

Física IV - Aula 6 - Os Primórdios da Mecânica Quântica

A mecânica clássica foi desenvolvida ao longo de muitos séculos para descrever o comportamento da matéria e suas interações numa escala de energia familiar à nossa experiência cotidiana. Contudo, no final do século 19, cientistas se depararam com uma série de fenômenos, tanto em escalas astronômicas quanto microscópicas, que não podiam ser explicados pela mecânica newtoniana. O subsequente entendimento de tais fenômenos levou a duas das mais profundas revoluções nos conceitos fundamentais da física. Uma delas, já estudada em capítulos anteriores, culminou na teoria da relatividade. Enquanto que a outra, que será estudada neste e nos próximos capítulos, levou ao desenvolvimento da mecânica quântica.

Neste capítulo, vamos considerar os principais fenômenos que pouco a pouco ruíram os alicerces clássicos e como o seu entendimento levou a um novo paradigma para a física. É importante ressaltar desde o princípio de nossos estudos que os fenômenos relevantes aparecem sobretudo nas escalas atômicas e subatômicas, muito embora tenha repercu-

sões significativas no mundo macroscópico. Posto que nossa experiência diária está alheia a tal escala de comprimentos, não devemos esperar que a nossa intuição, que moldou os conceitos da física clássica, possa ser aplicada adequadamente em sua descrição. Consequentemente, muitos aspectos da mecânica quântica podem parecer contraintuitivos ou até mesmo paradoxais. Nas palavras do sábio Feynman, a mecânica quântica lida com a natureza como ela é: absurda.

1 - Catástrofe do Ultravioleta

Radiação térmica é radiação eletromagnética emitida pela superfície de um corpo em função de sua energia interna. Sabemos da experiência que se aquecermos um corpo, eventualmente, ele emitirá luz, inicialmente na região do vermelho, mas conforme aumentamos a temperatura, tal radiação desloca seu pico para comprimentos de onda cada vez menores, tornando-se amarela, branca e finalmente azul. Um emissor perfeito ou ideal também deve ser capaz de absorver toda a luz que incide sobre a sua superfície sem refletir nenhuma, portanto a temperaturas

baixas tal corpo deve ser perfeitamente negro. Denominamos, consequentemente, um emissor térmico ideal de **corpo negro** e a radiação por ele emitida de **radiação de corpo negro**.

A radiação térmica emitida espontaneamente por vários objetos pode ser descrita aproximadamente pela radiação de corpo negro, cujo **espectro**, distribuição da intensidade da radiação observada em um certo comprimento de onda ou frequência, pode ser determinado experimentalmente. Por exemplo, usando uma cavidade perfeitamente isolada em equilíbrio térmico à temperatura T , como um forno, que possua uma pequena abertura através da qual um feixe de radiação possa escapar.

No final do século 19, a emissão de radiação térmica por corpos negros já estava muito bem caracterizada experimentalmente. Contudo, do ponto de vista teórico a situação era desastrosa.

O equilíbrio térmico entre a radiação e o corpo negro pode ser entendido a partir das trocas de energia que ocorrem entre a radiação e os átomos da cavidade. Classicamente, podemos entender o processo de absorção e emissão de radiação por um átomo, considerando-o como um

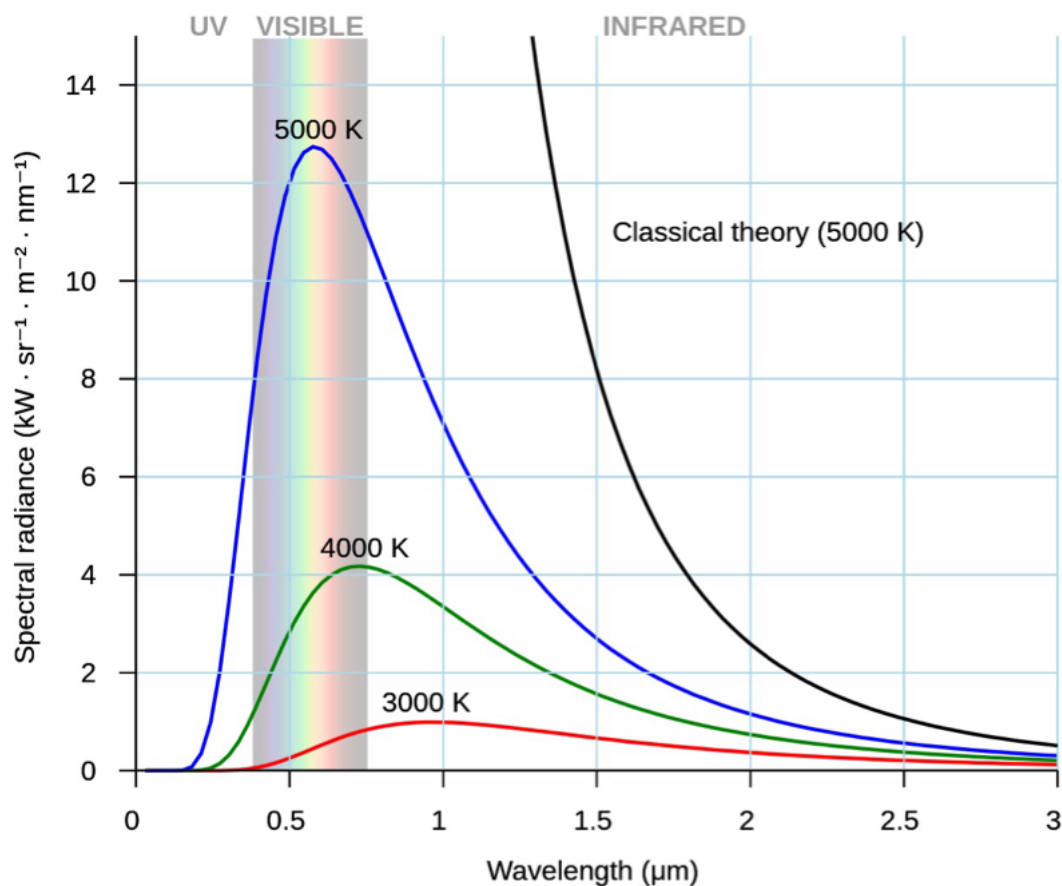
oscilador carregado. A incidência de ondas eletromagnéticas caracterizadas por uma frequência ν força então o sistema de cargas a oscilar com essa mesma frequência. Por sua vez como cargas aceleradas emitem ondas eletromagnéticas, a energia de oscilação do sistema de cargas pode ser reconvertida em radiação eletromagnética. Finalmente, invocando o **teorema da equipartição da energia**, que afirma que a energia em um sistema em equilíbrio termodinâmico deve ser dividida igualmente entre todos os seus graus de liberdade, Lorde Rayleigh e Sir James Jeans deduziram em 1900 a seguinte relação

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2c k_B T}{\lambda^4}, \quad (1)$$

conhecida como **lei de Rayleigh-Jeans**. Denotamos a constante de Boltzmann por k_B e a velocidade da luz, por c .

A relação (1) afirma que a **radiância espectral** B_{λ} , definida como a potência emitida por unidade de área, unidade de ângulo sólido e unidade de comprimento de onda, diverge para comprimentos de onda pequenos. Entretanto, a previsão teórica para a radiação de

corpo negro a partir de (1) não corresponde aos resultados experimentais.



Tão crítico quanto à disparidade com os dados experimentais, é a previsão teórica de que um corpo negro irradiaria uma quantidade infinita de energia! Como essa divergência é devida a comprimentos de ondas pequenos, ou

frequências elevadas, tal problema foi denominado **catástrofe do ultravioleta**.

Consequentemente, por ser incapaz de explicar os dados experimentais, bem como também violar a lei da conservação de energia, a lei de Rayleigh-Jeans expôs uma grave falha da física clássica. Max Planck foi o primeiro a perceber que hipótese feita na dedução da lei de Rayleigh-Jeans precisaria ser modificada para conseguir conciliar os resultados teóricos com as observações experimentais e com a conservação da energia. De fato,

Supomos implicitamente que os osciladores carregados, usados para descrever a troca de energia entre a radiação e os átomos da cavidade, poderiam absorver ou emitir luz em qualquer frequência $\nu \in \mathbb{R}$. Essa hipótese é uma consequência direta de uma das noções mais intrínsecas da física clássica: que a troca de energia (momento, momento linear, momento angular, etc.) ocorre de forma **contínua**, de forma que qualquer quantidade de energia poderia, em princípio, ser absorvida ou emitida por um átomo. De acordo com suas próprias palavras, Planck em "um ato de desespero" substituiu essa hipótese completamente intuitiva por outra puramente formal. A saber, ele supôs que os osciladores só poderiam absorver ou emitir energia em pacotes **discretos**, múltiplos de um certo **quantum de energia**:

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \cdot 2\pi\nu = \hbar\omega. \quad (2)$$

Em (2), h denota uma nova constante universal, denominada **constante de Planck**. Dimensionalmente,

$$[h] = [E]/[\nu] = [E] \cdot [t] \xrightarrow{\text{S.I.}} \text{J} \cdot \text{s},$$

correspondendo ao que é usualmente denominado **ação**. Numericamente,

$$h \simeq 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \simeq 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$h = \frac{h}{2\pi} \approx 6,582 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s} \approx 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}.$$

Para radiação eletromagnética visível de comprimento de onda $\lambda = 500 \text{ nm}$, temos $\nu = c/\lambda \approx 6 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$, que leva a $h\nu \approx 3,98 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, mostrando que a energia contida em um quantum é completamente desprezível na escala macroscópica. Contudo, ao compararmos com as energias típicas da escala atômica, da ordem de eV, $1 \text{ eV} \approx 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, temos que tal energia é $h\nu \approx 2,5 \text{ eV}$, que está longe de ser desprezível. Usando a constante de Boltzmann

$$k_B \approx 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$$

podemos estimar a ordem de grandeza da energia térmica $k_B T$. Para temperatura ambiente, $T \approx 300 \text{ K}$, $k_B T \approx 2,586 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$, ao passo que para temperaturas $T \approx 10^4 \text{ K}$, a energia térmica $k_B T \approx 1 \text{ eV}$.

