

————— *Departamento de Física da Universidade do Porto* —————

Tópicos de Física

Aulas Teóricas

J. M. B. Lopes dos Santos

Departamento de Física
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
email: jlsantos@fc.up.pt.

6 de Outubro de 1999

Prefácio

A disciplina de Tópicos de Física funcionou pela primeira vez, no Departamento de Física da Universidade do Porto, no ano lectivo de 1994/95. O Departamento pretendeu introduzir uma cadeira de Física, no primeiro semestre do primeiro ano, que cumprisse certos objectivos:

- Não fosse vista pelos alunos como uma repetição dos conteúdos do 12^o ano, ainda que respeitasse os seus níveis de conhecimentos matemáticos, que não incluem o cálculo infinitesimal.
- Fosse suficientemente motivadora para despertar a curiosidade e o interesse dos alunos pela física;
- Contribuisse para desenvolver nos alunos uma maior disponibilidade para abordar questões novas, encorajando-os a raciocinar sobre questões concretas e tentando mostrar que os conhecimentos que já têm lhes permitem abordar problemas de interesse real e não meramente académico.

Estes objectivos fixam uma filosofia de abordagem mas não um conteúdo particular. Permitem a construção de um programa que não se integra em nenhuma das disciplinas tradicionais do ensino da Física. Isso é uma vantagem apreciável, pois as questões realmente interessantes, são, frequentemente, horizontais atravessando várias disciplinas.

O Departamento confiou-me a regência desta disciplina desde a sua criação e propôs-me um programa com quatro áreas:

- Estimativas dimensionais
- Modelos determinísticos
- Modelos probabilísticos
- Modelos fenomenológicos

Estas notas (e as aulas) só contemplam as três primeiras. A disciplina só conta com duas horas teóricas semanais e não tem sido possível abordar a última.

Esta versão das notas tem ainda um carácter provisório, as ideias são muitas para as melhorar e críticas e sugestões são mais do que bem vindas. Estas notas são acompanhadas de uma colecção de problemas, que é absolutamente essencial ao cumprimento dos objectivos atrás expostos. Aos alunos (e restantes leitores) competirá decidir se estes estão de facto a ser cumpridos.

Agradecimentos

Os agradecimentos devidos são muitos e de diferentes tipos. Aqui ficam apenas os que se relacionam directamente com esta disciplina:

- Aos alunos de Tópicos de Física, por terem suportado esta experiência e pela adesão que têm mostrado a esta ideia, apesar das dificuldades que muitos têm encontrado em adaptar-se ao estilo desta disciplina;
- Ao Departamento de Física da U.P. por me ter confiado um projecto de ensino tão estimulante;
- Ao Centro de Física do Porto pela facilidades informáticas que permitiram a produção destas notas;
- Aos colegas que colaboraram comigo nesta disciplina (Fátima Mota, José Fernando Mendes, Jorge Reis Lima, Maria Augusta Santos e Maria do Céu Marques);
- Ao Nuno Peres pelo entusiasmo e apreço que mostrou por esta filosofia de ensino;
- Um agradecimento especial para a Fátima Mota, pelo interesse (maior que o meu) que mostrou em transformar os meus manuscritos nesta forma apresentável, indo ao ponto de colaborar activamente nessa tarefa.

Índice Geral

1	Dimensões. Estimativas Dimensionais	1
	Dimensões	1
	Introdução	1
	Conceito de Dimensão	2
	Unidades Fundamentais em Mecânica	5
	Princípio de Homogeneidade Dimensional	6
	Estimativas Dimensionais	7
	O Pêndulo	7
	Velocidade do Som	10
	Força de Stokes e Número de Reynolds	13
	Leituras Recomendadas	17
2	Dimensões atômicas	19
	O tamanho dos átomos	19
	O átomo de Rutherford-Bohr	20
	A experiência de Rutherford	20
	O átomo de hidrogénio	28
	Raios e energias em átomos polieletrónicos	34
	Moléculas e sólidos	35
	Comprimentos de Ligação e Energias de Dissociação	35
	Constantes de Força e Frequências de Vibração Molecular	37
	Sólidos	39
	Leituras Recomendadas	40
3	Modelos Determinísticos	41
	Equações de Movimento na Dinâmica de Newton	41
	A Realidade e os Modelos	41
	A Dinâmica de Newton	42
	Velocidade e Aceleração	43
	O conteúdo de uma equação de movimento	46
	O deslocamento como integral da velocidade	49
	O Método de Euler para Integração numérica	49

