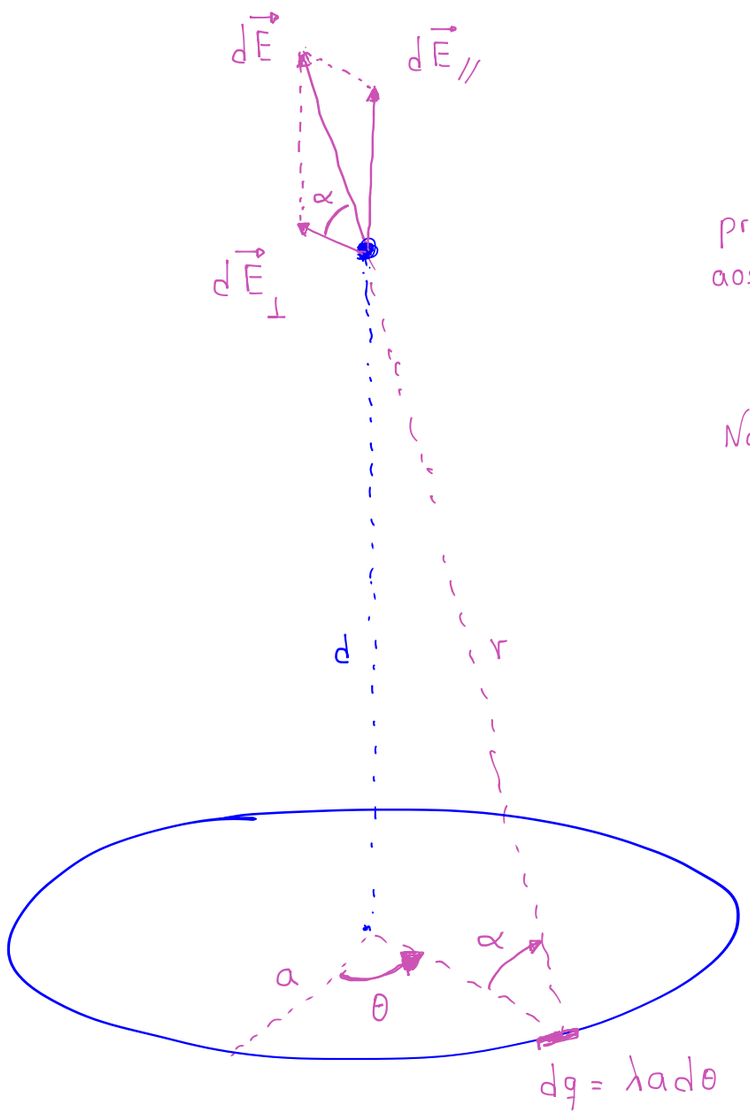
Comsideremo então um amel na simeria mostrada no desemho ao lado "tal que o eixo y passe pelo centro do amel". Note que vetorialmente as compomentes z e x do campo elétrico se amulam, pois dq.s opostos sobre o amel produzem compomentes para $d\vec{E}$ que são oportas e de mesma intemsidade. Semto isto verdade para qualquer amel que compõe a casca podemos concluir que o campo elétrico no pomto P terá apemas compomente y.

Vamos então proceder da seguinte forma:

1) Vamos calcular o campo elétrico a uma distâmcia $d = y_0 - y$ do centro de um amel qualquer.

2) Então somamos as contribuições de todos os ameis que compõem a esfera, levamdo em consideração o fato de haver uma relação entre y (o centro de um amel) e o raio b do referido amel

O campo elétrico a uma distância d acima do centro de um anel carregado, como ilustrado abaixo.



Como comentado na página anterior ⇒ os dl's opostos produzem $d\vec{E}_\perp$ também opostos, em sentido, tal que se cancelam aos pares. Desta forma, basta integrarmos sobre as contribuições $d\vec{E}_{//}$.

Note que $|d\vec{E}_{//}| = |d\vec{E}|\,\text{sen}(\alpha)$

$$\Rightarrow \quad dE_{//} = dE\,\text{sen}(\alpha)$$

$$\text{mas} \quad dE = \frac{k\,dq}{r^2} \qquad \text{e} \qquad \text{sen}(\alpha) = \frac{d}{(a^2+d^2)^{1/2}}$$

obs: $\rightarrow \quad k = \dfrac{1}{4\pi\epsilon_0}$

$$dE_{//} = \frac{k\lambda a\,d\theta}{(a^2+d^2)} \cdot \frac{d}{(a^2+d^2)^{1/2}}$$

$$dE_{//} = \frac{k\lambda a\,d\,d\theta}{(a^2+d^2)^{3/2}}$$

Assumindo y como a direção vertical $\Rightarrow$ $d\vec{E}_{//} = \dfrac{k\lambda a\,d}{(a^2+d^2)^{3/2}}\,d\theta\,\hat{j}$

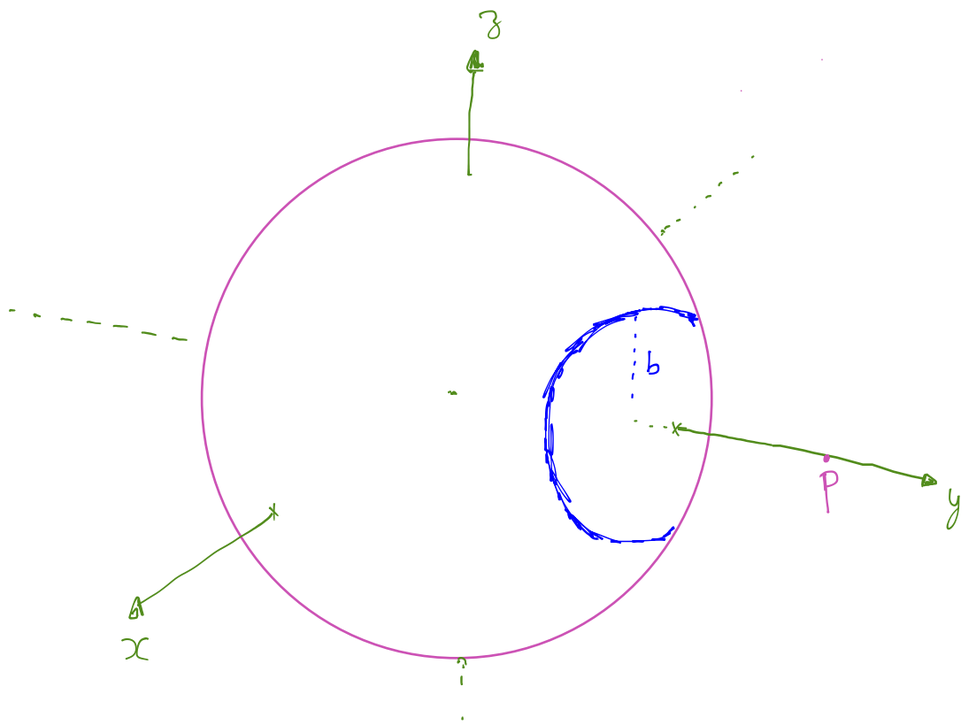
$$\Rightarrow \quad \vec{E} = \int d\vec{E}_{//} = \int_0^{2\pi} \frac{k\lambda a\,d}{(a^2+d^2)^{3/2}}\,d\theta\,\hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{k\lambda a d \cdot 2\pi}{(a^2+d^2)^{3/2}}\,\hat{j} \quad , \text{ retornando a constante } k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

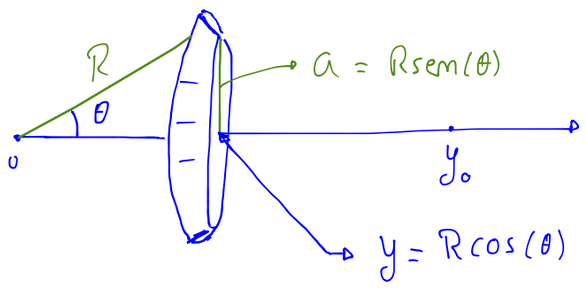
$$\vec{E} = \frac{2\pi k\lambda a d}{(a^2+d^2)^{3/2}}\,\hat{j}$$

Voltando ao foco: O objetivo é calcular o campo de um anel, levar a forma obtida para um anel que compõe a esfera e integrar (somar) todas as contribuições de todos os anéis.

Para o caso da esfera temos



Note tambem que a densidade linea deve ser 'remanejada para uma densidade superficial σ" ⟹ um anel sobre a esfera possui a forma:



Temos, para um anel que: $\vec{E} = \frac{2\pi k \lambda a d}{(a^2+d^2)^{3/2}}\hat{j}$, sendo λ uma densidade linear de carga.

A fim de transformarmos $\vec{E}$ para um $d\vec{E}$ associado com um anel do tipo ilustrado na Figura acima procedemos como segue:

Note que $\lambda . 2\pi a = dq$ = carga sobre o anel

$d\vec{E} = \frac{k\,dq\,d}{(a^2+d^2)^{3/2}}\hat{j}$

Sendo dq a carga sobre o anel.

$\Rightarrow dq = \sigma dA$, onde dA = área superficial do anel

$\rightarrow dA = R\,d\theta . 2\pi a$

$dA = R\,d\theta\, 2\pi R\,sen(\theta)$

$dA = 2\pi R^2 sen(\theta)\, d\theta$

$dq = \sigma dA = \sigma\, 2\pi R^2 sen(\theta) d\theta$

$\Rightarrow d\vec{E} = \frac{2\pi k \sigma R^2 sen(\theta).(y_0 - R\cos(\theta)).d\theta}{\left[R^2 sen^2(\theta) + (y_0 - R\cos(\theta))^2\right]^{3/2}}\hat{j}$

Obs: Aqui usamos as identidades

$a = R\,sen(\theta)$

$d = y_0 - R\cos(\theta)$

→ Obtidas comparando o desenho acima com a solução anterior do anel carregado.