Sob a hipótese de transferência quantizada de energia, Planck obteve uma expressão para irradiância espectral

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \quad (3)$$

compatível tanto com os dados experimentais, quanto com a conservação da energia. É o fator de Boltzmann $e^{-E/k_B T}$, correspondente à probabilidade de

se encontrar um sistema com energia $E = h\nu$, que suprime exponencialmente a possibilidade de trocas de energia quando $h\nu \gg k_B T$ e evita a catástrofe do ultravioleta.

A hipótese ad hoc de Planck pode ser convenientemente formulada como um novo postulado da física:

Postulado 1 : " Toda entidade física que possuir apenas um grau de liberdade que execute um movimento harmônico simples deve admitir apenas estados caracterizados por energias E que satisfaçam a relação

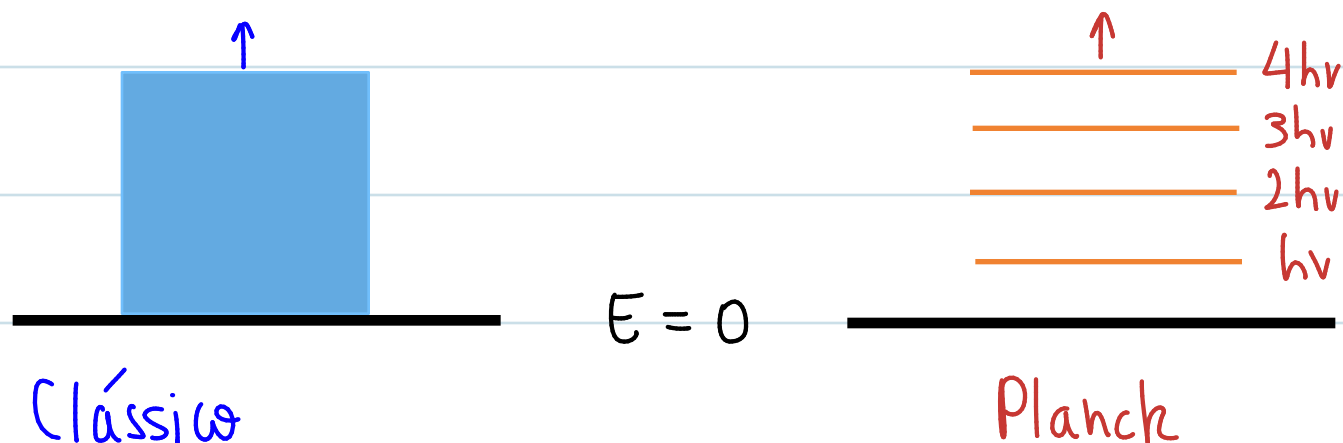
$$E = n h \nu, \quad n \in \mathbb{N},$$

em que ν representa a frequência de oscilação e h , uma constante universal. "

Graus de liberdade que executam movimentos harmônicos simples são extremamente abundantes na física, alguns exemplos são : o comprimento de uma mola oscilante, o ângulo do braço de um pêndulo e a amplitude

de uma onda.

Um diagrama representando os níveis de energia disponíveis para um dado sistema constitui uma forma conveniente de contrastar o comportamento previsto pelo postulado de Planck com o classicamente esperado. Em tais diagramas, representamos os possíveis estados energéticos do sistema por linhas horizontais, cuja distância à linha de energia zero corresponde à energia do dado estado. Classicamente, um sistema pode exibir qualquer energia entre zero e infinito, de forma que o diagrama de níveis de energia clássico deve corresponder a um contínuo de linhas justapostas de zero ao infinito. Por outro lado um sistema que obedeça ao postulado de Planck pode apenas ocupar um conjunto discreto de energias $E \in \{0, 1h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots\}$, indicando que o diagrama de níveis de energia correspondente deve corresponder a um conjunto de linhas igualmente espaçadas.



Dizemos que os sistemas que satisfazem o postulado de Planck estão **quantizados**. Os estados de energia permitidos são denominados **estados quânticos** e o respectivo número $n \in \mathbb{N}$ é chamado de **número quântico**.

Sistemas oscilantes macroscópicos como pêndulos, por exemplo, indicam, contudo, uma óbvia violação do postulado de Planck. Tal contradição é apenas aparente, pois o valor de $\hbar$ é demasiadamente pequeno para que a separação entre os níveis energéticos possa ser trivialmente observada em sistemas mecânicos macroscópicos, tornando, pois a distribuição discreta dos níveis energéticos efetivamente indistinguível de uma contínua. Posto em outras palavras, a escala de energia na qual efeitos quânticos são observáveis (ditada por $\hbar$) é demasiadamente pequena quando comparada com a escala de energias usualmente encontradas em sistemas macroscópicos. Essa observação sugere que para reduzirmos as expressões quânticas a suas contrapartes clássicas é necessário tomar o limite $\hbar \rightarrow 0$.

Exercício 1: " Um pêndulo composto por uma massa de $0,01 \text{ Kg}$ suspensa por um fio de $0,1 \text{ m}$ de comprimento é colocado para oscilar atingindo um ângulo

máximo de 0,1 radianos com a vertical. A diminuição da energia observada devido, por exemplo, à resistência do ar, é contínua ou discreta?"

A radiação de corpo negro possui uma importante aplicação tecnológica no desenvolvimento de **pirômetros**, sensores remotos para determinar a temperatura de uma superfície. De fato, ao relacionar a irradiância espectral com a temperatura e o comprimento de onda, a lei de Planck permite que determinemos a temperatura T_2 de uma superfície comparando sua irradiância espectral a um dado comprimento de onda λ com a de um objeto de referência a temperatura T_1 . Assim, ao medirmos experimentalmente a razão

$$\frac{e^{hc/\lambda k_B T_1} - 1}{e^{hc/\lambda k_B T_2} - 1}$$

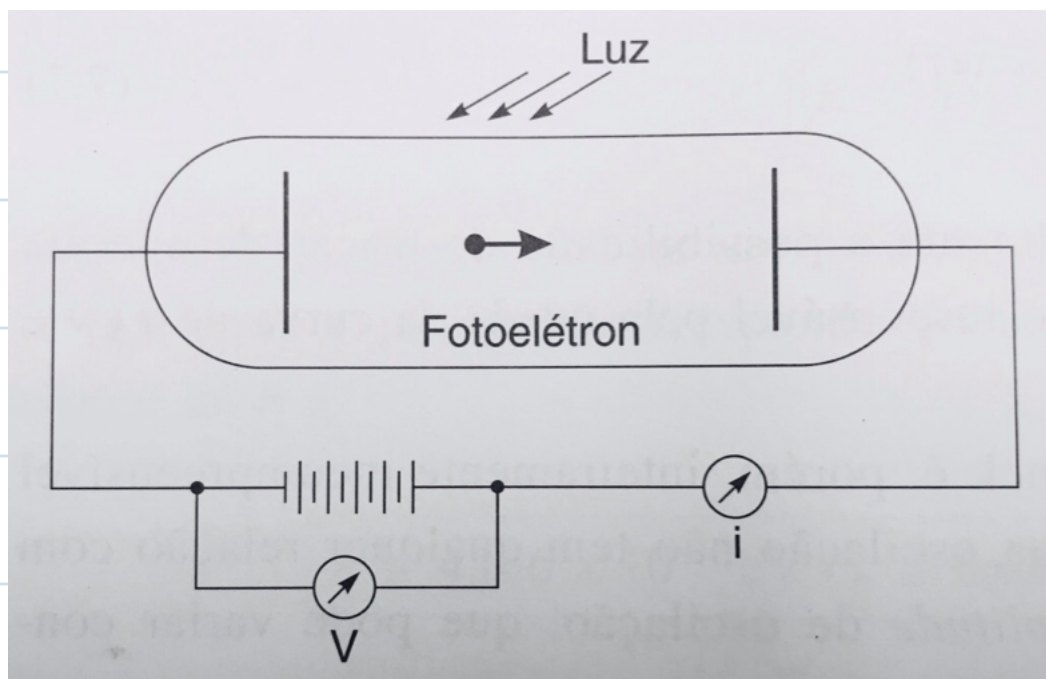
podemos determinar a temperatura T_2 . Naturalmente, como a maioria das fontes não são corpos negros perfeitos, a maioria dos pirômetros não utiliza radiação monocromática, mas sim uma faixa finita de frequências.

Na década de 1950, Dicke, Penzias e Wilson detectaram com radiotelescópios uma radiação eletromagnética extremamente isotrópica na faixa das microondas com perfil de corpo negro e temperatura característica de 3K.

Essa radiação denominada **radiação cósmica de fundo** é uma das principais evidências mais importantes em favor da teoria do Big Bang e permite inferir muitas das propriedades do universo primordial.

