

Quantização de Energia

(texto inspirado e adaptado de M@I, 4ª ed., seções 8.1, 8.2 e 8.4)

No mundo macroscópico, a luz possui diferentes propriedades, como a reflexão, a refração ou a dispersão. Mas todas essas propriedades resultam da interação entre a luz e a matéria composta de átomos: a luz é refletida numa superfície, que é composta de átomos, com os quais a luz incidente interage; na refração, a luz interage com o meio refringente, isto é, com suas moléculas constituintes, ao longo do caminho; na dispersão, em uma gota de água, por exemplo, o feixe de luz interage com as moléculas de água. A interação da luz com os átomos e moléculas exige um modelo para a luz, construído a partir da tentativa de interpretação de diferentes resultados experimentais, em que a mesma é composta por um conjunto de partículas denominadas “quantum” (ou “quanta”, no plural).

Atualmente, descrevemos a luz por um modelo em que o feixe de luz é composto de muitas partículas de luz, chamadas “fótons”. Um fóton é uma partícula que possui apenas energia cinética – sua energia de repouso é nula. Um fóton nunca está parado: podemos pensar no fóton como um pacote de energia que se desloca com a rapidez da luz. Ao absorver um fóton, um átomo ganha energia; se isso ocorre, toda a energia do fóton é transferida para o objeto, e o fóton desaparece. Ao contrário, um objeto pode perder energia através da emissão de um fóton, que corresponde a uma quantidade específica de energia.

Níveis de energia eletrônica nos átomos

Uma das descobertas mais fascinantes do início do século XX foi a seguinte: a energia interna de um átomo isolado não pode ter qualquer valor (como nos sistemas macroscópicos em que podemos, com um chute, colocar uma bola em movimento com a rapidez que desejarmos). A energia interna de um átomo apresenta valores discretos bem específicos, e somente estes — chamados de “níveis” de energia. Um exemplo de níveis separados de energia é o da energia “eletrônica” associada ao movimento de elétrons em torno do núcleo do átomo. Você provavelmente aprendeu em seu curso de química que os níveis de energia dos elétrons são discretos – os únicos estados ligados estáveis de um sistema núcleo+elétron possuem valores bem definidos de energia cinética +potencial ($K+U$). (Estados ligados são os estados em que uma partícula não é capaz de se afastar indefinidamente da outra: elas se afastam e se aproximam periodicamente, pois não há energia suficiente para o afastamento.) Os níveis de energia eletrônica do hidrogênio atômico podem ser vistos na Figura 1. (O **hidrogênio atômico** é um único átomo de H, composto de um próton e um elétron. Não confundir com a **molécula de hidrogênio**, que é a molécula diatômica usual, H_2).

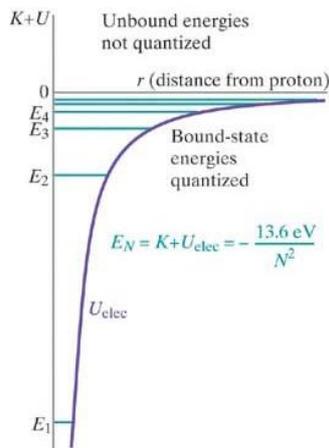


Figura 1 Níveis eletrônicos para o átomo de hidrogênio. A curva de energia potencial descreve a energia potencial do sistema elétron-próton como função da distância de separação entre eles.

A Figura 1 mostra a curva de energia potencial para o sistema próton-elétron (um átomo de hidrogênio). Note a semelhança com a curva de energia potencial gravitacional para um sistema Terra-foguete (ou Terra-corpo do exemplo da semana passada, em que o corpo era lançado com energia equivalente à que você consome diariamente). Tanto a força gravitacional quanto a força elétrica decaem com o inverso do quadrado da distância, portanto, a forma das curvas que representam sua energia potencial em função da distância, no caso da atração, é a mesma: aumenta com o afastamento entre os objetos.

Na mesma figura estão apresentados, através de linhas horizontais, as energias dos estados ligados estáveis para o átomo de hidrogênio. Não se observam estados ligados estáveis para outros valores de $K+U$. Somente os estados não ligados ($K+U > 0$), em que o próton e o elétrons se afastam indefinidamente, não são quantizados.

A energia potencial elétrica de um par próton-elétron ligados no átomo de hidrogênio é negativa para qualquer separação:

$$U_{elétrica} = -K \frac{e^2}{r},$$

em que K é uma constante, e a carga do próton ou do elétron e r a distância entre eles. A mecânica quântica é a teoria que descreve o movimento na situação de quantização das energias dos sistemas. Ela prevê uma equação para os níveis de energia dos elétrons no átomo de hidrogênio:

$$E_v = K + U_{elétrica} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{v^2}, \text{ com } v = 1, 2, 3, \text{ etc}$$

(eV é uma unidade de energia, adequada para as energias atômicas). Esse arranjo dos níveis de energia do hidrogênio foi confirmado por observações experimentais da interação da luz com o hidrogênio.

