

Antes do advento dos computadores, só sistemas muito simples, como pequenas moléculas – por exemplo, hidrogênio (H_2), gás carbônico (CO), óxido de nitrogênio (NO) –, podiam ser estudados pela teoria quântica. E mesmo estes precisavam de uma simplificação.

Depois da década de 1950, graças ao aparecimento de uma nova teoria – conhecida por funcional da densidade (ou densidade local) – conferiu-se maior rapidez aos cálculos, permitindo assim a investigação de moléculas grandes e sólidos mais complexos.

SINERGISMO TOTAL. Em um sólido, as distâncias típicas entre os átomos são de cerca 2×10^{-8} cm. Some-se a isso o fato de alguns gramas de qualquer sólido conterem cerca de 10^{23} átomos, ou seja, o número 1 seguido de 23 zeros! Sendo assim, seria impossível resolver a equação de Schrödinger para um sistema tão grande, caso não tivéssemos a ajuda do teorema de Bloch. Este teorema demonstrou que a simetria de translação do sólido se reflete na função de onda ψ do cristal. Os métodos baseados neste teorema são conhecidos como ‘cálculos de bandas’.

O campo de pesquisa científica que envolve a aplicação de todos os métodos de resolução aproximada da equação de Schrödinger para átomos, moléculas e sólidos é conhecido como estrutura eletrônica. Há um sinergismo total entre a evolução dessa área da ciência e o desenvolvimento dos computadores, já que estes são a ferramenta fundamental para os cálculos.

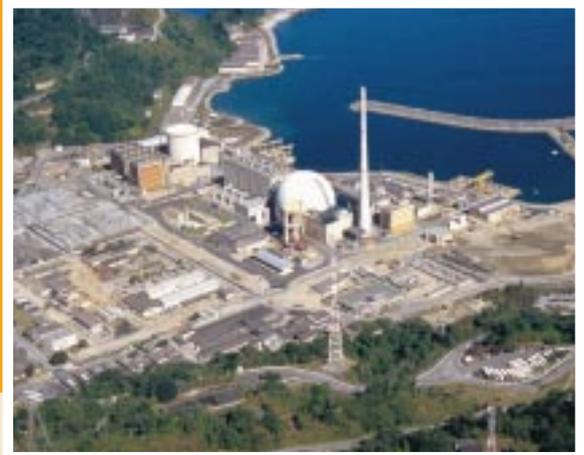
IMPUREZAS E AGLOMERADOS. Nos sólidos cristalinos, os átomos estão arranjados de forma periódica, de tal modo que há uma simetria de translação. Em outras palavras, podemos determinar a posição de cada átomo nesse tipo de sólido simplesmente deslocando, em todas as direções, um pequeno número deles – a chamada célula unitária.

Em muitos casos, a simetria translacional do cristal é quebrada localmente devido à existência de impurezas, vacâncias (‘vazios’) ou distorções na posição dos átomos. Outros sólidos não têm essa periodicidade e são chamados ‘amorfo’ – um exemplo de sólido amorfo é o vidro.

Pode-se estudar também apenas as propriedades localizadas em um determinado átomo. Nesses casos, resolve-se a equação de Schrödinger para um conjunto de átomos, chamado ‘aglomerado’ (*cluster*, em inglês), escolhidos para representar o sistema, sendo que a simulação da parte externa ao aglomerado no sólido é feita de forma aproximada.

Ao longo de seu desenvolvimento, a área de estrutura eletrônica, através do uso de técnicas experimentais e ferramentas teóricas, vem contribuindo para o descobrimento de novos materiais cujas aplicações vão da medicina e eletrônica à indústria aeroespacial e informática. ■

MARCUS ALMEIDA/ICONE



Tanto o entendimento da radioatividade quanto o sucesso na síntese de novos elementos químicos contaram com a ajuda de poderosa ferramenta teórica de um dos mecanismos mais intrigantes da mecânica quântica: o efeito túnel.