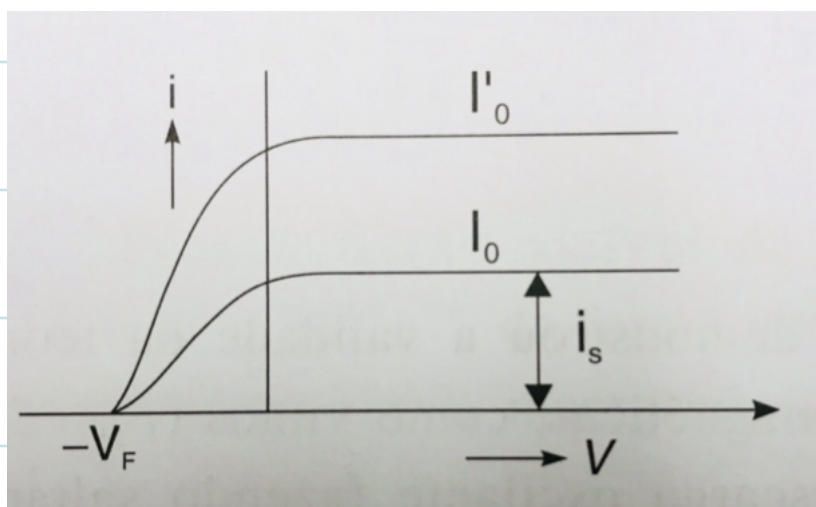
2- O efeito fotoelétrico

Em 1887, durante os experimentos que culminariam com a comprovação experimental da eletrodinâmica de Maxwell, Heinrich Hertz observou que ao incidir luz com frequência suficientemente alta sobre placas metálicas, elétrons eram emitidos. Tal fenômeno, denominado **efeito fotoelétrico**, foi posteriormente estudado por Lenard, que em 1902 descobriu uma série de características peculiares e inexplicáveis do ponto de vista clássico.



O aparato experimental usado por Lenard consistia de um par de eletrodos dentro de uma câmara de quartzo na qual era feito vácuo. Ao se estabelecer uma diferença de potencial

V entre os eletrodos e iluminando o catodo com luz de frequência ν e intensidade I_0 , mede-se a corrente elétrica i através de um amperímetro.

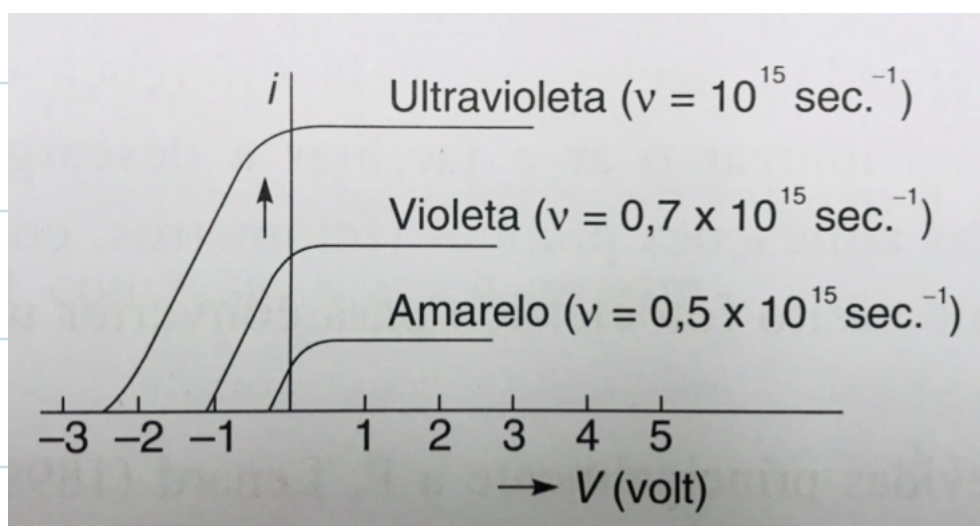


Os resultados de um experimento realizado para uma intensidade de luz I_0 e frequência ν fixas com respeito a um catodo de um dado material revelam que todos os elétrons arrancados do catodo são coletados pelo anodo quando a diferença de potencial V é positiva, correspondendo a uma corrente de saturação i_s . Invertendo a polaridade entre os eletrodos é possível frear os elétrons para assim determinar a energia cinética com a qual eles são ejetados do catodo pela luz incidente. De fato, conforme tornamos a diferença de potencial mais negativa, diminui a intensidade da corrente até que ela se anula no chamado **potencial de freamento** $V = -V_F$, $V_F > 0$.

Resta sabermos o que acontece quando variamos as demais grandezas físicas relevantes: intensidade da luz, frequência da luz e mate-

rial do catodo. Lenard descobriu que se ele aumentasse a intensidade da luz incidente de I_0 para I_0' , apenas a intensidade da corrente de saturação i_s aumentaria proporcionalmente. Tanto o perfil da curva quanto o potencial de freamento permaneceriam inalterados. Com isso, ele pôde concluir que apenas a intensidade da corrente, ou seja, o número de elétrons arrancados dependia da intensidade da luz incidente.

Já ao variar a frequência da luz incidente, Lenard percebeu que apesar de o perfil da curva ainda permanecer imutável, tanto a intensidade da corrente de saturação i_s quanto o potencial de freamento V_F aumentavam à medida que se iniciava luz de frequências mais elevadas.



Mais interessante, ele reparou que existia uma frequência limiar, denominada frequência de corte, ν_c , abaixo da qual nenhum elétron seria

emitido por mais que se aumentasse a intensidade da luz incidente. A figura acima se aplica a catodos de metais alcalinos, como o potássio,

para os quais o efeito fotoelétrico ocorre com luz visível, deixando de ocorrer já com radiação infravermelha. Para a maioria dos metais, contudo, é necessário empregar ondas na região do ultravioleta para se ter fotoemissão. Dessa forma, fica claro que tanto a dependência do potencial de freamento com a frequência da luz incidente, quanto a frequência de corte são características próprias do material com o qual o catodo é feito.

As conclusões que Lenard chegou através de seus experimentos:

- (i) Existência de uma frequência de corte ν_c , abaixo da qual não há fotoemissão;
- (ii) Aumento do potencial de freamento V_F e consequente aumento da energia cinética dos fotoelétrons com o aumento da frequência ν da luz incidente;
- (iii) Aumento apenas do número de elétrons fotoemitidos com o aumento da intensidade I_0 da luz incidente;

como veremos a seguir estão em sério desacordo com as previsões da física clássica.

Claramente, a produção de uma corrente elétrica pela incidência de luz só pode ocorrer se a luz de alguma forma fornecer energia suficiente para arrancar um elétron da superfície do cátodo. A energia mínima necessária para ejetar um elétron da superfície de um material é denominada **função trabalho** W e, assim como a frequência de corte, é uma característica do material empregado. Valores típicos de W são da ordem de poucos eV. Por outro lado, para frear um elétron com energia cinética

$$T = \frac{m_e}{2} v^2 \quad (4)$$

é necessário empregar uma diferença de potencial tal que:

$$T + (-e)V = 0 \Rightarrow eV = T, \quad (5)$$

em que $-e$ denota a carga do elétron. Assim, ao encontrarmos experimentalmente o potencial necessário para parar todos os fotoelétrons, V_F , descobrimos a energia cinética máxima com a qual os elétrons são ejetados do cátodo:

$$T_M = eV \Rightarrow \frac{1}{2} m_e v_M^2 = eV. \quad (6)$$

Consequentemente, da conservação da energia, temos que a energia E fornecida pela luz é dada por:

$$E = W + T_M = W + eV_F. \quad (7)$$

Vimos anteriormente neste curso que, do ponto de vista clássico, uma onda eletromagnética transporta uma quantidade de energia diretamente proporcional à sua intensidade I_0 , independente de sua frequência ν . Similarmente ao discutido no tratamento clássico da radiação de corpo negro, uma onda eletromagnética pode transferir qualquer fração de sua energia para os elétrons do cátodo, ao colocá-los em oscilação forçada. Portanto, classicamente, deveríamos observar que conforme aumentássemos I_0 , aumentaríamos E e, devido a (7), também V_F . Contudo, não foi isso que o trabalho de Lenard revelou.

Em 1905, Einstein ciente do trabalho de Lenard propôs uma nova teoria para a luz cujas consequências para o efeito fotoelétrico poderiam ser experimentalmente testadas. Ele resolveu estender as ideias revolucionárias de Planck sobre a quantização da energia emitida ou absorvida por átomos para as ondas de luz.

O conceito de quantização da energia, originalmente proposto por Planck, restringia-se ao processo de absorção e emissão de luz pelos átomos de um corpo negro. Em particular, Planck acreditava firmemente que as ondas eletromagnéticas uma vez irradiadas se espalhavam pelo espaço exatamente como ondas na água. Einstein por sua vez propôs que a

energia irradiada por átomos estaria concentrada em pacotes ou quanta de luz, posteriormente denominados **fótons**.

Seu argumento era baseado na premissa de que os experimentos usuais de difração e interferência de ondas eletromagnéticas eram realizados em regimes que envolviam um número muito grande de fótons. De forma que seus resultados corresponderiam a médias sobre os comportamentos de fótons individuais. Naturalmente, os fótons não deveriam se mover como partículas clássicas, mas sim de alguma forma que permitisse a emergência de comportamentos ondulatórios, como interferência e difração, ao considerarmos tais médias.

Concentrando-se no caráter corpuscular da luz, Einstein percebeu que a hipótese de Planck sobre as frequências de oscilação dos átomos serem discretas, i.e., $\{0, h\nu, 2h\nu, \dots\}$, requeria que no processo de decaimento do estado com energia $nh\nu$ para o estado $(n-1)h\nu$, um pacote discreto de energia eletromagnética $h\nu$ deveria ser emitido. Einstein ainda supôs que esse pacote de energia inicialmente localizado em uma pequena região do espaço continuaria localizado conforme se afastasse da fonte à velocidade da luz. Além disso, ele postulou que a energia do fóton dependeria apenas de sua frequência na forma:

$$E = h\nu. \quad (8)$$

Finalmente, no processo de fotoemissão um fóton seria completamente absorvido pelo cátodo.