Solução Numérica do Oscilador Harmónico	52
O Método de Euler numa folha de cálculo	52
O Método Runge-Kutta de segunda ordem	56
Órbitas planetárias	59
As Equações de Movimento na Gravitação Newtoniana	59
Reescalonamento das equações	61
Órbitas abertas e órbitas fechadas	68
Leis de Kepler	73
Colisões e órbitas abertas	76
As leis de conservação e características das órbitas	81
Leituras Recomendadas	82
4 Modelos Probabilísticos	85
Imprevisibilidade e Probabilidade	85
O passeio aleatório (Random Walk)	87
Modelo para a Difusão	87
Espaço de Acontecimentos. Probabilidades	89
Acontecimentos Independentes	90
Variáveis aleatórias	92
Valores médios. Variâncias	94
Flutuações em $1/\sqrt{N}$	99
Leituras Recomendadas	100
5 Teoria cinética dos gases	101
O Estado Gasoso	101
As Interações num Gás Diluído	101
Variáveis aleatórias contínuas	103
Densidade de probabilidade de velocidade	105
Cálculo da Pressão. Fórmula de Bernoulli.	107
Interpretação Microscópica de Temperatura	110
Energia Cinética e Temperatura	110
Equilíbrio entre um gás e um pistão móvel.	111
Leituras Recomendadas	114
A Geometria da Elipse	115
B Área e Produto Vectorial	117
C Valores Médios	119

Capítulo 1

Dimensões. Estimativas Dimensionais

Dimensões

Introdução

O processo de medição mais simples é a contagem. Não é frequente pensarmos numa contagem como uma medição. Mas na realidade trata-se de um procedimento através do qual associamos um número a uma entidade que em muitos casos podemos classificar como um grandeza física. Claro que só podemos contar conjuntos... contáveis, também designados por numeráveis.

Este procedimento não é suficiente para medir, por exemplo, uma distância. Senão vejamos. Para medir uma distância entre dois pontos, tomamos um objecto rígido, uma régua, colocamo-la ao longo de uma linha que una os dois pontos e *contamos* o número de vezes que a régua cabe entre eles. Mas, só muito excepcionalmente o comprimento será expresso como um número inteiro de *réguas* e vemo-nos obrigados a subdividi-la. Somos, pois, levados a conceber uma distância como expressa por uma expansão decimal (se as subdivisões sucessivas forem em dez partes). Uma expansão decimal que, pelo menos potencialmente, pode ser infinita. Daí que representemos comprimentos por números reais. Não iremos discutir até que ponto é que a estrutura matemática dos números reais é realmente tornada necessária pela nossa experiência do mundo físico. Alguns cientistas têm mesmo especulado que a representação do tempo e espaço pelo contínuo de números reais estaria na base de algumas dificuldades profundas da física contemporânea. Mas o aparato matemático construído com base nesta estrutura é de tal modo poderoso e eficiente que não será fácil destroná-lo.

O que nos interessa aqui salientar é um aspecto que o procedimento de medida destas grandezas contínuas, referido acima, torna bem claro. É que

para associar um número real a uma grandeza deste tipo temos que escolher um padrão, uma *unidade*. No caso em discussão uma determinada régua.