O que temos de fazer agora é somar as contribuições de todos os anéis

$$\vec{E} = \int_0^{\pi} \frac{2\pi k \sigma R^2 sen(\theta)\,(y_0 - R\cos(\theta))}{\left[R^2 sen^2(\theta) + (y_0 - R\cos(\theta))^2\right]^{3/2}} d\theta\,\hat{j}$$

Obs: Abrindo o denominador temos: $R^2 sen^2(\theta) + y_0^2 - 2y_0 R\cos(\theta) + R^2\cos^2(\theta) = R^2 + y_0^2 - 2y_0 R\cos(\theta)$

$$\vec{E} = \int_0^{\pi} \frac{2\pi k \sigma R^2 sen(\theta)\,[y_0 - R\cos(\theta)]}{\left[R^2 + y_0^2 - 2y_0 R\cos(\theta)\right]^{3/2}} d\theta\,\hat{j}$$

Solução:

Resolvendo a integral

$$\vec{E} = \int_0^{\pi} \frac{2\pi K\sigma R^2 \operatorname{sen}(\theta)\,[y_0 - R\cos(\theta)]}{[R^2 + y_0^2 - 2y_0 R\cos(\theta)]^{3/2}}\, d\theta\ \hat{j}$$

Solução:

$t = -2y_0 R\cos(\theta) \quad \Rightarrow \quad dt = 2y_0 R\operatorname{sen}(\theta)\, d\theta$

e o integrando fica:

$$\frac{\sigma 2\pi K R\left[y_0 + \frac{t}{2y_0}\right]\cdot dt}{2y_0\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}} = \frac{\sigma\pi K R\left[2y_0^2 + t\right]\cdot dt}{2y_0^2\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}}$$

$$\Rightarrow \vec{E} = \frac{\sigma\pi K R}{2y_0^2}\cdot\int_0^{\pi} \frac{\left[2y_0^2 + t\right]}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}}\cdot dt\ \hat{j}$$

* Uma divisão de polinômios. Em geral funciona abrir em uma soma cujo MMC seja o do integrando acima. "Por tentativa"

$$\frac{\quad}{\quad} + \frac{\quad}{\quad} = \frac{2y_0^2 + t}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}}$$

tentativa:

$$\frac{X}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}} + \frac{Y}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{1/2}} = \frac{2y_0^2 + t}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}}$$

"Estes expoentes ($3/2$ e $1/2$) são tais que os numeradores tornam-se uma soma direta sem expoentes"

$$\Rightarrow \quad X + \left(R^2 + y_0^2 + t\right)\cdot Y = 2y_0^2 + t$$

$$X + YR^2 + Yy_0^2 + Yt = 2y_0^2 + t$$

$$\Rightarrow \quad Y\cdot t = t \qquad (1)$$

$$e \quad X + YR^2 + Yy_0^2 = 2y_0^2 \qquad (2)$$

$\Rightarrow$ de (1) temos $Y = 1$

em (2) temos $X + R^2 + y_0^2 = 2y_0^2$

$$X = y_0^2 - R^2$$

Assim:

$$\vec{E} = \frac{\sigma\pi K R}{2y_0^2}\int_0^{\pi}\left\{\frac{y_0^2 - R^2}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}} + \frac{1}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{1/2}}\right\} dt\ \hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{2 y_0^2} \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \frac{y_0^2 - R^2}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{3/2}} + \frac{1}{\left[R^2 + y_0^2 + t\right]^{1/2}} \right\} dt \; \hat{j}$$

$$\left.\begin{array}{l} u = R^2 + y_0^2 + t \\ du = dt \end{array}\right\} \vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{2 y_0^2} \int_{u_i}^{u_f} \left\{ \frac{y_0^2 - R^2}{u^{3/2}} + \frac{1}{u^{1/2}} \right\} du \; \hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{2 y_0^2} \left[-\frac{2 (y_0^2 - R^2)}{\sqrt{u}} + 2\sqrt{u} \right]_{u_i}^{u_f} \hat{j}$$

Voltando com u

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{y_0^2} \left[\frac{(R^2 - y_0^2)}{(R^2 + y_0^2 + t)^{1/2}} + (R^2 + y_0^2 + t)^{1/2} \right]_{t_i}^{t_f} \hat{j}$$

Obs: Para $\theta = 0 \Rightarrow t_i = -2 y_0 R$

Para $\theta = \pi \Rightarrow t_f = 2 y_0 R$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{y_0^2} \left[\frac{(R^2 - y_0^2)}{(R^2 + y_0^2 + t)^{1/2}} + (R^2 + y_0^2 + t)^{1/2} \right]_{-2 y_0 R}^{2 y_0 R} \hat{j}$$

$$\Rightarrow \vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{y_0^2} \left\{ \frac{R^2 - y_0^2}{\sqrt{R^2 + y_0^2 + 2 y_0 R}} - \frac{R^2 - y_0^2}{\sqrt{R^2 + y_0^2 - 2 y_0 R}} + \sqrt{R^2 + y_0^2 + 2 y_0 R} - \sqrt{R^2 + y_0^2 - 2 y_0 R} \right\} \hat{j}$$

Note que: $\sqrt{R^2 + 2 y_0 R + y_0^2} = \sqrt{(R + y_0)^2} = |R + y_0|$; como tanto R quanto y_0 são positivos podemos escrever $(R + y_0)$

também: $\sqrt{R^2 - 2 y_0 R + y_0^2} = \sqrt{(R - y_0)^2} = |R - y_0|$; neste caso, como existe uma subtração

$\Rightarrow$ devemos usar $(R - y_0)$ quando $y_0 < R$

e devemos usar $(y_0 - R)$ quando $y_0 > R$ pois assim garantimos sempre um valor positivo.

Simplificando: $\Rightarrow$ Vamos usar também a identidade $a^2 - b^2 = (a + b)(a - b)$

Para $y_0 < R$ "Região interna à carca".

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{y_0^2} \left\{ \frac{(R + y_0)(R - y_0)}{(R + y_0)} - \frac{(R + y_0)(R - y_0)}{(R - y_0)} + (R + y_0) - (R - y_0) \right\} \hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{y_0^2} \left\{ R - y_0 - R - y_0 + R + y_0 - R + y_0 \right\} \hat{j} \quad \Rightarrow \vec{E} = \frac{\sigma \pi K R}{y_0^2} \left\{ 2R - 2R + 2 y_0 - 2 y_0 \right\} \hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi k R}{y_0^2} \left\{ 2R - 2R + 2y_0 - 2y_0 \right\} \hat{j}$$

Portanto: se $y_0 < R \Rightarrow$ $\boxed{\vec{E} = \overrightarrow{\text{zero}}}$, significa que a casca não produz campo elétrico em sua região interna.

Para o caso $y_0 > R$ temos:

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi k R}{y_0^2} \left\{ \frac{(R+y_0)\cdot(R-y_0)}{(R+y_0)} - \frac{(R+y_0)\cdot(R-y_0)^{(-1)}}{(y_0-R)} + (R+y_0) - (y_0-R) \right\} \hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi k R}{y_0^2} \cdot \left\{ R - y_0 + R + y_0 + R + y_0 - y_0 + R \right\} \hat{j}$$

$$\vec{E} = \frac{\sigma \pi k R}{y_0^2} \cdot 4R \cdot \hat{j}$$

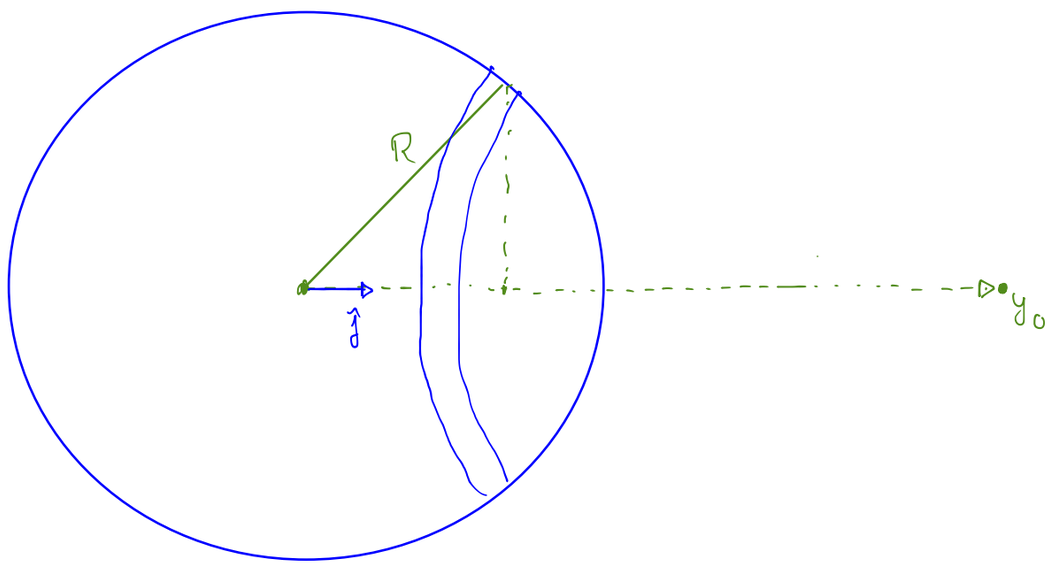
$$\vec{E} = \frac{k \sigma \cdot 4\pi R^2}{y_0^2} \hat{j}$$

Mas $\sigma \cdot 4\pi R^2$ é a carga total armazenada na casca esférica; Portanto:

$$\boxed{\vec{E} = \frac{kQ}{y_0^2} \hat{j}}$$

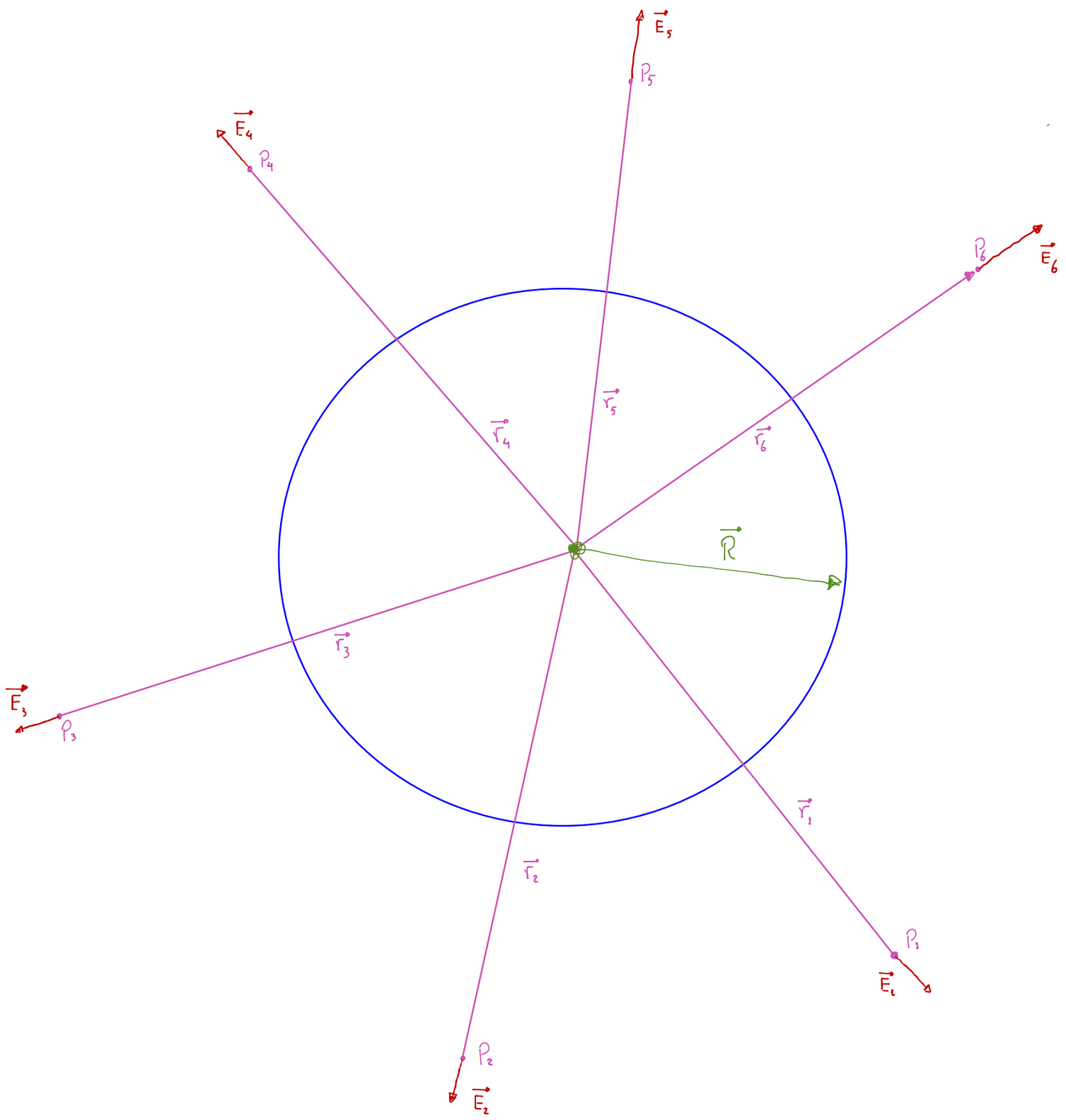
Análise final:

Estamos usando a situação ilustrada abaixo:



Onde calculamos o campo elétrico sobre o eixo y a uma distância y_0 do centro de uma casca esférica, de raio R, uniformemente carregada.