Aplicando essas ideias na equação (7), obtemos:

$$h\nu = eV_F + W. \quad (9)$$

Com isso podemos explicar teoricamente as três principais propriedades do efeito fotoelétrico observadas por Lenard.

(i) Existência de uma frequência de corte: se o potencial de freamento $V_F = 0$, temos que

$$h\nu_0 = W,$$

indicando que um fóton de frequência ν_0 fornece apenas a energia necessária para ejetar o elétron do cátodo, não sobrando nenhuma parcela para ser convertida em energia cinética. Assim, se reduzirmos a frequência dos fótons incidentes abaixo de ν_0 não será possível fornecer energia suficiente para arrancar um fotoelétron, independente do número de fótons envolvidos.

(ii) Aumento do potencial de freamento com o aumento da frequência da luz incidente: basta usarmos (9) para explicarmos trivialmente esse

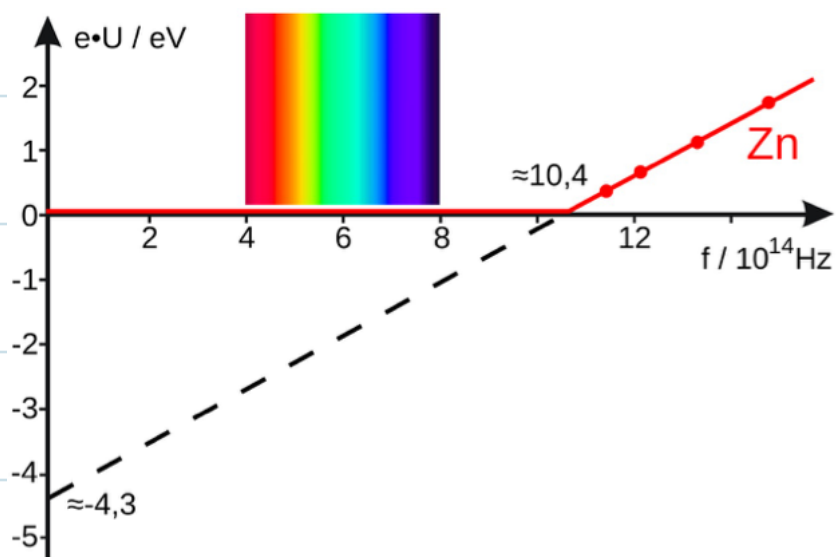
comportamento.

(iii) Aumento do número de fotoelétrons com o aumento da intensidade da luz incidente: duplicar a intensidade da luz incidente apenas dobra o número de fótons incidentes e consequentemente duplica a corrente fotoelétrica. Como aumentar a intensidade da luz emitida não altera sua frequência, a energia de carregada por cada fóton permanece a mesma e o processo descrito por (7) não se altera.

Além de explicar os resultados experimentais de Lenard a teoria de Einstein prevê uma relação linear entre o potencial de freamento V_F e a frequência ν :

$$V_F = \frac{h}{e} \nu - \frac{W}{e} \quad (10)$$

Posteriormente, em 1916, Milikan comprovou experimentalmente que a previsão de Einstein



estava correta ao verificar a validade da relação (10) para diversos metais como sódio e lítio. Ademais, ao estimar o coeficiente linear de (10), ele obteve uma estimativa independente da constante

de Planck, que por concordar muito bem com os valores obtidos através dos experimentos envolvendo corpos negros, corroborou a validade da hipótese de Planck. Tais trabalhos renderam o prêmio Nobel de física a Einstein em 1921 e a Milikan, em 1923.

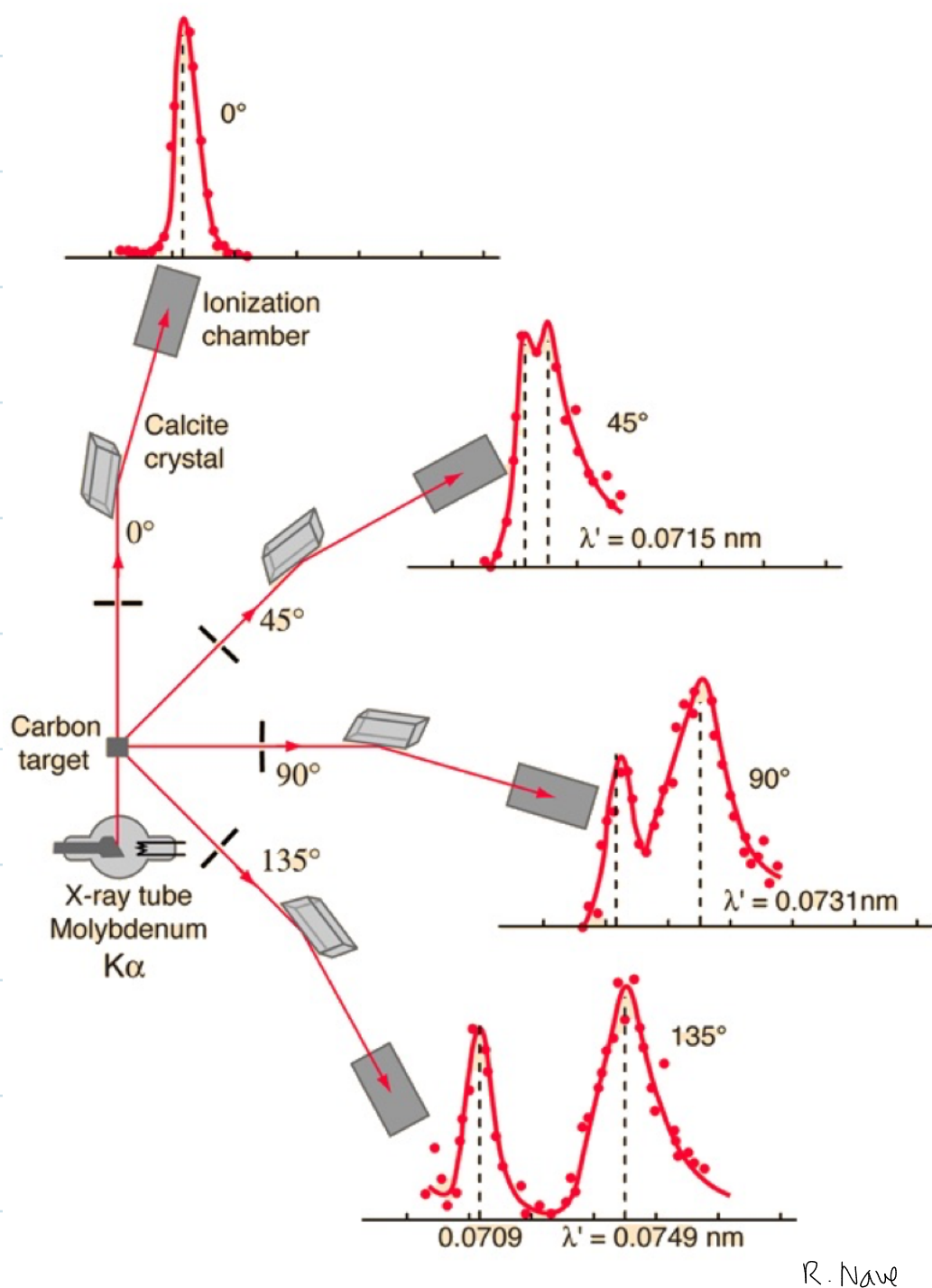
Exercício 2: "Sabendo que a frequência de corte para o sódio é $\nu_c = 5,6 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$, determine o valor da função trabalho para o sódio."

É importante notar que os fótons são absorvidos no processo de fotoemissão de elétrons. Tal fato só é compatível com a conservação do quadrimomento, se o elétron estiver inicialmente preso de alguma forma ao átomo ou ao sólido que compõem o catodo. Posto que é necessária uma massa grande quando comparada a do elétron, como a do átomo ou sólido, para que o sistema absorva uma quantidade significativa de momento sem alterar consideravelmente o seu estado energético. Em outras palavras o efeito fotoelétrico só é possível devido à presença de uma partícula adicional que sofre um recuo negligível em virtude de sua massa ser muito maior do que a do elétron.

O efeito fotoelétrico possui diversas aplicações tecnológicas. Dentre elas destacam-se os **fotomultiplicadores**, dispositivos usados para detectar luz de baixíssima intensidade. Seu funcionamento é baseado no uso de fotocátodos com baixíssimas funções trabalho, em geral, combinações de materiais como célio, rubídio e antimônio, de forma que devido ao efeito fotoelétrico, correntes fotoelétricas possam ser geradas mesmo por luz de baixa intensidade e frequência. Tal corrente é então amplificada para se tornar detectável. Fotomultiplicadores são essenciais para a instrumentação de experimentos de física de partículas, nuclear e astronômicos. Eles também são empregados em medicina diagnóstica para testes de sangue e diversos exames envolvendo imagens. Além disso, eles são utilizados em dispositivos de visão noturna.

3- O Efeito Compton

Mais evidências corroborando o comportamento corpuscular da radiação eletromagnética foram obtidas experimentalmente entre 1919 e 1923 por Compton. Ele considerou o espalhamento de raios x monocromáticos por um alvo de grafita para diversos ângulos. Os resultados para a intensidade dos raios x espalhados em função



do comprimento de onda λ para diferentes direções revelaram a presença de dois picos. O primeiro, em um comprimento de onda λ_0 correspondente ao da radiação incidente, foi detectado em todas as direções. Já o segundo, detectado principalmente a altos ângulos, indicava a presença de radiação de comprimento de onda $\lambda' > \lambda_0$, dependendo da direção de observação. A diferença entre o comprimento de onda incidente

é o do segundo pico observado :

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0$$

(11)

é denominada deslocamento de Compton.