O ponto fundamental é que o padrão *é puramente convencional*. Embora tenha que ser especificado, para que o valor de uma grandeza possa ser expresso por um número real, ele pode ser mudado sem qualquer prejuízo para a descrição dos fenómenos. Mas, numa tal mudança, os valores numéricos que representam as grandezas transformam-se. Torna-se pois claro que uma relação entre os valores de duas grandezas físicas só terá significado se for preservada (invariante) em qualquer mudança de unidades. De outro modo não exprime uma relação entre grandezas mas sim uma coincidência de valores resultante de uma escolha particular de unidades. Esta invariância das relações envolvendo valores de grandezas físicas debaixo de uma determinada transformação desses valores é um exemplo de uma simetria. Na definição clássica de Herman Weyl, um objecto é simétrico se ficar invariante debaixo de uma dada transformação. A existência desta simetria implica certas restrições à forma das equações da física. São estas restrições que tornam possíveis os argumentos dimensionais. Para os explorarmos teremos que estudar com algum detalhe a natureza destas transformações de unidades (ou de escala).

Conceito de Dimensão

Como se transforma o valor de uma grandeza física numa mudança de unidades? Trata-se do mal amado problema de conversão de unidades, que vamos retomar aqui formulado de um modo um pouco mais abstracto do que o habitual.

Seja, por exemplo, l o valor real que representa um comprimento com a unidade *metro*. Se passarmos para uma outra unidade (*cm*) que novo número real l' representa o *mesmo* comprimento? Como bem sabemos

$$\text{m} \rightarrow \text{cm} = 10^{-2} \text{ m} \quad (1.1)$$

implica que

$$l \rightarrow l' = 10^2 l \quad (1.2)$$

De um modo geral designando por u o padrão (unidade) de uma dada grandeza, numa mudança para um novo padrão u' dado por

$$u \rightarrow u' = \frac{u}{\Lambda} \quad (1.3)$$

os valores dessa grandeza transformam-se como

$$l \rightarrow l' = \Lambda l \quad (1.4)$$

Mas como se transformam os valores de outras grandezas como uma massa ou uma área? O padrão de comprimentos não serve para medir massas. Não podemos determinar uma massa vendo quantas vezes nela cabe uma régua de 15 cm. Pela mesma razão também não podemos medir áreas com uma régua, pelo menos não por comparação directa. Para clarificar este ponto e simultaneamente entender melhor o que é um sistema de unidades, vamos gastar algum tempo com o caso trivial da escolha de unidade de área.

Para medir uma área temos que escolher um padrão: uma figura geométrica convenientemente definida de que possamos construir várias unidades, com as quais podemos *pavimentar* a área a medir reduzindo deste modo a medição a uma contagem. Para fixar ideia consideremos a área de um círculo de raio r e designemo-la por $C(r)$. Não seria difícil concluir, empírica ou teóricamente, que independentemente do padrão, uma duplicação do raio implica uma quadruplicação da área. Isto é, genericamente, para qualquer valor real b

$$C(br) = b^2 C(r) \quad (1.5)$$

As funções $C(r)$ que satisfazem esta condição para qualquer b real têm a forma

$$C(r) = \alpha r^2. \quad (1.6)$$

Isso pode-se ver com facilidade reescrevendo a eq.(1.5) na forma

$$C(r) = b^{-2} C(br) \quad (1.7)$$

e usando o facto que, se esta equação é válida para qualquer b , o é em particular para $b = 1/r$ e por isso

$$C(r) = C(1)r^2 \quad (1.8)$$

em que $C(1) \equiv \alpha$ é uma constante independente de r . Toda a gente sabe que esta constante é igual a π . Ou será? Na realidade o seu valor é determinado pela escolha da unidade de área. Consideremos, como exemplos as seguintes possíveis escolhas:

- a) A unidade de área é a área de um círculo de raio igual a uma unidade de comprimento.
- b) A unidade de área é a área de um quadrado de lado igual a uma unidade de comprimento
- c) A unidade de área é a área de uma moeda de 100\$.