A geração de energia elétrica em usinas nucleares, como as de Angra I e Angra II (acima), no sul do estado do Rio de Janeiro, é uma das alternativas vantajosas de suprimento de energia para um país como o Brasil, que detém reservas de urânio (o combustível dessas usinas) superiores a 300 mil toneladas. A radioatividade do urânio e dos radioelementos que o sucedem em uma espécie de cadeia radioativa natural é, por excelência, a propriedade nuclear de que se utiliza o técnico de campo na identificação e caracterização de ocorrências de urânio que possam se mostrar técnica e economicamente viáveis.

Efeito túnel e estabilidade nuclear

Desde o início do século 20, as transformações de um núcleo atômico em outro, fenômeno conhecido por radioatividade, têm sido objeto de importantes investigações teóricas e experimentais, bem como das mais diversas aplicações por físicos e químicos em todo o mundo. Por outro lado, a produção de novos elementos químicos além dos que ocorrem na natureza vem sendo também perseguida desde a década de 1940 e, mais recentemente, intensificaram-se os trabalhos em direção à produção de elementos superpesados.

Certas variedades de núcleos atômicos presentes na natureza – por exemplo, de urânio, tório, rádio e samário – são conhecidas por se desintegrarem espontaneamente, emitindo pequenas partículas nucleares que, em 1909, foram identificadas como sendo núcleos de átomos do gás hélio pelos físicos e químicos ingleses *sir* Ernest Rutherford (1871-1937) e Thomas Royds (1884-1955).

Essas partículas são conhecidas desde 1898 como ‘partículas alfa’. Vale acrescentar que, naquele mesmo ano, a transmutação nuclear (transformação de um núcleo em outro) recebeu o nome de ‘radioatividade’, dado pela física e química polonesa Marie Curie (1867-1934).

DESINTEGRAÇÃO ALFA. Urânio, tório, alguns de seus descendentes nas chamadas cadeias radioativas naturais (rádio, radônio e polônio, por exemplo) e alguns elementos das terras raras (neodímio, samário e gadolínio) possuem a propriedade de emitirem partículas alfa.

A grande maioria das espécies nucleares, no entanto, não exhibe o fenômeno da radioatividade alfa, ainda que o balanço de massa-energia favoreça sua ocorrência (ver ‘Balanço de massa-energia favorece emissão’). Esses núcleos são ditos estáveis com relação

à desintegração alfa – as variedades nucleares do chumbo, mercúrio, tungstênio e o ouro presentes na natureza são alguns poucos exemplos.

Foi somente na década de 1920, com o advento da mecânica quântica, que a radioatividade alfa pôde ser compreendida, a partir dos trabalhos pioneiros – e independentes – publicados em 1928 pelo físico russo George Gamow (1904-1968), bem como pelo físico norte-americano Edward Condon (1902-1974), juntamente com o físico inglês Ronald Gurney (1898-1953). Mais especificamente, foi através de um mecanismo quântico conhecido por efeito túnel que se ampliou a compreensão sobre esse fenômeno (ver ‘Barreira é transposta mesmo sem energia suficiente’).

FISSÃO ESPONTÂNEA. Duas décadas mais tarde, físicos nucleares experimentais em diferentes laboratórios no mundo passaram a observar o fenômeno conhecido por fissão espontânea, no qual o núcleo se divide em dois fragmentos de massas comparáveis. O urânio 238, bem como elementos mais pesados (transurânicos), são os melhores exemplos de núcleos que exibem esse fenômeno.

BALANÇO DE MASSA-ENERGIA FAVORECE EMISSÃO

O urânio 238 é um exemplo típico de elemento que se desintegra por emissão de partícula alfa. Seu núcleo é composto de 92 prótons ($Z=92$) e 146 nêutrons ($N=146$), sendo que a soma dessas partículas leva ao seu número de massa ($A=Z+N=238$) – na notação científica, simplificamos essas informações através do símbolo ${}_{92}^{238}\text{U}_{146}$.