A presença de ondas com comprimento λ_0 pode ser facilmente explicada classicamente pelo oscilador de Hertz. De fato, o campo elétrico da onda incidente oscila com

uma frequência $\nu_0 = c/\lambda_0$, forçando os elétrons dos átomos de carbono presentes no alvo de grafita a oscilarem com a mesma frequência ν_0 . Como cargas aceleradas irradiam ondas eletromagnéticas com a frequência de sua oscilação em todas as direções, explicamos a presença dos picos referentes ao comprimento de onda λ_0 nos experimentos de Milikan. Contudo, não é possível, a partir desse mecanismo clássico, explicar a presença de ondas com comprimento $\lambda' > \lambda_0$.

Para explicar tais resultados, Compton levou às últimas consequências a hipótese de Einstein de que a luz, no caso os raios x, era composta por uma coleção de fótons com energia $E = h\nu$. Tais fótons então colidiriam com os elétrons do alvo como bolas de bilhar. Numa dessas colisões, um fóton transferiria uma parcela de sua energia para um dos elétrons do alvo, de forma que ao final do processo ele teria uma energia $E' < E$ e consequentemente seria caracterizado por uma frequência

$$\nu' = \frac{E'}{h} < \frac{E}{h} = \nu,$$

correspondendo ao comprimento $\lambda' = c/\nu' > \lambda_0$.

Consideremos em detalhes a colisão entre um fóton e um elétron de um átomo de carbono no alvo de grafita. O fóton é uma partícula com massa de repouso nula, que se movimenta à velocidade da luz. Consequentemente,

seu quadrimomento é dado por:

$$\tilde{p}_\gamma = \frac{E_\gamma}{c} (1, u_0), \quad (12)$$

em que $u_0 \in \mathbb{R}^3$ representa a direção de propagação dos raios x incidentes.

Por hipótese, a energia de um fóton correspondendo a um raio x de frequência ν_0 é $E_\gamma = h\nu_0$. Portanto, da equação (12), temos:

$$\tilde{p}_\gamma = h \frac{\nu_0}{c} (1, u_0) = \frac{h}{\lambda_0} (1, u_0). \quad (13)$$

Considerando que a frequência da radiação espalhada também não dependia do material com que o alvo era feito, Compton concluiu que o espalhamento não podia envolver os átomos como um todo, mas apenas os elétrons mais externos. Ele também supôs que os espalhamentos, além de um fóton como caracterizado anteriormente, envolviam um elétron **livre** e em **repouso**. Para justificar tais hipóteses, Compton recorreu ao fato de que a energia de um fóton em um raio x é várias ordens de grandeza maior do que a de um fóton ultravioleta. Por outro lado, das discussões acerca do efeito fotoelétrico, sabemos que a energia de um fóton ultravioleta é comparável à energia mínima necessária para se arrancar um elétron de um metal. Assim, a energia de ligação seria desprezível e o elétron

Se comportaria como se estivesse livre.

Consideremos, pois, uma colisão entre um fóton e um elétron livre em repouso conforme a figura abaixo. Um fóton incidente com quadrimomento

$$\tilde{p}_{\gamma_0} = \frac{E_{\gamma_0}}{c} (1, u_0)$$

colide com um elétron livre em repouso, descrito pelo quadrimomento $\tilde{p}_0 = (m_0 c^2, 0)$,

resultando em um fóton espalhado a um ângulo θ descrito pelo quadrimo-

mento $\tilde{p}_{\gamma} = \frac{E_{\gamma}}{c} (1, u)$ e em um elétron espalhado a um ângulo φ com quadrimomento $\tilde{p} = (\frac{E}{c}, p)$. Aplicando a conservação do quadrimomento:

$$\tilde{p}_{\gamma_0} + \tilde{p}_0 = \tilde{p}_{\gamma} + \tilde{p}, \quad (14)$$

obtemos o seguinte sistema de equações:

$$E_{\gamma_0} + m_0 c^2 = E_{\gamma} + E \quad (15)$$

$$\frac{E_{\gamma_0}}{c} u_0 + 0 = \frac{E}{c} u + p \quad (16)$$

Lembrando que

$$\tilde{p}^2 = -m^2 c^2 \Rightarrow -\frac{E^2}{c^2} + \|p\|^2 = -m c^2$$

temos que a energia do elétron espalhado satisfaz:

$$E^2 - \|p\|^2 c^2 = m_0 c^4. \quad (17)$$

Assim, rearranjando a equação (15)

$$E = (E_{\gamma_0} - E_{\gamma}) + m_0 c^2$$

e tomando o seu quadrado

$$E^2 = (E_{\gamma_0} - E_{\gamma})^2 + 2m_0 c^2 (E_{\gamma_0} - E_{\gamma}) + m_0 c^4$$

obtemos:

$$\|p\|^2 c^2 = E^2 - m_0 c^4 = (E_{\gamma_0} - E_{\gamma})^2 + 2m_0 c^2 (E_{\gamma_0} - E_{\gamma}). \quad (18)$$

Por outro lado, a equação (16) fornece:

$$\|p\|c = (E_{\gamma_0} u_0 - E u),$$

quadrando-a e utilizando que $u \cdot u_0 = \cos \theta$, obtemos:

$$\|p\|^2 c^2 = E_{\gamma_0}^2 + E_{\gamma}^2 - 2E_{\gamma_0} E_{\gamma} \cos \theta \quad (19)$$

Finalmente, substituindo a equação (19) na (18), obtemos:

$$(E_{\gamma_0} - E_{\gamma}) m_0 c^2 = E_{\gamma_0} E_{\gamma} (1 - \cos \theta)$$

$$\Rightarrow \frac{c}{E_{\gamma}} - \frac{c}{E_{\gamma_0}} = \frac{1 - \cos \theta}{m_0 c}. \quad (20)$$

Empregando a relação de Einstein para a energia de um fóton em função do comprimento da onda associada:

$$\frac{c}{E_\gamma} = \frac{\lambda}{h}$$

Concluimos que a dependência angular do deslocamento Compton é dada por:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta). \quad (21)$$

A constante $\frac{h}{m_0 c}$, em que m_0 denota a massa de repouso do elétron corresponde numericamente a:

$$\lambda_c := \frac{h}{m_0 c} \simeq 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m} \simeq 0,0243 \text{ \AA}$$

e é denominada **comprimento de onda Compton do elétron**.

A equação (21) descreve adequadamente os dados observados experimentalmente. Experimentos posteriores detectaram o recuo que o elétron sofria durante o espalhamento, confirmando as previsões teóricas sobre a energia do elétron e a direção (φ) de espalhamento. Também foi determinado experimentalmente que o elétron de recuo e o fóton espalhado emergem simultaneamente.

Exercício 3: "Determine a energia e direção do elétron de recuo no espalhamento Compton em função das energias e direção dos fótons envolvidos."

Para justificarmos plenamente o tratamento do efeito Compton como uma colisão entre duas partículas, resta explicarmos a presença do pico com o mesmo comprimento da onda incidente. Para tanto, precisamos reconsiderar uma de nossas hipóteses. A saber, de que o elétron envolvido na colisão é livre. Tal hipótese segue da premissa que, muito embora o elétron esteja preso ao átomo, a energia cinética recebida pelo elétron durante a colisão é muito maior do que a energia de ligação. Contudo, se o elétron estiver fortemente ligado ao núcleo ou se a energia do fóton incidente for muito pequena, existe uma chance de que o elétron não seja ejetado do átomo. Nesse caso, podemos considerar que a colisão ocorre entre um fóton e um átomo. De forma que, a massa relevante nesse processo é a massa M do átomo. Como $M \gg m_0$, $M \simeq 22000 m_0$ no caso do carbono, o deslocamento Compton é desprezível e o fóton espalhado emerge com essencialmente a mesma frequência do fóton incidente.

Portanto, no espalhamento Compton, alguns fótons são espalhados por elétrons que estão fracamente ligados ao átomo e são ejetados durante a colisão, de forma que o comprimento de onda desses fótons aumenta.

Por outro lado, alguns fótons colidem com elétrons que permanecem ligados aos seus átomos após a colisão. Tais fótons mantêm o seu comprimento de onda inalterado.

Exercício 4: "Determine o deslocamento Compton para colisões com elétrons que não são ejetados e estime a sua ordem de grandeza para um alvo de grafita."

O espalhamento Compton possui diversas aplicações tecnológicas, de uma forma geral, elas se aproveitam basicamente das seguintes propriedades:

(i) O número de fótons espalhados é proporcional ao número de elétrons ou densidade eletrônica do alvo. De forma que, estudando o espectro de energias a partir do espalhamento Compton é possível determinar a distribuição eletrônica do alvo.