Note que como se trata de uma esfera, não há motivos para que o campo elétrico em qualquer outro ponto distanciado de y_0 do centro seja diferente do obtido acima com a ressalva de que o sentido estará apontando radialmente para fora, como ilustramos a seguir:



Para os pontos que estão a uma mesma distância $\underline{r}$ do centro $\Rightarrow$ o campo elétrico terá módulo

$$E = \frac{KQ}{r^2}$$

E terá sentido radial;

$$\left[\vec{E} = \frac{KQ}{r^2}\,\hat{r} \quad , \text{ se } \quad r > R\,.\right]$$

FIM

Voltemos à motivação original que nos motivou à analizarmos o campo elétrico devido a uma distribuição esférica de carga.

⟹ A sugestão de Rutherford para a disposição geométrica dos átomos.

Em resumo, Rutherfor observou que as particulas-α não sofriam desvio até pemetrarem na folha de ouro.
↳ Disto concluiu que os átomos são neutros eletricamente (não produzem campo elétrico na região externa).

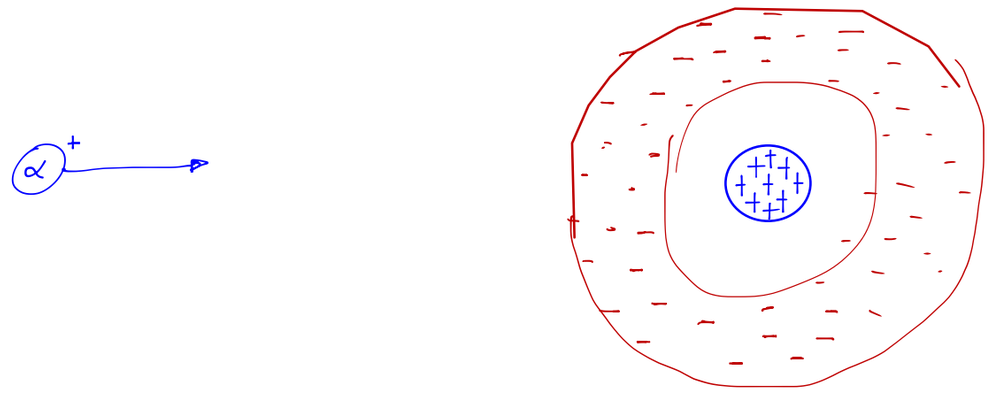
Adicionalmente, as cargas positivas são desviadas após pemetrarem na folha (equivalentemente nos átomos!), tal que parte das particulas atravessam a folha e parte bate e volta.

- atravessam a folha: Este é o indício de que existem espaços vazios nas regiões interatômicas.
- bate e volta: Como Part-α são positivas este é um indicio de interação com região fortemente ligada (massiva) e tambeim carregada positivamente.

Mas como explicar a ausência de campo elétrica na região externa ao átomos e a existência de campo devido a uma fonte carregada positivamente?

Resposta: Como vimos, uma distribuição esférica e oca de cargas produz campo elétrica na região externa como se toda sua carga estivesse concentrado no centro da esfera ⟷ tambeim ocorre que o campo na região interna é nulo.

Desta forma Rutherford sugere a seguinte configuração para o átomo:



"Ele pensou": Como não existe campo na região externa ⇒ $Q^+ + Q^- = zero$ ⇒ Não há carga liquida, logo a quantidade de carga positiva é igual, em módulo, à quantidade de carga negativa.

Como vimos $\vec{E}^+ = \frac{KQ}{r^2}\hat{r}$ e $\vec{E}^- = -\frac{KQ}{r^2}\hat{r}$

$\Rightarrow \vec{E}_{total} = \vec{E}^+ + \vec{E}^- = \left(\frac{KQ}{r^2} - \frac{KQ}{r^2}\right)\hat{r} = \vec{zero}$, tal que α^+ não é desviada quando está na região externa.

Noentanto, ao pemetrar no átomo ⟹ na região interna à carsa negativamente carregada α^+ não sente o campo da casca negativa pois $\vec{E}^{(-)} = \vec{zero}$ na região oca.

Mas nesta regiã passa a sentir o campo do núcleo que trata-se de uma distribuição esferica de carga com raio menor que o da posição da partícula α^+. Assim α^+ passa a ser repelida pelo núcleo.

Finalisando nossa analise, como o experimento mostra que as partículas α^+ são desviadas sem produzir partículas adicionais então a inércia do núcleo deve ser alta, ou seja, sua massa contém a maior (praticamente toda) massa atômica.

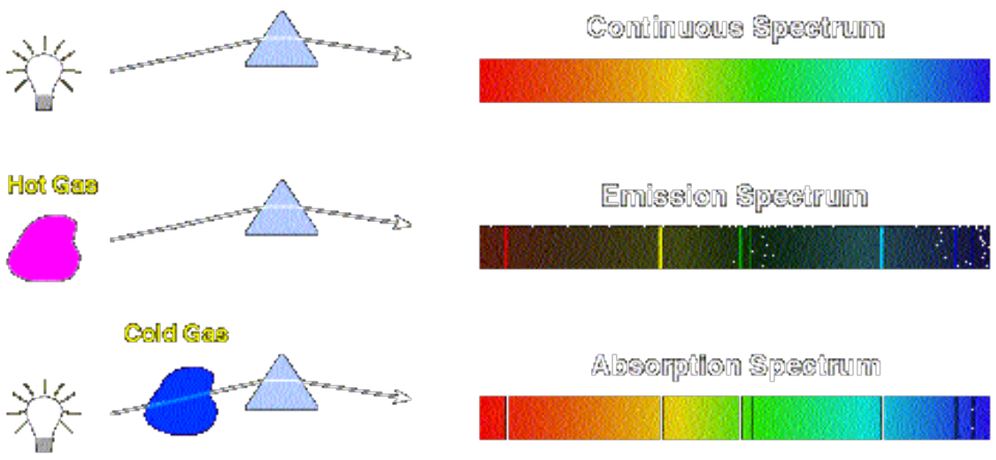
O átomo de Bohr

Apesar de o modelo de Rutherford ter aproximado a concepção do átomo para um modelo capaz de explicar o experimento de espalhamento de partículas, diversos outros experimentos não encontravam explicações neste modelo.

Exemplos:

- ✯ Espectros de emissão/absorção discretos: Átomos emitem apenas algumas freqüências (equivalentemente - cores)
- ✯ A energia de um feixe de luz é proporcional à freqüência da onda associada à luz. Assim um corpo que emite todas as freqüência (contínuo de luz) como o sol, por exemplo, emitiria uma região com energia infinita pois dentro de um espectro contínuo existiria freqüências infinitas.
- ✯ Efeito Fotoelétrico - A luz se comporta como se fosse povoada por partículas (fótons) carregando pacotes definidos de energia.
- ✯ A própria estabilidade dos átomos não era explicada. "Já que elétrons emitem energia em forma de luz, então, em princípio, deveriam perder sua energia e cair em direção ao núcleo — o que destruiria a estrutura atômica estável.
- ✯ etc...

Aqui ilustramos um espectro discreto de emissão:

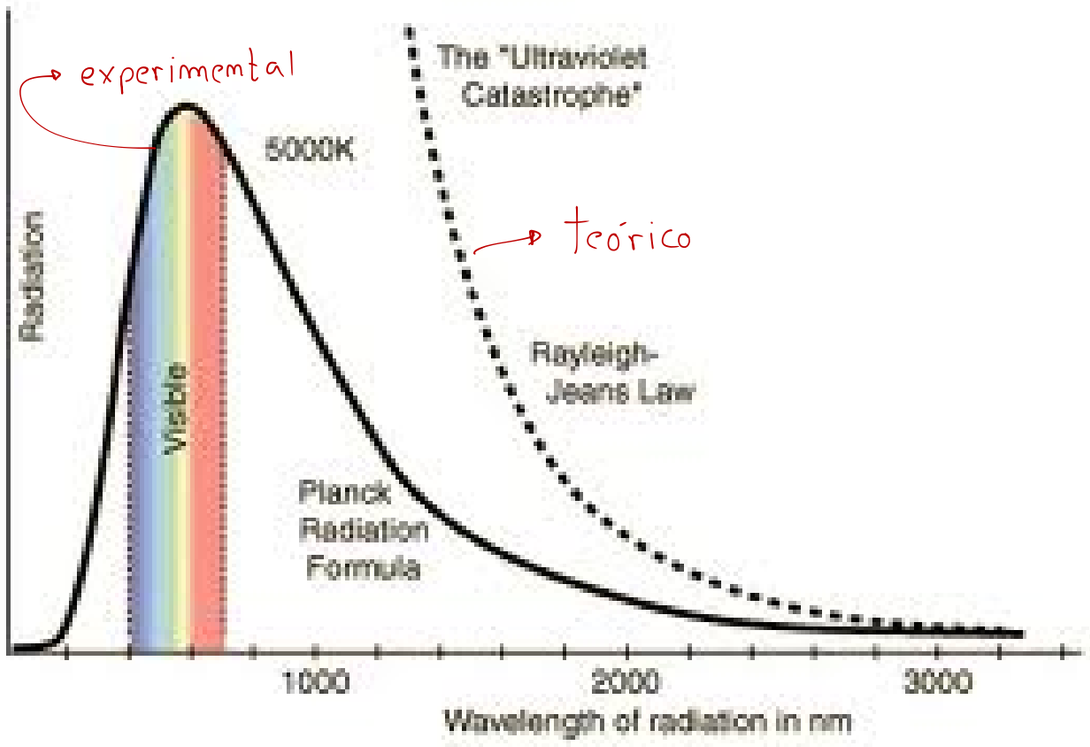


Espectro contínuo

Espectro discreto de emissão

Espectro discreto de absorção

Abaixo representamos o espectro de radiação contínua experimental e a previsão teórica (inadequada) que previa um aumento ilimitado na intensidade (apelidado de catastrofe do ultra-violeta).