O núcleo de urânio 238 desintegra-se por emissão de uma partí-

cula alfa – ou núcleo de hélio (${}^4_2\text{He}$) –, dando como produto o núcleo do elemento químico tório (${}^{234}_{90}\text{Th}$). Diz-se, então, que o núcleo ${}^{238}\text{U}$ é radioativo (ou instável) com respeito à emissão alfa.

A radioatividade do ${}^{238}\text{U}$ é em parte possível porque a massa do ${}^{238}\text{U}$ é maior do que a soma das massas do ${}^{234}\text{Th}$ e da partícula alfa, ou ainda, o balanço de massa-energia é favorável a que ocorra a desintegração.

>>>

BARREIRA É TRANSPOSTA MESMO SEM ENERGIA SUFICIENTE

Para entender o efeito túnel, faremos aqui uma analogia. Suponhamos, como na figura 1a, que uma pequena esfera rola (sem deslizar) com velocidade uniforme sobre uma superfície horizontal na qual se encontra uma barreira a ser transposta pela esfera.

Sendo T a energia cinética na superfície (devida ao movimento) e P a energia potencial no topo da barreira (devida, no caso, à posição), o nosso entendimento 'clássico' do fenômeno nos diz que a transposição da esfera da região I para a região II só será possível quando $T > P$. Caso contrário, o movimento da esfera ficará restrito à região I.

Entretanto, esse não é o caso quando usamos as idéias da mecânica quântica para descrever o movimento das partículas subatômicas. Aqui, esse movimento é descrito por uma onda associada à partícula, que

obedece a certa equação de onda – a chamada equação de Schrödinger, proposta em 1926 pelo físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961).

Com essa nova descrição, mostrou-se que há uma probabilidade p (pequena, é verdade, mas não nula) de

uma partícula transpor uma 'barreira de potencial' sem para isso ter energia cinética suficiente (figura 1b). Diz-se, nesse caso, que a partícula transpõe a barreira por efeito túnel (ou por tunelamento).

Ainda com base na figura 1b, o leitor com algum interesse em física e

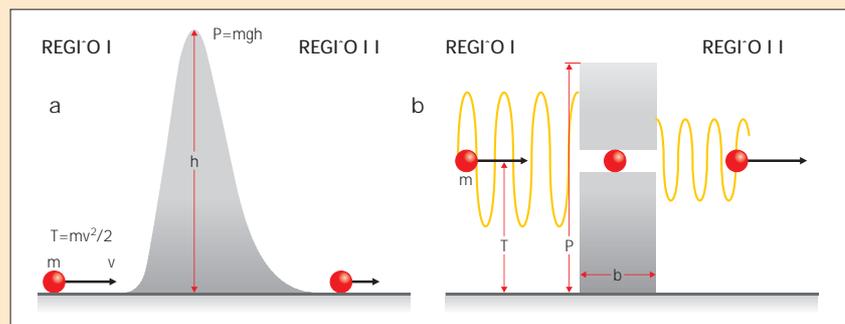


Figura 1. Em a, para vencer uma 'barreira de potencial' de altura h e chegar à região II, a energia cinética da esfera ($T=mv^2/2$) deverá ser maior do que a energia potencial ($P=mgh$) imposta pela barreira – m é a massa da esfera, v a velocidade e g a aceleração da gravidade. Em b, esquema mostra uma partícula subatômica de massa $\approx 10^{-27}$ kg e energia cinética $T \approx 10^{-12}$ joule atravessando uma 'barreira de potencial' de energia $P>T$ e largura $b \approx 10^{-14}$ m. Esse fenômeno, denominado efeito túnel (ou tunelamento) ocorre porque no mundo subatômico sempre há uma probabilidade (pequena, porém não nula) de que a partícula vença a barreira.

FIGURAS CEDIDAS PELO AUTOR

Normalmente, parte da energia total disponível para a fissão é gasta como energia de excitação dos próprios fragmentos. A fissão espontânea tem sido também descrita mediante o efeito túnel, em que a barreira de potencial a ser transposta tem, agora, uma forte componente nuclear atrativa, devido à força forte que age no núcleo para mantê-lo coeso, competindo com a componente repulsiva, relativa às cargas elétricas positivas dos fragmentos.