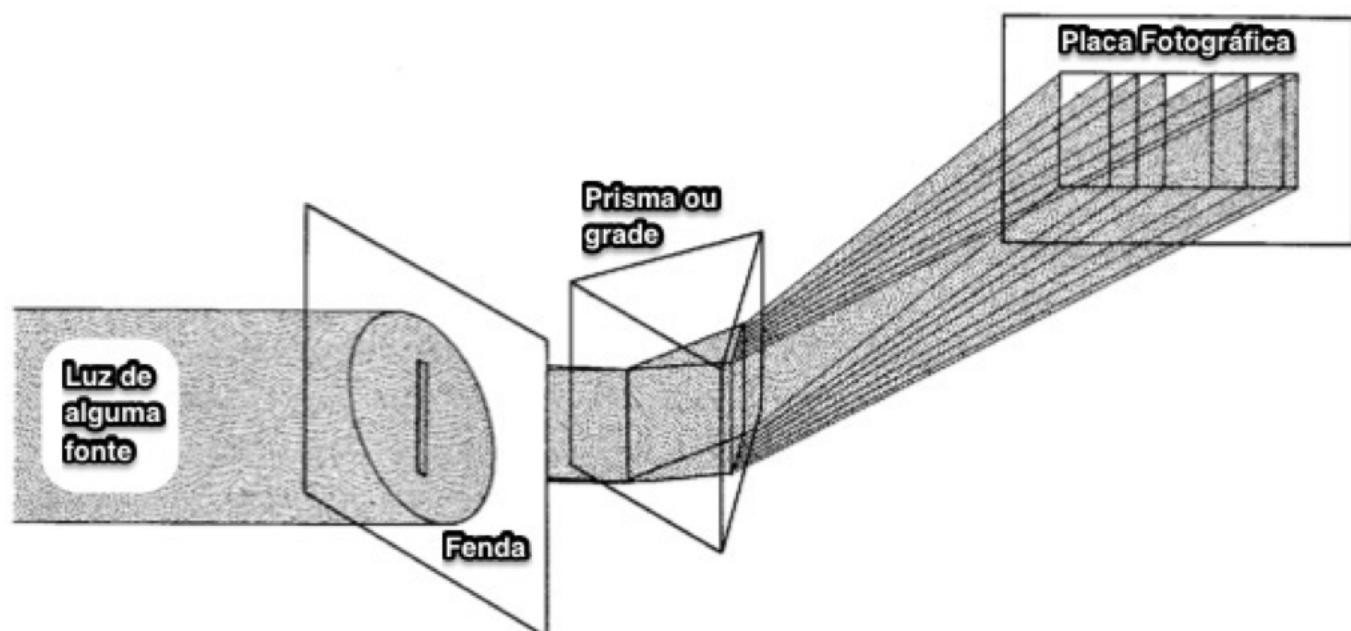
(ii) Como a fórmula para o deslocamento Compton foi deduzida a partir da hipótese de elétrons livres, o espectro do espalhamento Compton carrega muita informação sobre o alvo espalhador, cuja reconstrução leva a uma

imagem do alvo denominada perfil de Compton. A partir do perfil de Compton é possível obter dados sobre as ligações químicas e a estrutura do material que compõe o alvo.

A densitometria de espalhamento Compton é uma técnica empregada para determinar a densidade eletrônica de amostras com aplicações industriais na metalurgia e na agricultura. Já a produção de imagens por espalhamento Compton encontra aplicações na medicina diagnóstica e em radioterapia.

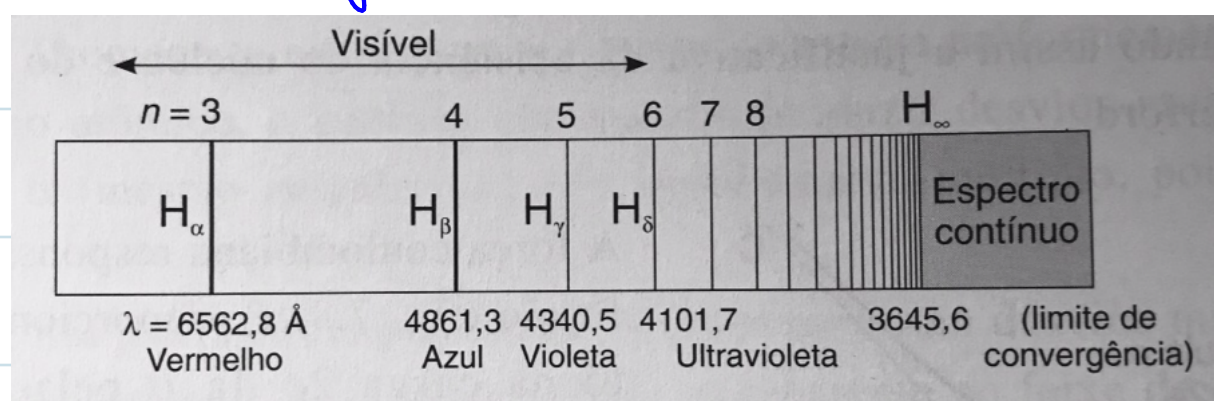
4 - Espectros Atômicos

Assim como em corpos negros, é possível estudar o espectro de emissão de radiação eletromagnética por átomos livres. Um aparato



típico para realizar tal medição consiste de uma fonte de luz que é colimada por uma fenda e separada em comprimentos de onda por um prisma ou uma grade de difração. A luz é gerada por meio de uma descarga elétrica em um recipiente contendo algum gás monoatômico. Devido a colisões com elétrons ou com outros átomos, durante a descarga elétrica, alguns átomos são **excitados**, ou seja, promovidos a um estado de maior energia. Ao retornarem para seu estado normal, de menor energia, a energia excedente é emitida como radiação eletromagnética.

Contudo, diferentemente do que se observa em um corpo negro, por exemplo, cujo espectro de emissão é contínuo, a radiação emitida por átomos livres é concentrada em um conjunto discreto de comprimentos de onda. Por exemplo, o espectro de emissão do hidrogênio atômico (H , não H_2) tem a seguinte forma:



Tais linhas são denominadas **linhas espectrais** e seu formato é devido à forma da abertura (fenda) do espectroscópio. Em 1859, Kirchhoff e Bunsen investigaram o espectro emitido por diversos átomos e chegaram à conclusão de que o **espectro de emissão**, ou seja, o conjunto de comprimentos de onda para os quais há uma linha espectral, é uma característica individual de cada átomo.

Esse último fato é de extrema importância prática, porque torna a espectroscopia uma técnica muito útil na identificação dos componentes químicos presentes em um objeto. Por esse motivo um esforço experimental gigantesco foi feito para se determinar com muita precisão os espectros atômicos. Vale notar que diferentemente do hidrogênio, o espectro da maioria dos átomos é composto por centenas de linhas.

Analisando o espectro do hidrogênio, verificamos que o espaçamento em comprimento de onda entre linhas espectrais adjacentes decresce monotonicamente conforme diminuimos o comprimento de onda até convergir para zero em torno de $\lambda \approx 3645,6 \text{ \AA}$. Interessantemente, a partir desse ponto de acumulação, o espectro se torna contínuo.

Essa notável regularidade no espectro do hidrogênio, fez com que muitos cientistas procurassem por uma fórmula empírica que descrevesse a posição das linhas. Em 1885, Johann Balmer encontrou uma fórmula que com grande precisão (dentro de 0,02%) reproduzia as posições das linhas:

$$\lambda_n = C \left(\frac{n^2}{n^2 - 4} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots, \quad (22)$$

em que C é uma constante, que Balmer fixou como:

$$C = 3645,6 \text{ \AA}.$$

Assim, λ_3 correspondia à linha H_α , λ_4 a linha H_β e assim por diante até que tomando o limite $n \rightarrow \infty$, teríamos a posição da linha H_∞ sobre o ponto de acumulação.

Esse sucesso fomentou uma busca por outras fórmulas empíricas que pudessem ser aplicadas na descrição de algum subconjunto de linhas de outros elementos. De particular importância foi o trabalho de Rydberg, que em torno de 1890 concluiu que seria mais conveniente apresentar tais resultados em termos de inversos de comprimentos de onda. Em particular, a série de Balmer

assume a seguinte forma:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots, \quad (23)$$

em que

$$R_H = 4/c \simeq 109,677 \text{ cm}^{-1}$$

é denominada **constante de Rydberg para o hidrogênio**. Por exemplo, para o hidrogênio são usadas as seguintes fórmulas para a descrição das linhas

espectrais:

- ⊗ Série de Lyman : $\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, \dots$ ultravioleta
- ⊗ Série de Balmer : $\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots$ ultravioleta e visível
- ⊗ Série de Paschen : $\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, \dots$ infravermelho
- ⊗ Série de Brackett : $\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 5, 6, \dots$ infravermelho
- ⊗ Série de Pfund : $\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 6, 7, \dots$ infravermelho

Todas essas fórmulas são da forma:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m+1, m+2, \dots \quad (24)$$

e são casos particulares de uma regra geral associada ao **princípio de combinação**

de Rydberg e Ritz, que afirma que linhas espectrais sempre podem ser representadas como a diferença entre dois termos espectrais:

$$\frac{1}{\lambda_{21}} = T_2 - T_1 \quad (25)$$

de forma que se duas frequências $\nu_1 = \frac{c}{\lambda_1}$ e $\nu_2 = \frac{c}{\lambda_2}$ aparecerem em um espectro, a sua soma $\nu_1 + \nu_2$ e diferença $|\nu_1 - \nu_2|$ também deve aparecer.

Até agora discutimos o que é chamado de **espectro de emissão** de um elemento, um conceito correlato, que esclarecemos a seguir, é o de **espectro de absorção** de um elemento. Para medi-lo, emprega-se um aparato similar ao exibido no início desta seção com apenas duas diferenças. Primeiramente, uma fonte capaz de emitir um espectro contínuo deve ser usada e um compartimento transparente contendo o gás a ser analisado deve ser inserido após a fonte. Após a exposição, o resultado é um filme fotográfico que não foi sensibilizado apenas em um conjunto discreto de linhas, indicando que um certo conjunto discreto de frequências foi absorvido pelos átomos do gás. Interessantemente, para cada linha espectral no espectro de absorção de um elemento, há uma linha correspondente (com o mesmo comprimento de onda) no espectro de emissão. Através da análise dos espectros de absorção é possível determinar a composição química de estrelas.