No caso a) a constante α vale claramente 1, pois a definição significa que $C(1) \equiv 1$. No caso b), a definição corrente, vale π . Com efeito o argumento

que nos conduziu à eq.(1.6) aplicado à área de um quadrado de lado r , $Q(r)$ leva-nos a afirmar que

$$Q(r) = \beta r^2 \quad (1.9)$$

O que a geometria (ou a experiência) nos diz é que $\alpha/\beta = \pi$. É apenas isto o que estamos a afirmar quando dizemos que a área de um círculo é πr^2 . A escolha a) equivale a fazer $\alpha = 1$, logo $\beta = 1/\pi$. A escolha b) corresponde a ter $\beta = 1$, logo $\alpha = \pi$. Mas, e isto é o mais importante, o padrão de área está ligado ao de comprimento. Se a unidade de comprimento muda $u_L \rightarrow u'_L = u_L/\Lambda$ a de área muda de um modo determinado pelas relações das eqs(1.6) e (1.9), $u_A \rightarrow u'_A = u_A/\Lambda^2$. Repare-se que esta dependência da transformação de áreas na de comprimentos só existe *porque o padrão de área foi escolhido de um modo dependente do de comprimento*. No caso da escolha c) acima referida isso não acontece. Nessa situação o valor que exprime a área (o número de vezes que lá cabe uma moeda de 100\$00) é o mesmo quer os comprimentos sejam medidos em metros ou em centímetros.

Nos casos das definições a) e b) a unidade de área é *derivada* da de comprimento. A relação entre as transformações de área e comprimento

$$l \rightarrow l' = \Lambda l \quad (1.10)$$

$$a \rightarrow a' = \Lambda^2 a \quad (1.11)$$

é habitualmente expressa dizendo que uma área tem *dimensão 2* (ou expoente dimensional 2) no comprimento. É usual a notação

$$[\text{área}] = L^2 \quad (1.12)$$

Note-se que no caso da definição c) as áreas têm *dimensão zero* no comprimento, isto é, os valores que exprimem áreas são invariantes numa mudança de unidade de comprimento. Neste último sistema de unidades a área de um círculo pode ser expressa como

$$C(r) = k_c r^2 \quad (1.13)$$

Mas a constante de proporcionalidade, ao contrário dos sistema a) e b) varia numa mudança de unidades. Com efeito uma vez que $C(r)$ não varia numa mudança de unidade de comprimento, mas $r \rightarrow r' = \Lambda r$, temos que ter $k_c \rightarrow k'_c = \Lambda^{-2} k_c$. k_c tem *dimensão -2* no comprimento.

Este exemplo, ainda que trivial, tem o mérito de pôr em evidência alguns pontos relativamente a unidades:

- a) Relações entre grandezas físicas de natureza diferente envolvem, em geral constantes multiplicativas cujos valores (e dimensões) só são determinados pelas convenções de escolha de unidades.

- b) Em certos casos é possível (e conveniente) relacionar a escolha de padrões dessas grandezas de tal modo que essas constantes sejam independentes das unidades escolhidas (desde que não se altere a relação entre os padrões). Essas constantes dizem-se adimensionais.
- c) Estas escolhas permitem reduzir o número de padrões independentes—unidades fundamentais—sendo os restantes definidos a partir destes—unidades derivadas. As leis de transformação das unidades derivadas são determinadas a partir das das unidades fundamentais.

Unidades Fundamentais em Mecânica

Em Mecânica Clássica é possível escolher as constantes arbitrárias que podem surgir nas leis e definições de modo ter apenas 3 unidades fundamentais, quase universalmente escolhidas como massa (M), comprimento (L) e tempo (T). Para que não caiamos na tentação de atribuir um significado profundo a este facto convém saber que em relatividade, por exemplo, é usual usar um sistema de unidades em que apenas há duas grandezas fundamentais, massa e tempo, ou massa e comprimento. Nesses sistema tempo e comprimento têm as mesmas dimensões. Os físicos de partículas usam correntemente um sistema com uma unidade fundamental. Como vimos atrás, é a própria rede de leis e relações entre grandezas, que constituem uma teoria, que determina as possibilidades de relacionamento de padrões e conseqüente redução do número de unidades fundamentais.