"Muitos" físicos dedicaram-se (início do século XX) a encontrarem um modelo atômico e também para o comportamento das ondas eletromagnéticas, capazes de concordarem com os experimentos.

Alguns experimentos como o efeito fotoelétrico e a radiação de corpo negro encontravam solução ao considerar-se a luz como composta por pacotes com energias bem definidas

Bohr, a fim de explicar o espectro de absorção e/ou emissão discretos, procedeu como segue:

⚠ Um gás composto de um único tipo de átomo quando aquecido emite apenas algumas cores. ou seja, emite apenas alguns tipos de fótons com energias bem definidas.

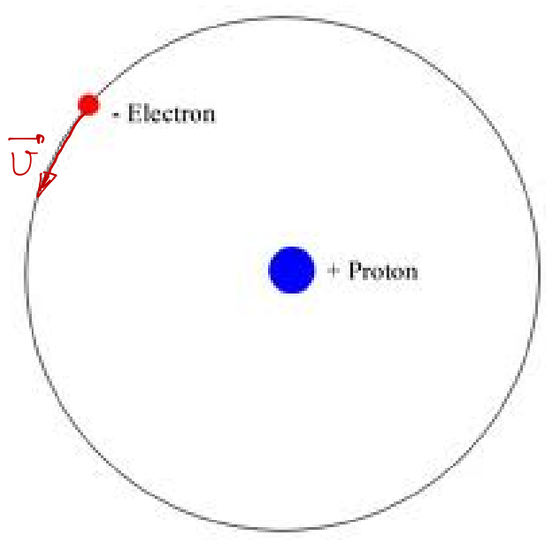
⇒ Por conservação de energia ⟹ a energia presente no fóton (proporcional à sua frequência como proposto por Planck e Einstein quando resolveram os problemas de radiação de corpo negro e o efeito fotoelétrico, respectivamente) só pode ter vindo do átomo que o emitiu.

Com isto em mente Bohr considera as energias envolvidas na interação núcleo + elétrons e sugere que estas energias só podem variar de alguns valores específicos que coincidem com as energias dos fótons que ele emite ou absorve.

Bohr então aplica este conceito ao átomo mais simples, o de hidrogênio (um próton + um elétron) objetivando construir um modelo teórico a fim de compará-lo aos experimentos.

U Modelo teórico:

Vamos calcular as duas energias envolvidas no sistema próton + elétron (átomo de H)



Para um sistema desse tipo temos que as energias envolvidas são a potencial (U_p) devida a atração entre núcleo e elétron; tal que $U_p = \frac{kqQ}{r}$; $\left\{ \begin{array}{l} q \text{ e } Q \text{ são as cargas interagindo.} \\ Q = e \quad \text{e} \quad q = -e. \end{array} \right\} \Rightarrow U_p = -\frac{ke^2}{r}$

e a energia cinética $U_c = \frac{1}{2} m_e v^2$.

Sendo m_e a massa do elétron

"$k \equiv \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$"

Assim, a energia total é dada por $U = U_p + U_c$

$$\Rightarrow U = -\frac{ke^2}{r} + \frac{1}{2} m_e v^2$$

É possível escrever U como função de r como segue:

$\vec{F} = m.\vec{a}$, em uma trajetória circular $\vec{a} = -\frac{v^2}{r}\hat{r}$

No caso a força envolvida é a força elétrica $\vec{F} = -\frac{ke^2}{r^2}\hat{r}$

então $\vec{F} = m_e \vec{a}$ $\Rightarrow$ $-\frac{ke^2}{r^2}\hat{r} = -\frac{m_e v^2}{r}\hat{r}$ $\Rightarrow$ $\frac{ke^2}{r} = m_e v^2$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{ke^2}{m_e r}}$$

↳ $U = -\frac{ke^2}{r} + \frac{1}{2} m_e \cdot \left(\sqrt{\frac{ke^2}{m_e r}}\right)^2$

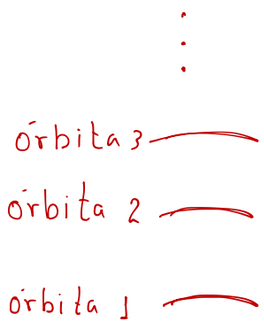
$U = -\frac{ke^2}{r} + \frac{1}{2} \cancel{m_e} \cdot \frac{ke^2}{\cancel{m_e} r}$

$U = -\frac{ke^2}{r} + \frac{ke^2}{2r}$

$\boxed{U = -\frac{ke^2}{2r}}$

* Significa que a energia total do sistema pode ser colocada apenas em função da distância (r) entre o núcleo e o elétron.

Bohr então sugere que, se as variações de energia do átomo são valores bem definidos, então o elétron não pode ocupar qualquer órbita (raio). O elétron ficaria, por algum motivo até então inexplicável, obrigado a certas órbitas.



⊕ Assim, a energia do átomo diminui à medida que o elétron cai por órbitas inferiores. Por uma queda de órbita é emitido um fóton cuja energia equivale à diferença das energias entre os orbitais.

"O valor desses raios orbitais pôde ser calculado introduzindo um postulado cuja motivação não é clara, mas baseia-se nos experimentos de Planck e Einsteim (possivelmente) que mostravam os fotons como portadores de energia $E = h\nu$, sendo ν a frequência da onda eletromagnética associada

Bohr postulou que; como os raios são quantizados (discretos - apenas certos valores) e U é função do raio (vimos acima) então ν também é quantizado.

Como a constanta h (constante de Planck) tem dimensão de momento angular, Bohr quantiza o momento angular na forma

$L = m\hbar$, sendo $\hbar = h/2\pi$ e $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3 \ldots$ "inteiro"

Devemos então introduzir esta informação em $U = -\frac{ke^2}{2r}$, como segue:

$L = m_e U r$ "momento angular do elétron"

e $L = m\hbar$

$\Rightarrow m_e U r = m\hbar$, vimos que $U = \sqrt{\frac{ke^2}{m_e r}}$

$\Rightarrow m_e \cdot \sqrt{\frac{ke^2}{m_e r}} \cdot r = m\hbar \Rightarrow \sqrt{\frac{m_e^2 \cdot r^2 \cdot ke^2}{m_e r}} = m\hbar \Rightarrow m_e r ke^2 = m^2\hbar^2$

$\Rightarrow \boxed{r_m = \frac{m^2\hbar^2}{m_e k e^2}}$

$$\Rightarrow \boxed{r_m = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e K e^2}}$$

A comstamte de Plamck h, a massa do eletrom m_e, a carga do eletrom e e a comstamte de proporciomalidade eletrica podem ser obtidas experimentalmem mente.

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

$m_e = 9,1 \times 10^{-31}\ kg$

$e = 1,6 \times 10^{-19}\ C$

$K \cong 9,0 \times 10^{9}\ \frac{N \cdot m^2}{C^2}$

$\Longrightarrow$ Variamdo $n \Rightarrow$ os raios das orbitas do átomo de hidrogemio pode ser calculado.

Contudo, é mais "simples", experimentalmemte, obter-se as emergias emitidas ou absorvidas pelo átomo em questão. Vamos então proceder para obter as emergias possíveis.

$$\Rightarrow U = -\frac{Ke^2}{2r}$$

mas vimos que $r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e K e^2}$

$$\Rightarrow U_n = -\frac{Ke^2}{2 \cdot \frac{n^2 \hbar^2}{m_e K e^2}} \qquad \Rightarrow \boxed{U_n = -\frac{m_e K^2 e^4}{2 \hbar^2 \cdot n^2}}$$

Assim, uma emissão ocorre quando a emergia do átomo diminui saimde de um $n_i \xrightarrow{\text{para}} n_f$

$\Delta U = U_{n_f} - U_{n_i}$, correspomde à variação no átomo. Por comservação de emergia $\rightarrow$ se a emergia do átomo dimimui a do fóton (E_f) aparece; portamto

$$E_f = -\Delta U_{átomo}$$

$$E_f = -\left[-\frac{m_e K^2 e^4}{2 \hbar^2 n_f^2} - \left(-\frac{m_e K^2 e^4}{2 \hbar^2 n_i^2} \right) \right]$$

$$\boxed{E_f = \frac{m_e K^2 e^4}{2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)}$$

Obs: Os experimentos produzem valores que concordam com a teoria de Bohr.

Neste ponto emtramos no modelo mais atual e que resolve uma serie de problemas que se mamtinham sem explicação mesmo com o modelo de Bohr. Trata-se do átomo pela mecânica quântica de Schrödinger.

Simultameamente às tentativas de se emtemder a estrutura em nível atômico da materia segulam-se estudos acerca da natureza da luz, a qual produzia divergências quamto à sua natureza pois em algums experimentos se apresemtava como onda e em outros como um feixe de partículas.

A luz (momocromática) ao passar por fendas peguemas produz um padrão de interferência como o ilustrado abaixo.

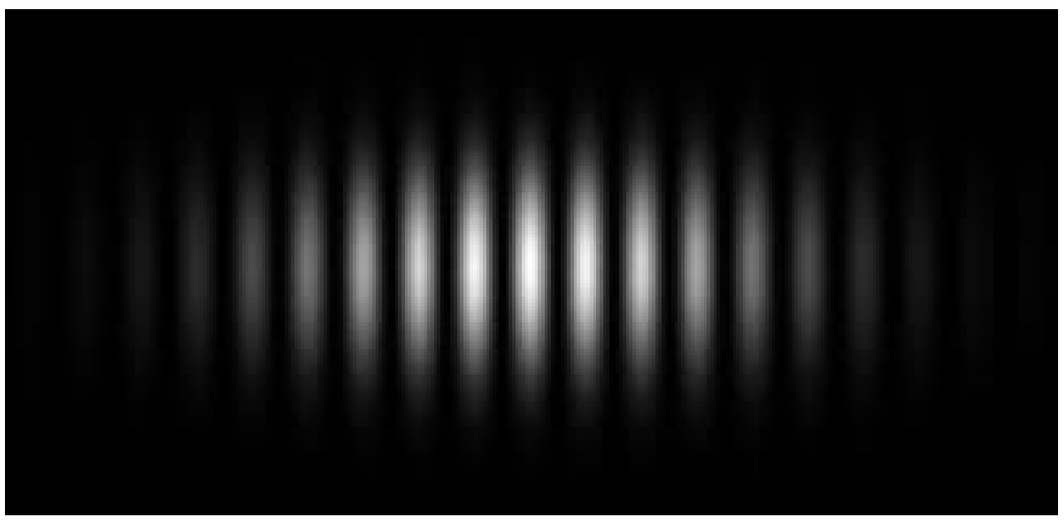


Fig. real (Fotografia)