Níveis de energia vibracional dos átomos de um sólido

Temos trabalhado com um modelo para os sólidos que é constituído de uma rede de átomos interligados por molas. Vamos rever as bases desse modelo, levando em conta a “quantização” dos níveis de energia dos átomos.

Um sistema massa-mola macroscópico pode ter qualquer valor de energia na região colorida da Figura 2. Isso quer dizer que a amplitude A pode ter qualquer valor possível, nessa mesma região. Podemos escrever para a energia a expressão $E = \frac{1}{2}k_s A^2$, pois na distensão máxima $x = \pm A$ e a energia cinética é zero, portanto a soma das energias cinética e potencial, $K+U$, neste instante, é apenas a energia potencial. Do ponto de vista macroscópico, clássico, a amplitude pode assumir qualquer valor em um contínuo de valores.

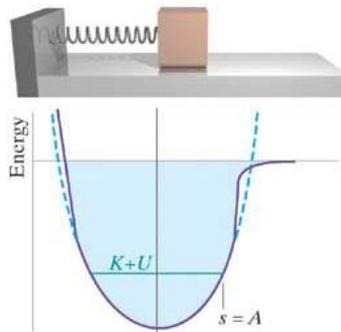


Figura 2 Um oscilador harmônico clássico (Sistema massa-mola) pode vibrar com qualquer amplitude, e pode, portanto, ter qualquer energia. $K+U$ do sistema pode ter qualquer valor, na região em azul.

Utilizando as equações da mecânica quântica, que descrevem a energia mecânica (cinética + potencial) para um oscilador harmônico, verifica-se que a energia do movimento harmônico é quantizada (ver Figura 3, abaixo), e a diferença de energia entre os níveis de energia é dada por:

$$\Delta E = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k_s}{m}} = \hbar \sqrt{\frac{k_s}{m}},$$

em que h é a constante de Planck, igual a $6.6 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Note que $\sqrt{\frac{k_s}{m}}$ é a frequência “angular” ω_0 da oscilação.

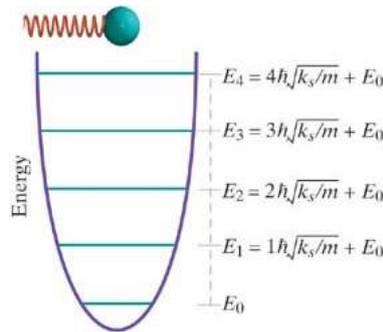


Figura 3 Um oscilador harmônico quântico só pode ter algumas energias muito específicas, que estão indicadas por linhas horizontais no gráfico. Essa curva de energia potencial representa a situação próxima do fundo do “poço” de uma energia potencial real (com energia negativa).

Os níveis de energia vibracional são dados por

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}, \text{ (o nível de energia mais baixa)}$$

$$E_1 = E_0 + 1\hbar\omega_0$$

$$E_2 = E_0 + 2\hbar\omega_0$$

e assim por diante. E_0 é chamado de *energia de ponto zero*, menor energia que um sistema quântico pode ter, e será abordado em cursos mais avançados.

A distância entre os níveis de energia adjacentes é sempre a mesma, $\hbar\omega_0$, o que é confirmado através de medidas experimentais. Isto é uma peculiaridade do oscilador harmônico quantizado, e é muito diferente do que ocorre com os níveis de energia do átomo de hidrogênio.

É importante compreender que tanto no quadro quântico quanto no quadro clássico, a frequência “angular” de um oscilador é constante, independente se a energia do oscilador é grande ou pequena. É útil pensar que a frequência é definida pelos parâmetros k_s e m , ao passo que a energia é definida pelas condições iniciais (ou pela amplitude A). No mundo quântico, é como se a amplitude pudesse ter apenas alguns valores especiais.

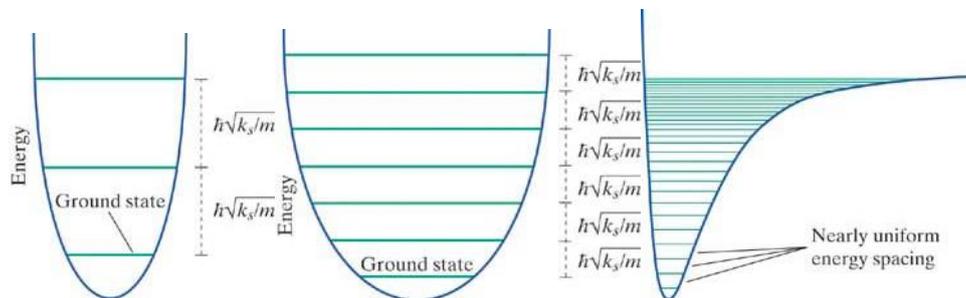


Figura 4. Um oscilador quântico com constante de mola k_s “grande” (gráfico da esquerda) tem seus níveis de energia bem espaçados. Um oscilador quântico com constante de mola k_s “pequena” (gráfico do meio) tem seus níveis de energia mais próximos. Níveis de energia para a energia potencial interatômica (gráfico da esquerda), que descreve a interação entre átomos vizinhos. Na região de mais alta energia, na parte assimétrica da curva, os níveis deixam de ficar igualmente espaçados.