Mas, para já, fiquemos na Mecânica Clássica. Vejamos através de alguns exemplos como obtemos as dimensões de cada grandeza nas unidades fundamentais:

- velocidade: uma qualquer componente de velocidade é definida por uma equação

$$v = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (1.14)$$

Numa mudança de unidades de comprimentos e tempos $L \rightarrow \Lambda_1 L$, $T \rightarrow \Lambda_2 T$ (daqui em diante passaremos sempre a indicar as transformações dos valores das grandezas) como varia v ? Claramente

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \rightarrow \frac{\Lambda_1 \Delta x}{\Lambda_2 \Delta t} \quad (1.15)$$

e portanto

$$v \rightarrow v' = \Lambda_1 \Lambda_2^{-1} v \quad (1.16)$$

Isto é, v tem dimensão 1 no comprimento e -1 no tempo. Na notação habitual

$$[\text{velocidade}] = LT^{-1} \quad (1.17)$$

- outras grandezas: o leitor poderá facilmente verificar por processos semelhantes as seguintes equações de dimensões:

$$[\text{quantidade de movimento}] = [mv] = MLT^{-1} \quad (1.18)$$

$$[\text{momento cinético}] = [mvr] = ML^2T^{-1} \quad (1.19)$$

$$[\text{força}] = [ma] = MLT^{-2} \quad (1.20)$$

$$[\text{energia}] = [mv^2] = ML^2T^{-2}. \quad (1.21)$$

Nota: não terá escapado ao leitor atento que todas as grandezas que referimos acima são definidas como produtos de potências (positivas ou negativas) de grandezas fundamentais. Isso é uma condição necessária para que a respectiva mudança de unidades corresponda a uma transformação de escala (multiplicação por um factor de escala) e possamos definir os respectivos expoentes dimensionais. Para grandezas como comprimento, massa e tempo que se medem por comparação directa com padrões, não se vê como pudesse ser de outra maneira. Mas a generalidade das grandezas físicas não se pode medir por comparação directa. Não existe um padrão de velocidades que se possa sobrepor a uma dada velocidade para ver quantas vezes lá cabe. Portanto poder-se-ia pôr a questão de saber se não seria possível definir grandezas físicas, úteis, que tivessem uma lei de transformação mais complicada. No entanto, certos requisitos gerais (linearidade, composição de transformações de escala), cuja discussão seria um pouco avançada demais para este curso, reduzem as possibilidades aquelas que nós considerámos.

Princípio de Homogeneidade Dimensional

Estamos agora em posição de formular, de um modo mais preciso, o requisito exposto atrás, de que uma relação com significado físico entre duas grandezas tem que ser preservada numa mudança de unidades.

Tomemos uma relação genérica entre duas grandezas que designaremos por A e B .

$$A = B \quad (1.22)$$

Numa mudança genérica de unidades

$$L \rightarrow \Lambda_1 L \quad (1.23)$$

$$T \rightarrow \Lambda_2 T \quad (1.24)$$

$$M \rightarrow \Lambda_3 M \quad (1.25)$$

A e B transformam-se de acordo com as suas dimensões nas unidades fundamentais

$$A \rightarrow A' = \Lambda_1^{\alpha_1} \Lambda_2^{\alpha_2} \Lambda_3^{\alpha_3} A \quad (1.26)$$

$$B \rightarrow B' = \Lambda_1^{\beta_1} \Lambda_2^{\beta_2} \Lambda_3^{\beta_3} B \quad (1.27)$$