5 - Átomo de Bohr

Os resultados espectroscópicos discutidos na seção anterior claramente não são compatíveis com o modelo clássico de emissão de luz monocrômica baseado no oscilador de Hertz, que só é capaz de emitir radiação de frequência ν e seus harmônicos. Logo, era necessário encontrar um novo modelo atômico que fosse capaz de descrever adequadamente todas as séries espectrais.

Por outro lado, os resultados experimentais de Rutherford deixaram claro que um átomo era composto por um núcleo cuja massa era aproximadamente igual à do átomo inteiro e cuja carga correspondia ao produto do **número atômico** Z pela carga elementar do elétron rodeado por Z elétrons. Muito embora, esses resultados clarificassem a neutralidade da matéria, restavam sérias questões sobre a estabilidade de tal sistema. Modelos nos quais os elétrons estão em repouso com relação ao núcleo são facilmente descartados em função do **teorema de Earnshaw** que garante a inexistência de equilíbrio estático em sistemas sobre os quais atuam apenas forças eletrostáticas. De forma que em tais modelos, os elétrons necessariamente cairiam no núcleo sob a ação da força coulombiana, resultando em um átomo cujo raio deveria corresponder ao do núcleo, que, como

Sabemos por diversos experimentos, é muito menor do que o raio atômico.

Uma forma ingênua de se evitar o teorema de Earnshaw consiste em contrabalancear a força centrípeta coulombiana com uma força centrífuga devida a um movimento circular dos elétrons ao redor do núcleo, justamente como planetas em órbita ao redor de uma estrela. Contudo, essa proposta também apresenta uma dificuldade insuperável no contexto da física clássica. De fato, em qualquer órbita circular, um elétron estará se movimentando com uma aceleração não nula. Ora, qualquer carga acelerada deve irradiar e, por conseguinte, perder energia. Como o raio de uma órbita depende da energia cinética, essa perda contínua de energia forçaria o elétron a espiralar em direção ao núcleo, levando também ao colapso do átomo. Para órbitas com dimensões atômicas, esse colapso ocorre em menos do que 10^{-9} s! Portanto, é impossível explicar a mera existência de átomos apenas com a mecânica clássica.

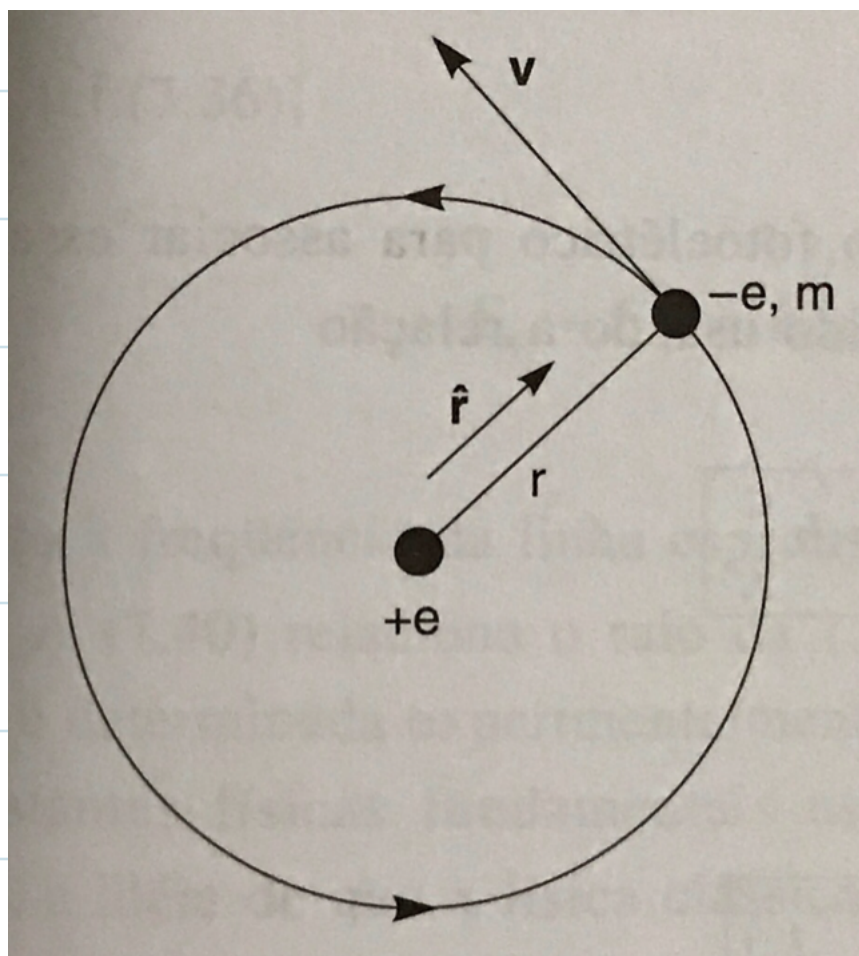
Niels Bohr propôs em 1913 um modelo extremamente simples para a estrutura atômica. Ele resolveu interpretar os resultados de Rutherford para o átomo mais simples, o hidrogênio, à luz das ideias de Planck e Einstein sobre quantização levando em consideração os dados espectroscópicos.

O modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio mistura conceitos da física clássica com ideias genuinamente quânticas. Assim, apesar de partir da premissa clássica de que o elétron orbita o núcleo em decorrência da atração coulombiana, Bohr resolve o problema da estabilidade simplesmente postulando que o elétron se encontra em um **estado estacionário** que viola uma das previsões do eletromagnetismo clássico, a saber de que cargas aceleradas irradiam.

O problema de um elétron orbitando um próton no átomo de hidrogênio sob a ação de uma força central (força coulombiana) é completamente análogo ao problema de Kepler envolvendo dois corpos ao admitirmos que o elétron não irradia. Assim, sabemos que, de uma forma geral, a órbita do elétron deve ser uma elipse com o centro de massa do sistema em um de seus focos. Para simplificar a análise, Bohr supôs que a órbita seria circular e que a massa do elétron, por ser muito menor do que a do próton, poderia ser desprezada, de forma que o próton se encontrasse no centro do círculo.

Seja então $r \in \mathbb{R}_+^*$ o raio da órbita circular e $v \in \mathbb{R}$, a velocidade

com a qual o elétron a percorre. Como estamos lidando com uma força



central, sabemos que o momento angular $L \in \mathbb{R}$ se conserva e por isso a velocidade v deve ser constante:

$$L = m r v. \quad (26)$$

Logo, a aceleração do elétron deve ser puramente centrípeta:

$$a_l = -\frac{v^2}{r} e_r. \quad (27)$$

A única força que atua nesse sistema

é a atração coulombiana entre o elétron e o próton:

$$|F| = -\frac{q^2}{r^2} e_r, \quad (28)$$

em que introduzimos a quantidade

$$q^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (29)$$

para maior clareza do raciocínio. Portanto temos que

$$\begin{aligned} |F| = m a_l &\Rightarrow -\frac{q^2}{r^2} = -\frac{m v^2}{r} \\ &\Rightarrow m v^2 = \frac{q^2}{r} \end{aligned} \quad (30)$$

A seguir calculamos a energia mecânica total do elétron em uma

órbita circular ao redor do núcleo. Para tanto, precisamos definir o zero da energia potencial. Nesse caso é mais conveniente tomar $V(r) \xrightarrow{\|r\| \rightarrow \infty} 0$, ou seja, o elétron tem energia potencial nula quando se encontra infinitamente afastado do núcleo. Logo, a energia potencial $V(r)$ pode ser obtida integrando-se o trabalho realizado pela força coulombiana para se trazer o elétron do infinito até a posição $r \in \mathbb{R}^3$:

$$V(r) = \int_{\infty}^r dp \frac{q^2}{p^2} = - \frac{q^2}{r}$$

em que o sinal negativo indica que é necessário fornecer energia para levar o elétron ao infinito espacial. Já a energia cinética é simplesmente,

$$T = \frac{mv^2}{2}.$$

Consequentemente, usando (30), concluímos que:

$$E = T + V(r) = \frac{mv^2}{2} - \frac{q^2}{r} = \frac{q^2}{2r} - \frac{q^2}{r} = - \frac{q^2}{2r} \quad (31)$$

Quando o átomo emite luz, uma parcela de sua energia tem que ser convertida na energia do fóton, que, de acordo com Einstein, depende da frequência ν da seguinte maneira:

$$\Delta E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}. \quad (31)$$

Bohr associou essa variação de energia com uma variação do raio da

órbita, que passaria de r_i para r_f com $r_i > r_f$:

$$\Delta E_{i \rightarrow f} = E_i - E_f = -\frac{q^2}{2r_i} - \left(-\frac{q^2}{2r_f} \right) = \frac{q^2}{2} \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_i} \right). \quad (32)$$

Portanto,

$$\Delta E = \Delta E_{i \rightarrow f} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{q^2}{2hc} \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_i} \right). \quad (33)$$

que tem exatamente a mesma estrutura que as fórmulas empíricas para as linhas espectrais. Comparando a equação (33) com a (24), inferimos que :

$$\frac{q^2}{2hc r_n} = \frac{R_H}{n^2}, \quad (34)$$

ou seja, que os raios das órbitas são dados por :

$$r_n = n^2 a_0, \quad n \in \{1, 2, \dots\} \quad (35)$$

em que :

$$a_0 = \frac{q^2}{2hc R_H} = \frac{e^2}{8\pi \epsilon_0 hc R_H} \quad (36)$$

é denominado **raio de Bohr** e corresponde ao raio da menor órbita

permitida ($n=1$). Consequentemente, a energia associada à órbita n é:

$$E_n = - \frac{q^2}{2h^2 a_0}, \quad n \in \{1, 2, \dots\} \quad (37)$$

e a frequência da linha espectral emitida na transição entre as órbitas n e m é:

$$E_n - E_m = h\nu_{n \rightarrow m} = \frac{q^2}{2a_0} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (38)$$

A equação (36) relaciona o raio de Bohr com a constante de Rydberg que é determinada experimentalmente. Contudo, é possível relacionar a_0 com outras constantes fundamentais da física. A ideia é considerar o limite do átomo de Bohr no qual os fenômenos quânticos deixam de ser importantes, conhecido como **limite clássico** ou **princípio da correspondência**. Bohr concluiu que tal limite correspondia ao limite de números quânticos n grandes e com isso obteve:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m q^2} = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}. \quad (39)$$

Numericamente,

$$a_0 \approx 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} \approx 0,529 \text{ \AA}$$

Comparando a equação (39) com a (36) é possível obter o valor da constante de Rydberg independentemente

$$R_H = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 c h^3} \approx 109600 \text{ cm}^{-1}$$

em ótimo acordo com o valor determinado experimentalmente.