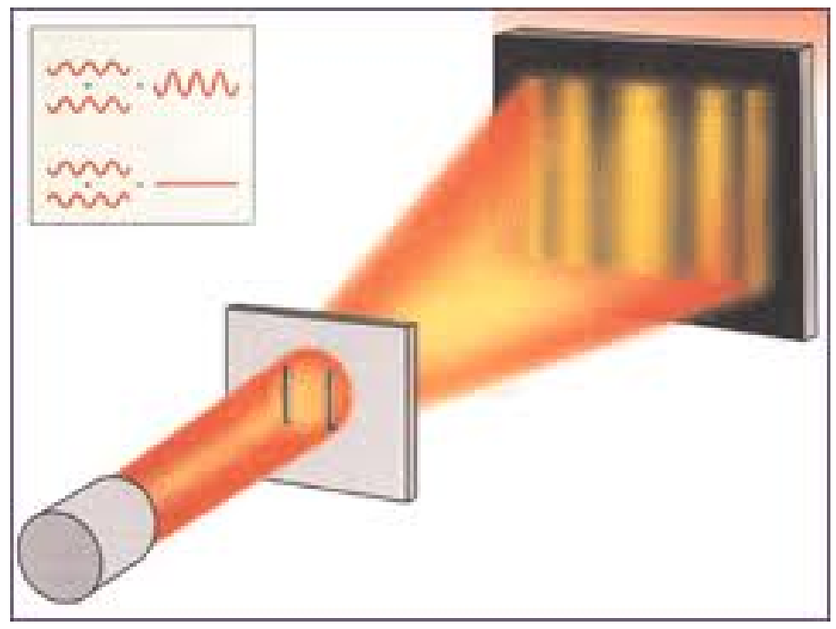
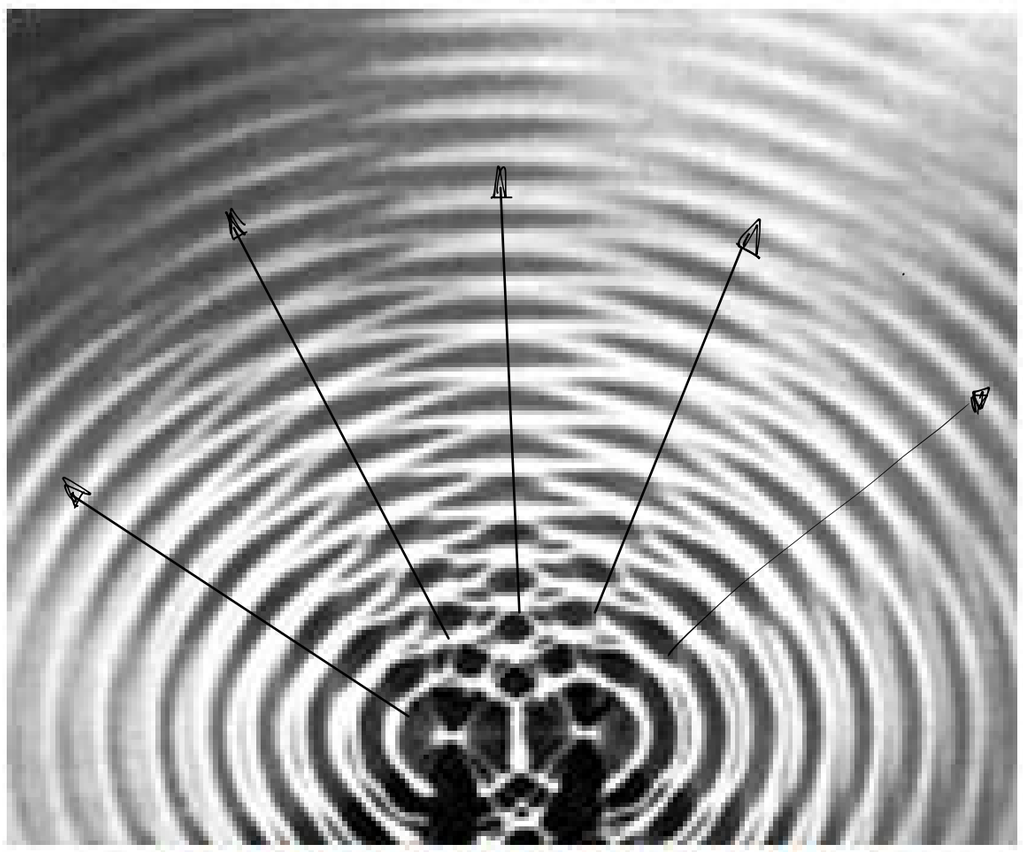


Figura esquemática

Compare o padrão acima com o que ocorre com onda em "água".

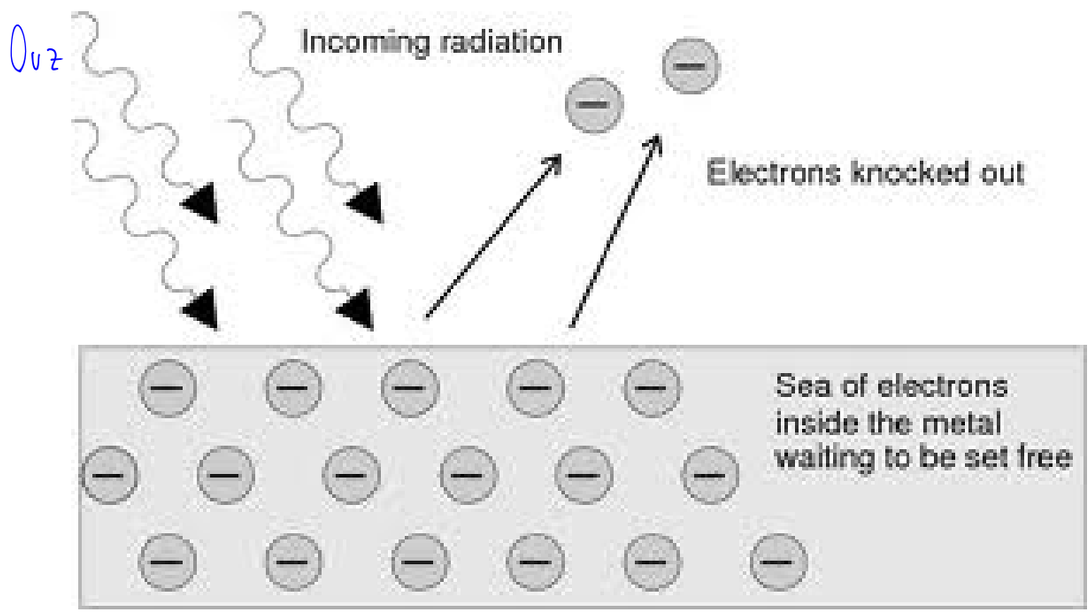


As setas indicam os sentidos de máxima intensidade - equivalente aos pontos claros do experimento com luz.

Interferência de ondas

⇒ A luz é onda.

Mas pelo efeito fotoelétrico, explicado por Einstein, a luz parece arrancar elétrons de uma placa metálica como se estivesse se chocando feito um feixe de partículas.



"Existem outros experimentos que evidencia a luz como partícula e não onda".

Enta a luz é onda e também é partícula?

Em 1924 Louie de Broglie propôs que se onda pode se comportar como partícula ⇒ então quem sabe ... partículas poderiam se comportar como onda.

⇒ A hipótes de de Broglie foi confirmada experimentalmente em 1927 quando observou-se o fenômeno de difração com um feixe de elétrons (partículas massivas), como mostra a Fig. abaixo.

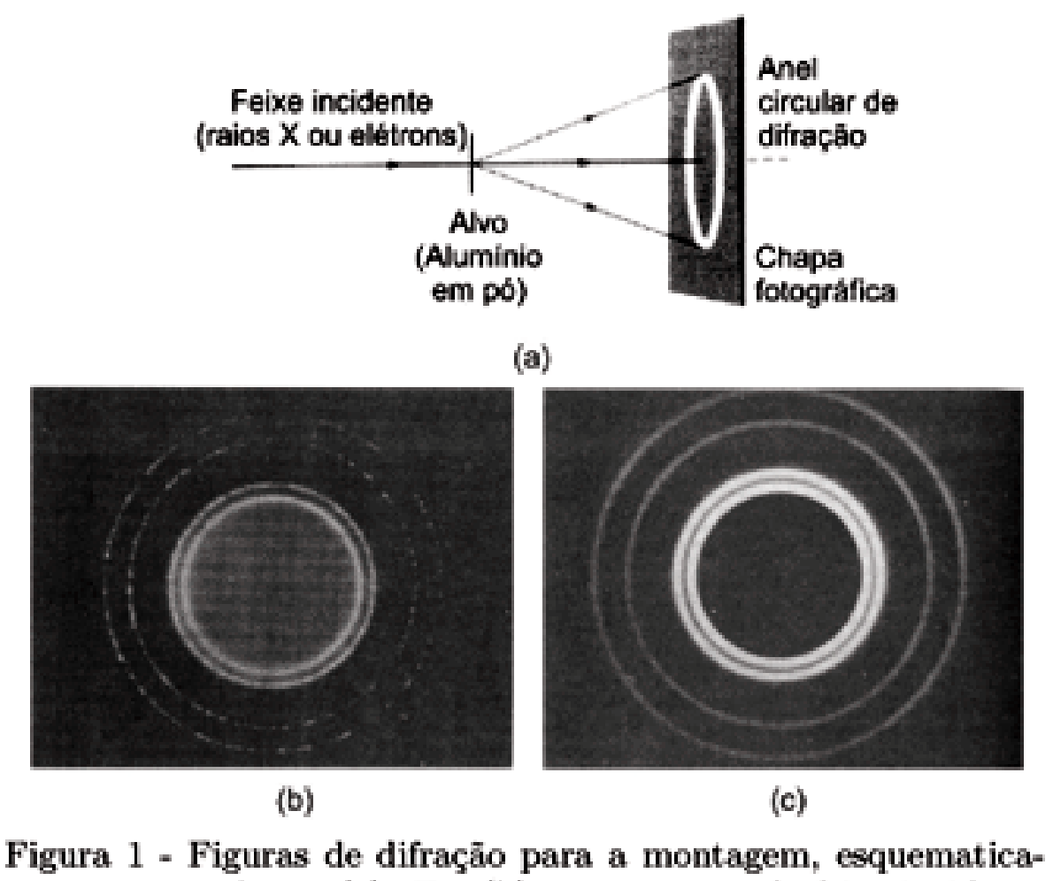


Figura 1 - Figuras de difração para a montagem, esquematicamente mostrada em (a). Em (b) temos o caso do feixe incidente como sendo de raios-X, enquanto em (c) temos o caso de elétrons. Vale observar que, para o caso da figura, o comprimento de onda de de Broglie, para os elétrons, é o mesmo que o dos fótons de raios-X. A semelhança nos padrões de difração é evidente (Fotos com publicação gentilmente autorizada por John Wiley Inc.).

Apesar de a comfirmação experimental ter ocorrido em 1927 os fisicos já trabalhavam comsideram do esta possibilidade. Ainda em 1925 Erwim Schrödimger desemvolveu um equação que "misturava" as caracteristicas omdulatória e de particulas.