MODELO COMPARA NÚCLEO A GOTA LÍQUIDA

Por mais de 35 anos, Grupos de Física Nuclear que se sucederam no CBPF têm se ocupado de temas relacionados à estabilidade nuclear, os quais podem ser estudados pelo mecanismo quântico conhecido por efeito túnel.

O atual Grupo de Física Nuclear desenvolveu o modelo ELDM (sigla, em inglês, para Modelo Efetivo de Gota Líquida), que é capaz de descrever de uma maneira unificada as diferentes formas de radioatividade mencionadas

neste artigo, inclusive fornecendo previsões sobre a instabilidade nuclear e, portanto, sobre a existência – ainda que efêmera – de núcleos superpesados de $Z > 112$.

Finalmente, o efeito túnel tem sido também aplicado na identificação dos pares de fragmentos mais favoráveis para produção de elementos superpesados em reações nucleares de fusão fria, o processo inverso das desintegrações radioativas exóticas.

No entanto, há casos – e modos – de fissão nuclear em que os fragmentos são produzidos praticamente sem energia de excitação. Trata-se aqui da assim chamada 'fissão fria' (figura 3a), que vem sendo investigada durante os últimos dez anos, tanto do ponto de vista experimental quanto teórico.

RADIOATIVIDADE EXÓTICA. Em 1975, um grupo de físicos nucleares brasileiros, trabalhando no CBPF, anunciou a possibilidade de que núcleos atômicos pesados viessem a se desintegrar espontaneamente, emitindo fragmentos nucleares maiores do que a partícula alfa, porém bem menores do que os fragmentos da fissão ordinária – os trabalhos foram publicados nos *Anais da Academia Brasileira de Ciências* (vol. 47 n.3/4, p.567, 1975 e vol. 48, n.2, p. 205, 1976).

A verificação experimental dessa possível nova forma de radioatividade natural foi apresentada nove anos mais tarde por dois físicos ingleses da Universidade de Oxford, quando identificaram a emissão de carbono 14 pelo rádio 223 – o leitor interessado poderá obter mais informações sobre a com-

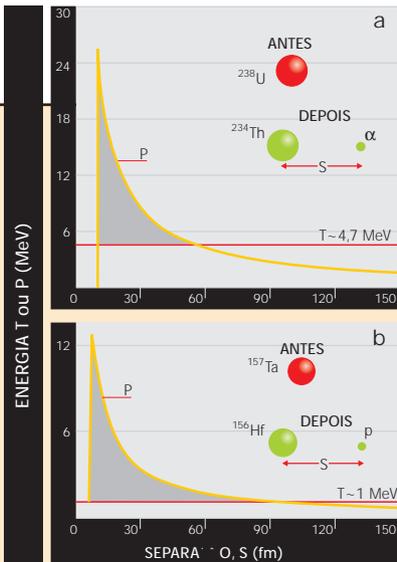


Figura 2. Em a, barreira de potencial para a desintegração do urânio 238 em tório 234 mais uma partícula alfa. A probabilidade de tunelamento é muito pequena ($p \approx 10^{-39}$). Em b, a probabilidade de tunelamento para o tântalo 157 decair em háfnio 156 emitindo um próton é bem maior que no caso anterior ($p \approx 10^{-21}$). As unidades para as grandezas dos eixos vertical e horizontal são, respectivamente, milhões de elétron-volt ($1\text{MeV}=1,6\times 10^{-13}$ joule) e milionésimos de bilionésimo de metro (ou $1\text{ fm} = 10^{-15}\text{ m}$).

um conhecimento básico de matemática poderá se aventurar ao cálculo da probabilidade (p) de uma partícula vencer a barreira de potencial. Isso é feito pela fórmula $p \approx 10^{-G}$, onde $G=7,7b\sqrt{m(P-T)}/h$, sendo $h=6,6\times 10^{-34}$ joule.s, também chamada constante de Planck, em homenagem ao físico alemão Max Planck (1858-1947).