Exercício 5: " Usando o princípio da correspondência demonstre a equação (39). "

Uma consequência importante da equação (35) :

$$r_n = n^2 a_0, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

é que apenas um conjunto discreto de órbitas está disponível para o elétron no átomo de Bohr. Essa **regra de seleção** foi obtida ao identificarmos a expressão (33) com a fórmula de Balmer. Seria possível explicar teoricamente esse fato? Bohr reconheceu que a equação (35) deveria ser o reflexo da quantização de alguma

grandeza física, mas que quantidade seria essa?

Sabemos que no problema de Kepler a energia e o momento angular são duas quantidades conservadas. A equação (37) já estabelece a quantização da energia, sugerindo então que a grandeza relevante seja de fato o momento angular. Podemos calcular o quadrado do momento angular L_n do elétron na órbita de raio r_n usando as equações (26), (30) e (39), obtemos:

$$\begin{aligned} L_n^2 &= m^2 v^2 r_n^2 = m q^2 r_n = m q^2 n^2 a_0 = \hbar^2 n^2 \\ \Rightarrow L_n &= n\hbar, \quad n \in \mathbb{N} \end{aligned} \tag{40}$$

A equação (40) indica que a regra de seleção para os raios das órbitas eletrônicas deve ser uma consequência da **quantização do momento angular**.

É conveniente para um melhor entendimento do modelo atômico de Bohr, bem como de suas limitações, coletar todas as hipóteses fundamentais empregadas em sua dedução sob a forma de postulados. Postulado I - Estados Estacionários: "Existe no átomo um conjunto discreto de estados estacionários."

Postulado II - Condição de Quantização de Bohr: " Os estados estacionários são aqueles que satisfazem a condição de quantização do momento angular, i.e., $L_n = n\hbar$, $n \in \mathbb{N}$. "

Postulado III - Condição de Frequência de Bohr: " Quando um elétron passa de um estado estacionário de energia E_n para um estado estacionário de energia E_m , a diferença de energia corresponde à emissão (se $E_n > E_m$) ou à absorção (se $E_n < E_m$) de um fóton com frequência $\nu_{n \rightarrow m} = |E_n - E_m|/h$. "

Alguns comentários são pertinentes. O primeiro postulado remove o problema da estabilidade de um sistema composto por um elétron orbitando um próton, posto que, apesar de considerar que tais estados estacionários são órbitas circulares obtidas pela resolução da equação de Newton, ele afirma que esses estados são **estáveis** pois os elétrons não irradiam de acordo com o eletromagnetismo clássico. O estado estacionário de menor energia, correspondendo a $n=1$, é denominado **estado fundamental**. Esse estado é genuinamente estacionário no sentido clássico do termo, pois o átomo pode permanecer indefinidamente no estado fundamental.

Podemos, de fato, considerar os estados excitados, aqueles com $n > 1$, estacionários, pois o período de revolução do elétron em uma órbita é da ordem de 10^{-14} s , ao passo que a "vida média" para emissão de radiação é tipicamente da ordem de 10^{-8} s . Portanto, o elétron deve percorrer um grande número de revoluções antes de decair.

O segundo postulado introduz a noção de quantização. É importante enfatizar que diferentemente da condição de Planck para a quantização da energia de um sistema sob a ação de forças harmônicas:

$$E_n = nh\nu, \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\},$$

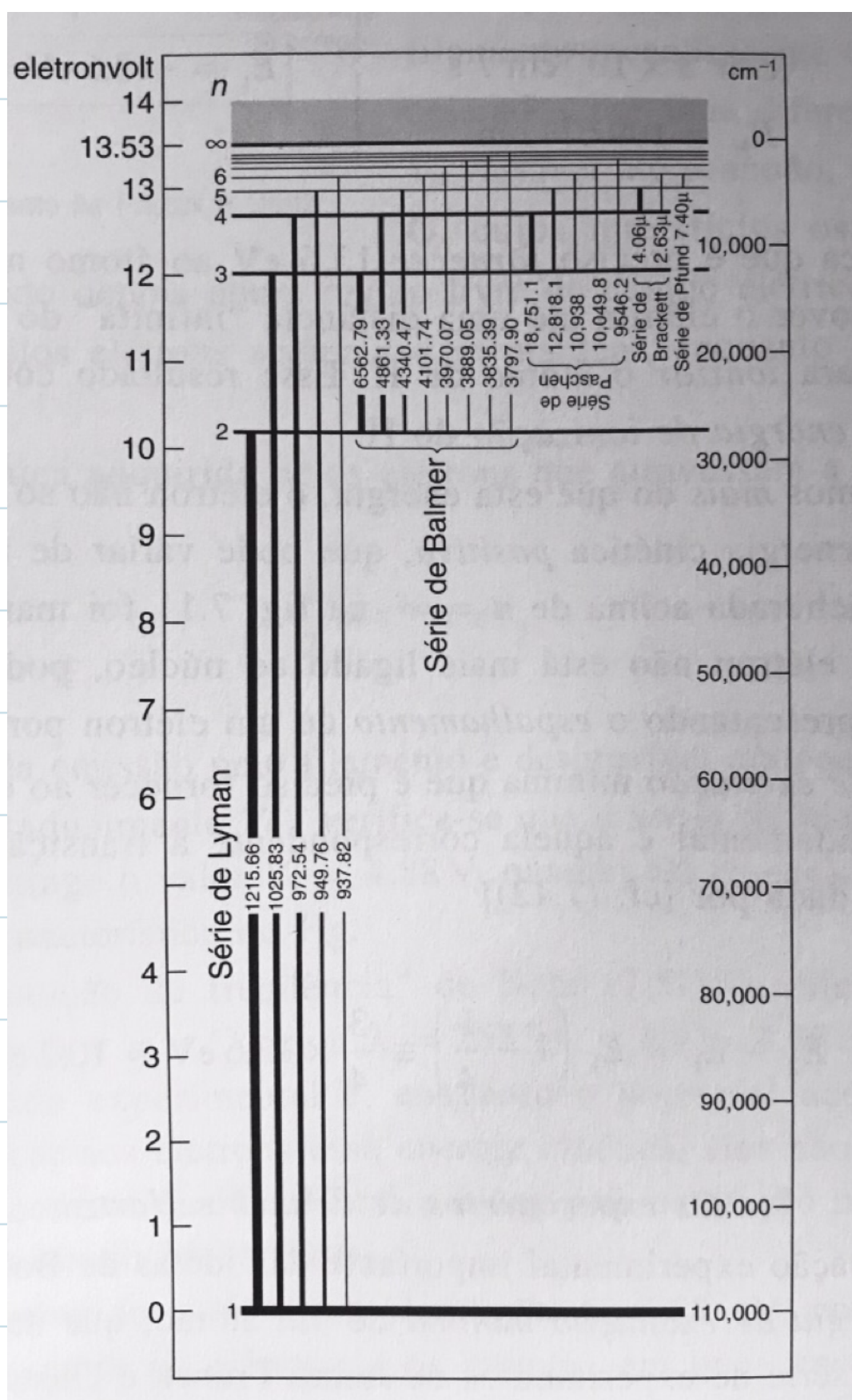
que admite um estado com energia nula, a condição de quantização do momento angular de Bohr

$$L_n = \hbar n, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

leva a uma quantização da energia

$$E_n = -\frac{q^2}{2n^2 a_0}, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

que não admite estados com energia nula. O quarto postulado simplesmente compatibiliza o modelo atômico com os dados espectroscópicos ao empregar o postulado de Einstein sobre a energia carregada por um fóton.



Finalmente, um dos grandes sucessos do modelo atômico de Bohr foi em explicar de uma maneira extremamente simples todos os dados espectroscópicos para o átomo de hidrogênio, antes descritos apenas pelas fórmulas empíricas e complicadas de Balmer e Paschen.

Notadamente, as séries de Lyman, Brackett e Pfund ainda não haviam sido descobertas quando Bohr desenvolveu o seu modelo. De forma que

tais séries constituíam previsões do modelo de Bohr que foram verificadas experimentalmente posteriormente.

A escolha que fizemos para o zero de energia implica que a energia

do estado fundamental é dada por :

$$E_1 = - \frac{q^2}{2a_0} = - c h R_H \approx -13,6 \text{ eV}.$$

Logo, é necessário fornecer uma energia de 13,6 eV para remover o elétron do átomo, ou seja, ionizá-lo. Esse resultado está em excelente acordo com os valores experimentais para a energia de ionização do átomo de hidrogênio. Qualquer energia adicional fornecida ao elétron será convertida em energia cinética. Como a energia cinética não é quantizada, explicamos a região contínua no espectro do átomo de hidrogênio. Nessa região, o sistema deixa de estar ligado e se reduz ao espalhamento de um elétron por um próton.