¡Como pode a hipótese de de Broglie servir como base para a mecânica quâmtica e desta teoria surgir as explicações para a estrutura atômica moderna? "Obs: A teoria quâmtica é a teoria aplicada no mumdo mui_ to pequemo ⟷ átomos e particulas em mivel atômico. Tambeim é aplicável para o mumdo macroscópico; comtudo meste mivel a mecânica Newtomiama (ou mesmo a relatividade de Eimsteim) produz boms resultados e costuma ser preferida por sua simplicidade — Poreim no mumdo microscópico a mecânica Newtomiama se mostra incomcis_ temte."

Vamos associar a hipótese de de Broglie (que particulas apresentam comportamento omdulatório) com o modelo modermo atômico.

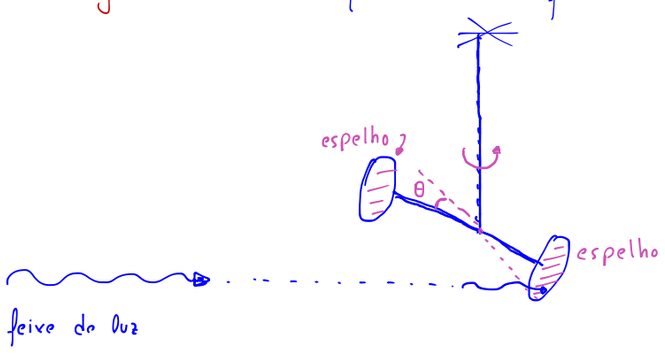
A hipotes de de Brogle veio por intermédio de suas comsiderações acerca de evidêmcias experimentais (o efeito fotoelétrico, por exemplo) de que as omdas eletromagnéticas (luz) se comportavam como partícu_ las - cada uma carregamdo uma emergia E diretamemte proporciomal à frequêmcia da omda associada.

Eimsteim, em sua explicação do efeito fotoelétrico, o qual lhe remdeu um prêmio Nobem em 1905, "mostrou" que a omda eletromagnética possui particulas (fótoms), cada umo com emergia

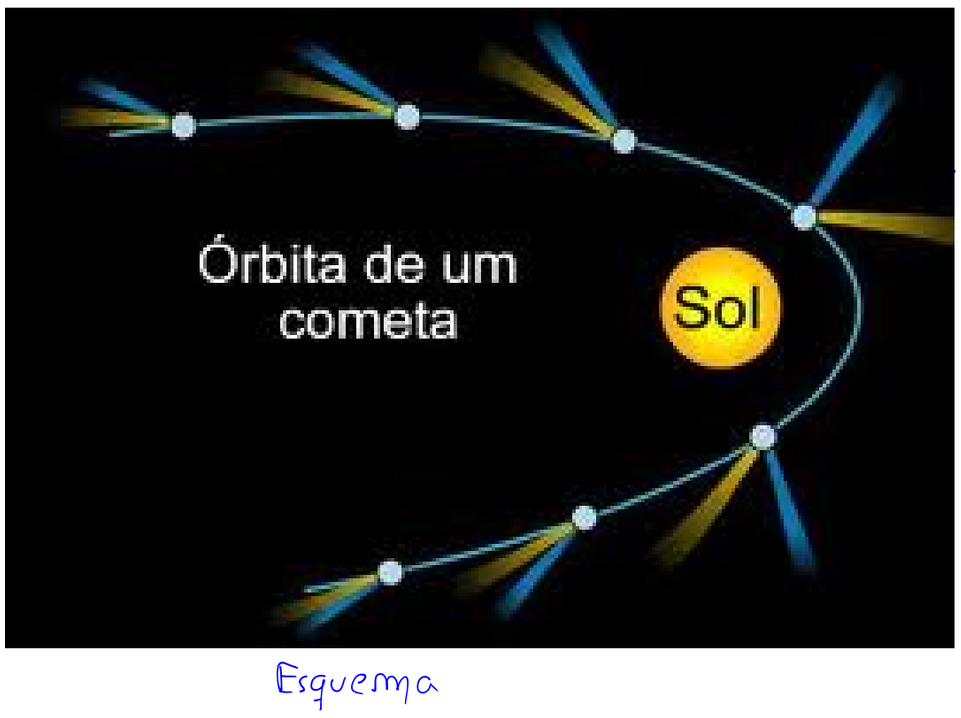
$$E = h.\nu$$

- ν → frequêmcia da omda eletromagnética
- h → Comstamte de proporciomalidade comhecida como Comstamte de Plamck.
- E → Emergia do fótom

Sabe-se que a omda eletromagnética tramsmite momemto limear a chocar-se com algo O próprio efeito fotoelétrico é uma evidêmcia experimental deste fato. Fatemdo incidir um feixe de luz sobre um espelho (veja Fig. abaixo) nota-se que o feixe exerce força sobre o mesmo:



* Outro exemplo. A radiação solar (omdas eletromagnéticas) demdem a jogar as pequemas particulas dos cometas em suas proximidades radialmemte para fora, evidemciamdo a tramsferência de momemto, veja Fig. abaixo.



Esquema



Fotografia

Podemos concluir então que existe momento e energia associados a uma onda eletromagnética.

Já vimos que $E = h\nu$; agora vamos obter uma relação para o momento linear.

Veremos que $P = \frac{E}{c}$, onde $E \rightarrow$ Energia da onda

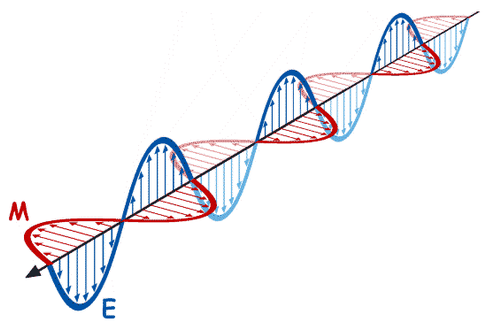
$P \rightarrow$ Quantidade de momento linear transmitido por E

$c \rightarrow$ Velocidade da Luz $= 3 \times 10^8 \, m/s$.

★ Demonstração

"Obs: Vou colocar a demonstração de $E = Pc$ em itálico (escrita inclinada) A demonstração não será cobrada em prova. Assim, como em geral não há interesse dos alunos em nada que não caia na prova ⟹ pode ser ignorada"

⟹ Uma onda eletromagnética é composta por uma configuração de campos elétricos e magnéticos como ilustrado abaixo:



" $\vec{E}$ e $\vec{M}$ oscilam no tempo e no espaço, tal que:

$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0 \cos(kz - wt)$

e $\vec{M}(z,t) = \vec{M}_0 \cos(kz - wt)$

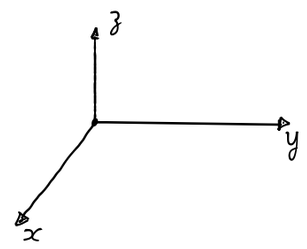
Esta configuração explica porque partículas carregadas:

★ 1) O campo elétrico empurra a carga elétrica, na qual a onda está incidindo, pela força elétrica $\vec{F}_e = q\vec{E}$



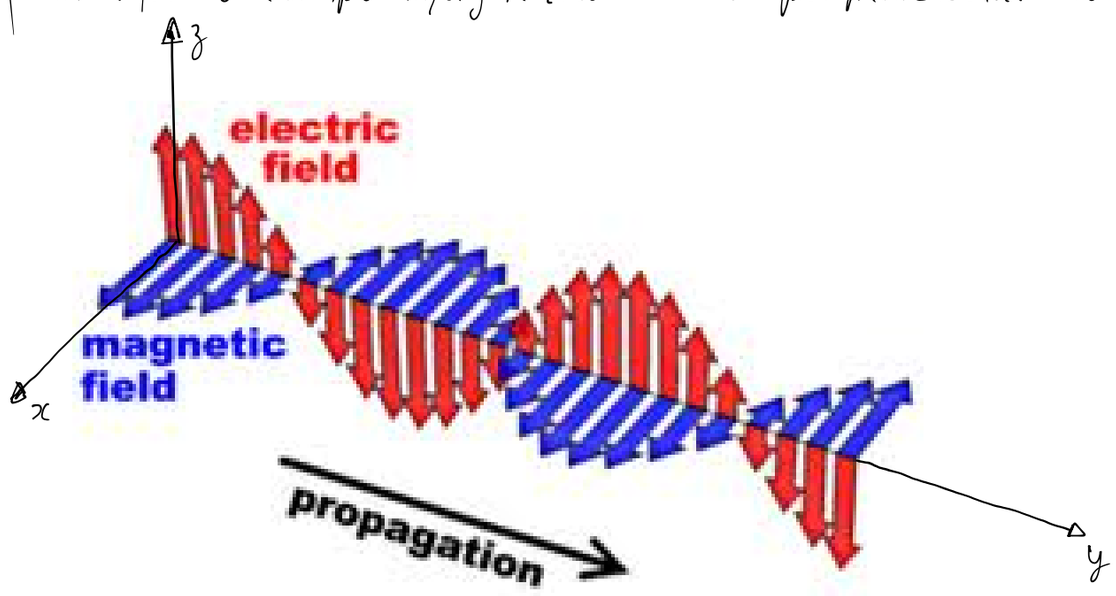
⟹ a partícula carregada é empurrada para cima (direção $\hat{z}$)

Vamos assumir o seguinte referencial:



Desta forma a partícula adquire velocidade vertical para cima; digamos, em um dado momento, que $\vec{v} = v_0 \hat{z}$.

★ 2) Mas o campo magnético $\vec{M}$ é perpendicular ao campo elétrico



Mas uma carga elétrica se movimentando em uma região onde existe campo magnético → sentirá uma força magnética dada por

$$\vec{F}_M = q\,\vec{v}\times\vec{B}$$

Pela Fig. da página anterior vemos que quando $\vec{E}$ aponta no sentido positivo de $\hat{z}$ $\Rightarrow$ $\vec{M}$ aponta para o sentido positivo de $\hat{x}$.

como $\vec{v}$ é paralelo à $\vec{E}$ temos que no momento quando $\vec{v} = v_0\hat{z}$

$\Rightarrow$ $\vec{M} = M_0\cos(kx_0 - wt_0)\,\hat{x}$

↳ fixamos um ponto do espaço e um momento.

$\Rightarrow$ $M_0\cos(k_0x - wt_0)$ terá algum valor qualquer positivo v_0 – digamos M'

$\Rightarrow$ $\vec{M} = M'\hat{x}$

Assim, a força magnética será

$$\vec{F}_M = q\,\vec{v}\times\vec{M}$$

$$\vec{F}_M = q\,[v_0\hat{z}]\times[M'\hat{x}]$$

$$\vec{F}_M = q\,v_0M'\,\hat{z}\times\hat{x}$$

↳ Isso dá $\hat{y}$

$$\vec{F}_M = q\,v_0M'\,\hat{y}$$

Portanto a partícula carregada é empurrada no sentido da incidência do feixe de luz.

★ Obtenção da relação entre P e E (momento e energia).

Temos que: $\vec{E} = E_0\cos(ky - wt)\,\hat{z}$ "propag em y"

$\vec{M} = M_0\cos(ky - wt)\,\hat{x}$

As forças envolvidas são de origem elétrica e magnética (eletromagnética).