Na radioatividade alfa e na desintegração por emissão de próton – esta última observada em um pequeno número de núcleos ricos em prótons –, a barreira de potencial a ser transposta é essencialmente criada pela repulsão eletrostática entre a carga positiva da partícula alfa (+2), ou a do próton (+1), e a carga positiva do núcleo residual, respectivamente, Z-2 (figura 2a) ou Z-1 (figura 2b).

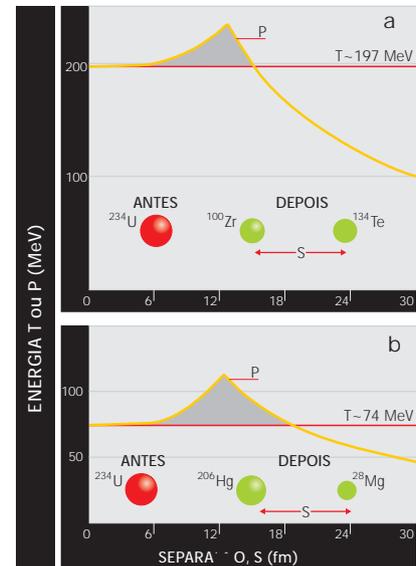


Figura 3. Em a, processo semelhante ao descrito na figura 2, porém agora para a fissão fria do urânio 234 produzindo zircônio 100 e telúrio 134. Em b, a desintegração exótica do urânio 234 em mercúrio 206 e magnésio 28. Em ambos os exemplos, a probabilidade de tunelamento é mínima, porém não nula ($p \approx 10^{-47}$). As unidades para as grandezas dos eixos vertical e horizontal são como na figura 2.

provação do fenômeno na revista científica inglesa *Nature* (vol. 307, n.19, p.207 e 245, 1984), bem como na revista de divulgação científica *Ciência Hoje* (vol. 3, n. 14, p. 18, 1984)).

Hoje, são conhecidos 18 casos da chamada ‘radioatividade exótica’, em que fragmentos de carbono 14, oxigênio 20, neônio 24, magnésio 28 e silício 34 podem ser emitidos de núcleos mais pesados que o chumbo ($Z=82$). O efeito túnel novamente aqui se aplica (figura 3b) para avaliar quantitativamente as taxas de desintegração e, conseqüentemente, prever possíveis novos casos de radioatividade (ver ‘Modelo compara núcleo a gota líquida’).

Recentemente, físicos e químicos nucleares tanto norteamericanos quanto russos relataram evidências experimentais da produção de elementos superpesados com número atômico acima de 112 ($Z>112$) (figura 4). Esse resultado foi possível graças, em parte, a previsões teóricas feitas com base no efeito túnel, as quais indicaram não só a via de produção, isto é, os pares de fragmentos mais favoráveis para obtenção de elementos superpesados em reações nucleares de fusão fria, como também o período de sobrevivência desses novos elementos. ■

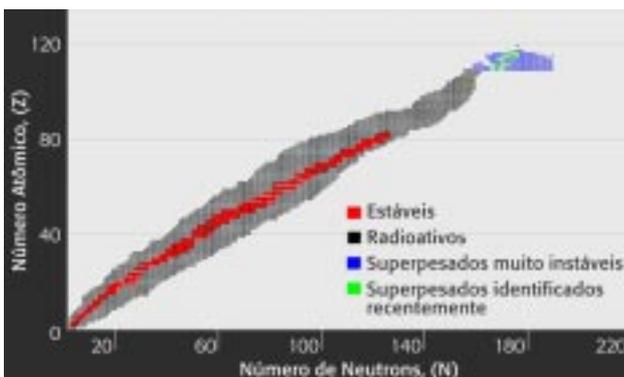


Figura 4. Mapa de núcleos atômicos. Um par de números – no caso, Z e N – define a localização de um núcleo no mapa.



Da esq. para dir.: Alejandro Dimarco, Odilon A. P. Tavares e Sérgio J. B. Duarte.