Para que a relação seja preservada no novo sistema de unidades deveremos ter

$$A' = B' \quad (1.28)$$

isto é

$$\Lambda_1^{\alpha_1} \Lambda_2^{\alpha_2} \Lambda_3^{\alpha_3} = \Lambda_1^{\beta_1} \Lambda_2^{\beta_2} \Lambda_3^{\beta_3} \Rightarrow \Lambda_1^{\alpha_1 - \beta_1} \Lambda_2^{\alpha_2 - \beta_2} \Lambda_3^{\alpha_3 - \beta_3} = 1 \quad (1.29)$$

Como os factores de escala são arbitrários a igualdade só se verificará, *para qualquer escolha das unidades fundamentais*, se

$$\alpha_1 = \beta_1; \quad \alpha_2 = \beta_2; \quad \alpha_3 = \beta_3 \quad (1.30)$$

Em conclusão, *é condição necessária e suficiente para que uma equação seja invariante numa mudança de unidades que todos os seus termos tenham as mesmas dimensões nas unidades fundamentais*—Princípio de Homogeneidade Dimensional.

Este requisito, invariância debaixo de uma determinada transformação é, basicamente, um princípio de simetria. Uma tal exigência coloca certas restrições às relações possíveis entre determinadas grandezas. É este aspecto do problema que será discutido na próximas secções.

Estimativas Dimensionais

O Pêndulo

Consideremos a questão de determinar o período de oscilação de um pêndulo. Do nosso conhecimento das leis da física poderíamos intuir que que os seguintes parâmetros poderão ser importantes:

- g , a aceleração da gravidade;
- m , a massa do pêndulo;
- l , o comprimento do fio;
- θ_0 , o valor do ângulo inicial.

Teremos então, de um modo inteiramente geral, uma relação,

$$T = f(g, l, m, \theta_0) \quad (1.31)$$

em que f designa uma função desconhecida. Como vamos ver o princípio de homogeneidade dimensional vai permitir determinar completamente a dependência de f nos primeiros três parâmetros. Escrevamos, para referência,

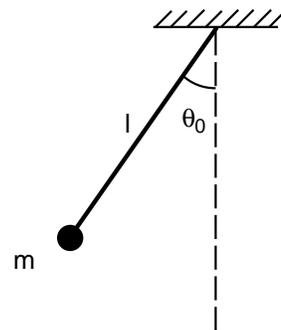


Figura 1.1: o pêndulo gravítico

as equações de dimensões destas grandezas:

$$[g] = LT^{-2} \quad (1.32)$$

$$[l] = L \quad (1.33)$$

$$[m] = M \quad (1.34)$$

$$[\theta_0] = 1 \quad (1.35)$$

$$[T] = T \quad (1.36)$$

Note-se que o ângulo θ é medido em radianos. Como tal é a razão de dois comprimentos e adimensional (dimensões $L^0T^0M^0$), isto é, tem um valor independente das unidades escolhidas.

Vejam os que acontece a estas grandezas numa mudança de unidades de massa, $M \rightarrow \Lambda_3 M$. Todas são invariantes excepto m . No novo sistema de unidades a relação da eq.(1.31) deve ser mantida, isto é,

$$T' = f(g', l', m', \theta'_0) \quad (1.37)$$

em que X' representa o valor da grandeza X no novo sistema de unidades.

Um ponto importante a notar: se a relação é de facto universal a função f é a mesma nas eqs(1.31) e (1.37); mas, para isso, é crucial que seja explicitada a dependência em todos os parâmetros físicos com dimensões. Imaginemos, por um momento que nos esqueçamos da dependência em g , já que esta pouco varia se não sairmos da superfície da Terra. Nesse caso ao mudar de unidades a função $T = f(l, m, \theta_0)$ variaria porque a definição de f envolveria o parâmetro g que mudaria com a mudança de unidades. É fundamental compreender bem este ponto para poder aplicar correctamente os métodos que estamos a discutir.