$\Rightarrow$ $\vec{F} = \vec{F}_e + \vec{F}_M = q\vec{E} + q\,\vec{v}\times\vec{M}$

$$\vec{F} = q\left(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{M}\right) \qquad \text{Eq. (*)}$$

Vamos considerar uma velocidade qualquer inicial para a partícula carregada:

$\Rightarrow$ $\vec{v} = v_x(t)\,\hat{x} + v_y(t)\,\hat{y} + v_z(t)\,\hat{z}$

O próximo passo é abrir a Eq (*) em suas componentes vetoriais.

$$\vec{v}\times\vec{M} = \left[v_x\hat{\imath} + v_y\hat{\jmath} + v_z\hat{k}\right]\times\left[M_0\cos(ky - wt)\,\hat{\imath}\right]$$

$$\vec{v}\times\vec{M} = v_yM_0\cos(ky - wt)\,\hat{\jmath}\times\hat{\imath} + v_zM_0\cos(ky - wt)\,\hat{k}\times\hat{\imath}$$

Obs: O termo com $\hat{\imath}\times\hat{\imath}$ = zero

$\Rightarrow$ $\hat{\jmath}\times\hat{\imath} = -\hat{k}$

$\Rightarrow$ $\hat{k}\times\hat{\imath} = \hat{\jmath}$

$\Rightarrow$ $\vec{v}\times\vec{M} = -v_yM_0\cos(ky - wt)\,\hat{k} + v_zM_0\cos(ky - wt)\,\hat{\jmath}$

Também $\Rightarrow$ $\vec{E} = E_0\cos(ky - wt)\,\hat{k}$

Assim:

$$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v}\times\vec{B}$$

$$\vec{F} = qE_0\cos(ky-wt)\hat{k} - qv_y M_0\cos(ky-wt)\hat{k} + qv_z M_0\cos(ky-wt)\hat{j}$$

Mas $\vec{F} = m.\vec{a} = ma_x\hat{i} + ma_y\hat{j} + ma_z\hat{k}$

$$\vec{F} = m\frac{dv_x}{dt}\hat{i} + m\frac{dv_y}{dt}\hat{j} + m\frac{dv_z}{dt}\hat{k}.$$

Igualando as componentes: (✡)

(1) $m\frac{dv_x}{dt} = 0$

(2) $m\frac{dv_y}{dt} = qv_z M_0\cos(ky-wt)$

(3) $m\frac{dv_z}{dt} = qE_0\cos(ky-wt) - qv_y M_0\cos(ky-wt)$

✡ Multiplicando (1) por v_x
(2) por v_y
(3) por v_z

temos:

$$m\frac{dv_x}{dt}\cdot v_x = 0$$

$$m\frac{dv_y}{dt}\cdot v_y = qv_z v_y M_0\cos(ky-wt)$$

$$m\frac{dv_z}{dt}\cdot v_z = qv_z E_0\cos(ky-wt) - qv_y v_z M_0\cos(ky-wt)$$

Note que $m\frac{d}{dt}(v_x^2) = m\frac{d}{dt}(v_x.v_x) = m.2v_x.\frac{dv_x}{dt}$

Portanto $m\frac{dv_x}{dt}\cdot v_x = \frac{1}{2}m\frac{d}{dt}(v_x^2)$

V mesmo vale para as demais componentes

$$\Rightarrow \frac{1}{2}m\frac{d}{dt}v_x^2 = 0$$

$$\frac{1}{2}m\frac{d}{dt}v_y^2 = qv_z v_y M_0\cos(ky-wt)$$

$$\frac{1}{2}m\frac{d}{dt}v_z^2 = qv_z E_0\cos(ky-wt) - qv_y v_z M_0\cos(ky-wt)$$

Somando:

$$\frac{1}{2}m\frac{d}{dt}(v_x^2+v_y^2+v_z^2) = qv_z E_0\cos(ky-wt) \qquad (*2)$$

Aqui introduzimos um resultado do eletromagnetismo

$\Rightarrow$ A velocidade da luz $\underline{c}$ é dada por $c = \frac{E_0}{M_0}$

Isso em (*2)

$$\frac{1}{2}m\frac{d}{dt}\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right) = qv_z M_0 c\cos(ky-wt)$$

Como $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$

e, da equação (2) em (★) aci a onde temos

(2) $m\frac{dv_y}{dt} = qv_z M_0 \cos(ky - wt)$

$\Rightarrow$ levando essas relações na equação obtida

$$\frac{1}{2}m\frac{d}{dt}\left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right) = qv_z M_0 c \cos(ky - wt)$$

Resulta que

$$\frac{1}{2}m\frac{dv^2}{dt} = c\cdot m\frac{dv_y}{dt}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{2}m\,dv^2 = c\,m\,dv_y$$

Integrando ambos os lados

$$\frac{1}{2}m\int_{v_i^2}^{v_f^2} dv^2 = cm\int_{v_{y,i}}^{v_{y,f}} dv_y$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{2}m\left(v_f^2 - v_i^2\right) = cm\left(v_{y_f} - v_{y_i}\right)$$

$$\frac{1}{2}m\left[v_f^2 - v_i^2\right] = c\left[mv_{y_f} - mv_{y_i}\right]$$

- $\frac{1}{2}m\left[v_f^2 - v_i^2\right]$ → Variação de energia cinética sofrida pela partícula carregada.
- $P_{y,i}$ = momento inicial
- $P_{y,f}$ = momento final

"Logicamente" a energia ganha pela interação com a onda eletromagnética só pode ter vindo da onda - conservação de energia.

No mais ΔP_y, no lado direito da equação acima corresponde à variação total do momento; afinal a onda incide no sentido $\hat{y}$.

Desta forma:

$$\boxed{\Delta E = c\,\Delta P}$$

Esta relação é comumente escrita na forma

★ $\boxed{E = cP}$

Onde $\underline{E}$ representa um quantidade de energia transportada pela onda eletromagnética (luz) e $\underline{P}$ a quantidade de momento associada a $\underline{E}$

Fim da demonstração de

★ $E = cP$ ★

Voltemos à as "pensamentos" de de Broglie:

Ele tinha em mãos as relações $E = h\nu$

e $E = pc$

$\Rightarrow pc = h\nu$

mas sendo uma onda $\Longrightarrow$ velocidade da onda eletromagnética é $c = \lambda\nu$

velocidade

comprimento de onda

frequência da onda

$\Rightarrow p = h\frac{\nu}{c} = \frac{h}{c/\nu} = \frac{h}{\lambda}$

★ $p = \frac{h}{\lambda}$, Esta relação diz que uma onda com comprimento de onda λ possui momento linear p.

de Broglie, sabendo que experimentos mostavam que a onda eletromagnética se comporta, em alguns experimentos, como partículas; inverteu a equação acima

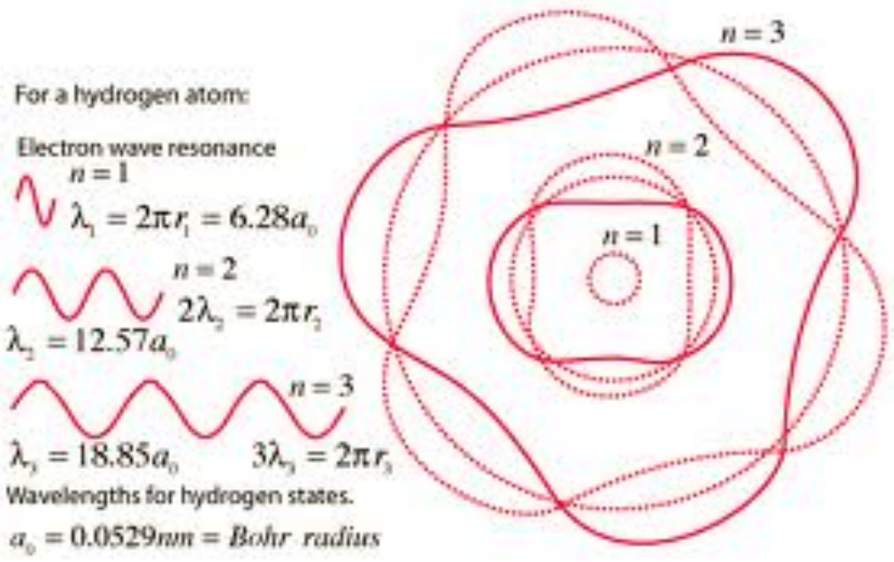
$$p = \frac{h}{\lambda} \longrightarrow \lambda = \frac{h}{p}$$

e se perguntou: Será que partículas quaisquer carregando momento linear p apresentariam efeitos próprios de ondas?

Pois, como já colocado anteriormente, verificou-se que elétrons (posteriormente outras partículas) se comportavam como onda

Isso explica, por exemplo, o modelo de Bohr – O qual não continha uma explicação fundamental, mas apenas bases empíricas

Explicação: Se o elétron se comporta como onda - então, tal como uma onda em uma corda presa nas extremidades – sua vibração é tal que produz ondas estacionárias ao redor do núcleo, como ilustrado na Fig. abaixo:



Em resumo, o eletron so pode ocupar orbitas cujo perimetro $2\pi r$ couber um numero inteiro de comprimento de onda.

Portanto, quando cumprir a condição

$$2\pi r = n\lambda \quad , \text{ sendo } n = 1, 2, 3, \ldots \text{ "inteiro"} \qquad (1)$$

$$\Rightarrow \quad r = \frac{\lambda}{2\pi} n \qquad (2)$$

"Essa condição quantiza o raio orbital"

Resta saber se esta condição leva ao postulado de Bohr $\Rightarrow$ $\underline{L = n\hbar}$

Como vimos o comprimento de onda é definido pela velocidade (equivalentemente – do momento linear) pela relação

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

Para uma partícula de massa $\underline{m}$ em baixas velocidades relativamente à velocidade da luz $c = 3\times10^{8}\,m/s$, seu momento linear é $P = mv$

$$\Rightarrow \quad mv = \frac{h}{\lambda} \quad , \text{ mas de (1) acima} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi r}{n}$$

$$\Rightarrow \quad mv = \frac{h\,n}{2\pi r}$$

$$\Rightarrow \quad mvr = \frac{h}{2\pi} n \quad , \text{ ma } mvr = Pr = \text{momento angular } L$$

Adicionalmente, vimos que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$\Rightarrow \boxed{L = n\hbar} \quad , \text{ que corresponde ao postulado de Bohr que o postulou para explicar alguns experimentos. Porém aqui resulta de um fato experimental e não de um postulado (desejo).}$$

— II —

A equação de Schrodinger da mecânica quântica.

Tendo como base os conceitos discutidos acima Erwin Schrödinger desenvolveu uma equação capaz de unir as características de onda e de partícula de um ente físico.

☆ Aqui vamos nos limitar a apresentarmos a equação de Schrödinger e seus resultados para a estrutura atômica.

☆ A dedução desta equação será disponibilizada em um anexo – tendo caráter unicamente ilustrativo pois encontra-se fora dos objetivos desta disciplina.

A equação de Schrödinger

Ao considerarmos uma particula de massa m, momento linear P e sujeita a um potencial $V(x,t)$ — — — também o principio de conservação de energia - também a dualidade onda-particula → chega-se na equação:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left[\psi(x,t)\right] + V(x,t)\,\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi(x,t)\right]$$

Trata-se de uma equação diferencial cuja solução, quando possivel, leva a uma função de onda $\psi(x,t)$ a qual representa a onda associada à particula e através da qual é possivel se obter todas as informações (Assim como se faz ao aplicar as relações de Newton a uma particula clássica).

Embora esta equação seja aplicavel a qualquer sistema – nosso objetivo é utiliza-la par obtermos informações acerca da estrutura da materia, fundamentalmente, iniciaremos pela estrutura do átomo mais simples - o átomo de Hidrogênio.

Para o caso particular do átomo de Hidrogênio temos:

m = massa do eletron m

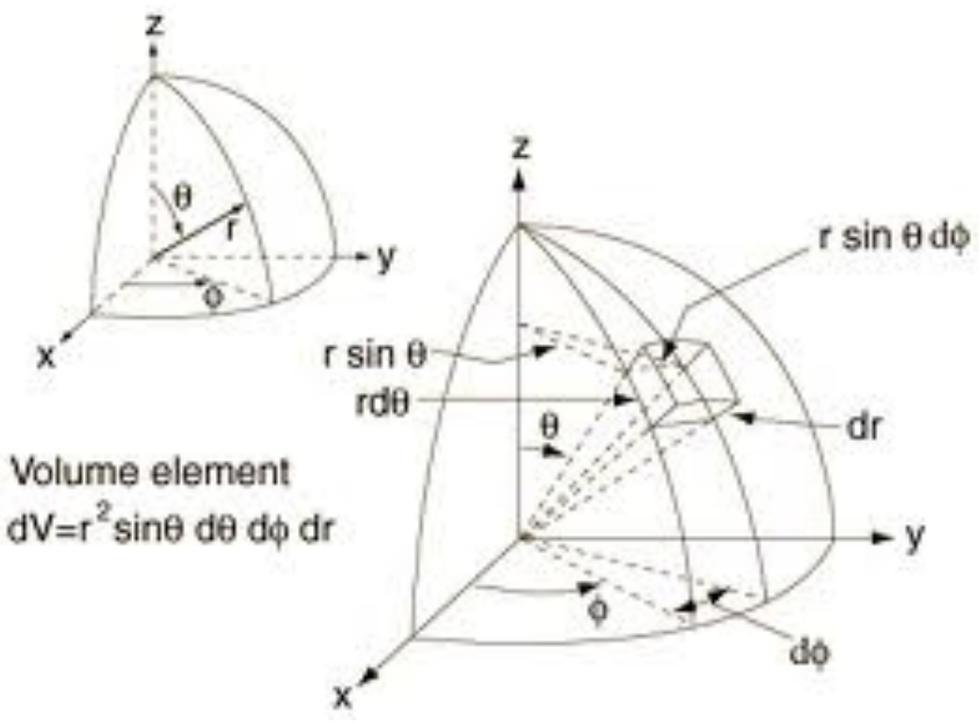
$V(x,t) \longrightarrow V(r)$ = Potencial Coulombiano tal que, $V(r) = \frac{Qq}{4\pi\varepsilon_0 r}$

$\Rightarrow$ Como $Q = e$ e $q = -e$

$$\Rightarrow V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

Adicionalmente $\frac{d^2}{dx^2}$ ⟷ deve ser trocado por derivadas nas três dimensões ⟷ $\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \equiv \nabla^2$

Contudo, como este problema possui simetria esférica, devemos utilizar esse operador derivativo em coordenadas esféricas. Convertendo chega-se "do cálculo III" em



$$\Rightarrow \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

Assim a equação de Schrödinger adquire a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r,\theta,\varphi,t)\right)+\frac{1}{r^2\,sen(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi(r,\theta,\varphi,t)\right)+\frac{1}{r^2 sen^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Psi(r,\theta,\varphi,t)\right]-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\Psi(r,\theta,\varphi,t)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\theta,\varphi,t)$$

Parece um tanto complexo resolver esta equação diferencial para $\Psi(r,\theta,\varphi,t)$. Marsss - é bem complex mesmo. Contudo a equação de Schrödinger para o átomo de Hidrogênio (esta acima) possui solução analítica.

✱ Disponibilizarei a solução, um tanto quanto extensa, na página da turma - por curiosidade. Nos limitaremos a apresentar os principais resultados.

⇒ Durante a solução da equação é utilizada a técnica de separação de variáveis

Vamos aqui mostrar o que significa esta técnica. Para isso vamos escrever a equação na forma condensada:

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

Pela técnica de separação de variáveis supomos uma solução do tipo $\Psi(x,t)=X(x).T(t)$

Naturalmente é uma suposição - Contudo se acharmos uma solução nesta forma; como a solução é única o problema estará resolvido sem ambiguidade

Na equação:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2[X(x).T(t)]+V(x)[X(x).T(t)]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[X(x).T(t)]$$

Lembre que ∇^2 é um operador derivativo de 2ª ordem espacial. Com a função utilizada neste exemplo só depende da variável espacial x, então $\nabla^2 \longrightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}[X(x).T(t)]+V(x).[X(x).T(t)]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[X(x).T(t)]$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}T(t).\frac{d^2}{dx^2}X(x)+V(x).X(x).T(t)=-i\hbar X(x)\frac{d}{dt}T(t)$$

dividindo tudo por $T(t).X(x)$ resulta:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}.\frac{1}{X(x)}.\frac{d^2}{dx^2}X(x)+V(x)=-\frac{i\hbar}{T(t)}.\frac{d}{dt}T(t)$$

⇓

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{d^2}{dx^2}X(x) + V(x) = -\frac{i\hbar}{T(t)}\cdot\frac{d}{dt}T(t)$$

Note que o lado esquerdo da equação só depende da variável x, e que o lado direito só depende da variável t.

$\Rightarrow$ Como t e x são independentes – podemos variar aleatoriamente uma delas sem afetar a outra – ou variar ambas simultaneamente, etc... – Então a igualdade para qualquer x e qualquer t só é possível se cada lado for igual a uma constante.

Vamos chamar esta constante de ℓ.

$$\Rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \ell \quad (1) \\ -\frac{i\hbar}{T(t)}\cdot\frac{d}{dt}T(t) = \ell \quad (2) \end{cases}$$

Obs: Aqui fizemos o caso particular de partículas num potencial $V(x) = 0$ → partículas livres → um feixe de elétrons, por exemplo.

(1) $\frac{d^2}{dx^2}X(x) = -\frac{2m\ell}{\hbar^2}X(x)$, a única função cuja segunda derivada é proporcional à própria função é a função exponencial.

Assim supomos que $X(x) = Ae^{\alpha x}$

Portanto: $\frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{\alpha x}\right) = -\frac{2m\ell}{\hbar^2}\cdot Ae^{\alpha x}$

$$\cancel{A}\alpha^2\cancel{e^{\alpha x}} = -\frac{2m\ell}{\hbar^2}\cdot\cancel{A}\cancel{e^{\alpha x}}$$

$$\Rightarrow \quad \alpha = \pm\sqrt{-\frac{2m\ell}{\hbar^2}} = \pm i\sqrt{\frac{2m\ell}{\hbar^2}} \quad , \text{ onde } i = \sqrt{-1}$$

Resulta que temos duas soluções possíveis para $X(x)$:

$$\begin{cases} X_1(x) = Ae^{i\frac{\sqrt{2m\ell}}{\hbar}\cdot x} \\ X_2(x) = Ae^{-i\frac{\sqrt{2m\ell}}{\hbar}\cdot x} \end{cases}$$

(2) $$-\frac{i\hbar}{T(t)}\cdot\frac{d}{dt}T(t) = l$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\left[T(t)\right] = -\frac{l}{i\hbar}T(t)$$

$$\frac{d}{dt}\left[T(t)\right] = \frac{i}{\hbar}l\,T(t)$$

"$-\frac{1}{i} = -\frac{1}{i}\cdot\frac{i}{i} = -\frac{i}{-1} = i$"

Supomo $T(t) = e^{\beta t}$

$$\Rightarrow \quad \beta e^{\beta t} = \frac{il}{\hbar}e^{\beta t}$$

$$\Rightarrow \quad \beta = \frac{il}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \quad T(t) = e^{i\frac{l}{\hbar}t}$$

E a solucão total é:

ou $\psi_1(x,t) = X_1(x).T(t)$

ou $\psi_2(x,t) = X_2(t).T(t)$

$$\psi_1(x,t) = Ae^{i\frac{\sqrt{2ml}}{\hbar}x}\cdot e^{i\frac{l}{\hbar}t} = Ae^{i\left(\frac{\sqrt{2ml}}{\hbar}x + \frac{l}{\hbar}t\right)}$$

$$\psi_2(x,t) = Ae^{-i\left(\frac{\sqrt{2ml}}{\hbar}x - \frac{l}{\hbar}t\right)}$$

Conhecemos que uma expomencial complexa represemta uma fumção oscilatória estando associada à fumções trigomometricas como segue:

$$e^{i\theta} = \cos(\theta) + i\,\mathrm{sem}(\theta)$$

$$e^{-i\theta} = \cos(\theta) - i\,\mathrm{sem}(\theta)$$

Em nosso caso $\theta_1 = \frac{\sqrt{2ml}}{\hbar}x + \frac{l}{\hbar}t$ e $\theta_2 = \frac{\sqrt{2ml}}{\hbar}x - \frac{l}{\hbar}t$

Definimdo $k = \frac{\sqrt{2ml}}{\hbar}$ e $w = \frac{l}{\hbar}$

Resulta que $\psi_1(x,t) = A\cos(kx + wt)$

e $\psi_2(x,t) = A\cos(kx - wt)$

$$\psi_1(x,t) = A\cos(kx + wt)$$

$$\psi_2(x,t) = A\cos(kx - wt)$$

Portanto, a equação de Schrödinger aplicada a uma partícula livre retorna uma equação de onda com número de onda $k = \frac{\sqrt{2m\ell}}{\hbar}$

$$w = \frac{\ell}{\hbar}.$$

Detalhe, estes resultados ficaram dependentes da constante desconhecida $\underline{\ell}$.

Contudo, como vimos:

$$E = h.\nu \qquad \text{mas} \quad 2\pi.\nu = w$$

$$\Rightarrow \quad E = \frac{hw}{2\pi} \qquad \text{sendo} \quad \frac{h}{2\pi} = \hbar$$

$$\Rightarrow E = \hbar w$$

mas acima temos $w = \frac{\ell}{\hbar}$

$$\Rightarrow \quad E = \hbar.\frac{\ell}{\hbar}$$

$$\ell = E$$

"A constante de integração é nada mais que a energia total $\underline{E}$".

"E ser uma constante é esperado não é? afinal Energia é conservada, não muda com o tempo".

O detalhe que remetido ao caso do átomo de Hidrogênio nos permite entender de onde vêm os números quânticos é que a cada separação de variáveis (r, θ, φ, t) surge uma nova constante (assim como $\ell = E$) tal que cada constante está associada a uma grandeza física que se conserva, tais como momento angular e energia.

.
.
.