Das equações de dimensões sabemos que $T' = T, g' = g, l' = l, \theta_0 = \theta'_0$ e $m' = \Lambda_3 M$. Logo

$$f(g, l, \Lambda_3 m, \theta_0) = f(g, l, m, \theta_0) \quad (1.38)$$

Esta relação só pode ser válida para qualquer valor de Λ_3 se f não depender de m . O período não pode depender da massa do pêndulo!

$$T = f(g, l, \theta_0) \quad (1.39)$$

Podemos agora prosseguir a explorar as consequências de outras mudanças de unidades. Para a unidade de comprimento

$$l \rightarrow \Lambda_1 l \quad (1.40)$$

$$g \rightarrow \Lambda_1 g \quad (1.41)$$

$$\theta_0 \rightarrow \theta_0 \quad (1.42)$$

$$T \rightarrow T \quad (1.43)$$

de onde decorre,

$$f(\Lambda_1 g, \Lambda_1 l, \theta_0) = f(g, l, \theta_0) \quad (1.44)$$

Escolhendo $\Lambda_1 = l^{-1}$ obtemos

$$f(g, l, \theta_0) = f\left(\frac{g}{l}, 1, \theta_0\right) \quad (1.45)$$

O período é função da razão g/l e de θ_0 . Finalmente numa mudança de unidade de tempo

$$l \rightarrow l \quad (1.46)$$

$$g \rightarrow \Lambda_2^{-2} g \quad (1.47)$$

$$\theta_0 \rightarrow \theta_0 \quad (1.48)$$

$$T \rightarrow \Lambda_2 T \quad (1.49)$$

O que dá

$$T' = \Lambda_2 T = f\left(\Lambda_2^{-2} \frac{g}{l}, \theta_0\right) \quad (1.50)$$

isto é

$$f\left(\frac{g}{l}, \theta_0\right) = \Lambda_2^{-1} f\left(\Lambda_2^{-2} \frac{g}{l}, \theta_0\right) \quad (1.51)$$

Usando a mesma técnica que anteriormente, escolhendo Λ_2 de modo a que $\Lambda_2^{-2} g/l = 1$ concluímos que

$$T = f\left(\frac{g}{l}, \theta_0\right) = \sqrt{\frac{l}{g}} f(1, \theta_0). \quad (1.52)$$

Em resumo a análise dimensional, determina toda a dependência em l e g ,

$$T = \sqrt{\frac{l}{g}} f(\theta_0). \quad (1.53)$$

A função $f(\theta_0)$ fica indeterminada por esta análise. O regime de pequenas oscilações corresponde a $\theta_0 \ll 1$ (recorde-se que um ângulo recto são $\pi/2$ radianos, isto é cerca de 1.57). Corresponde ao limite

$$T \approx \sqrt{\frac{l}{g}} f(0) = k \sqrt{\frac{l}{g}} \quad (1.54)$$

Neste limite a nossa análise determina o valor de T a menos de um constante multiplicativa (a análise completa das equações de movimento mostra que $k = 2\pi$).

O método seguido na dedução do resultado da eq.(1.54) é algo longo mas tem a vantagem de tornar bem explícito o conteúdo de uma análise dimensional e o princípio de invariância que lhe está subjacente. Mas é habitual

proceder de um modo mais expedito. A função $f(g, l, m, \theta_0)$ da eq.(1.31) tem claramente as dimensões de um tempo. Olhando para as equações de dimensões dos parâmetros (eqs(1.32) a (1.36)) não é difícil ver que podemos definir um tempo com l e g nomeadamente $\sqrt{l/g}$. Assim podemos desde logo escrever, sem perda de generalidade

$$T = \sqrt{\frac{l}{g}} h(g, l, m, \theta_0) \quad (1.55)$$

em que a função h é adimensional, isto é *tem um valor invariante em qualquer mudança de unidades*. Mas então é claro que ela só pode depender de parâmetros adimensionais, igualmente invariantes. Uma inspecção das equações de dimensões mostra que com g, l, m, θ_0 a única combinação adimensional possível é o próprio θ_0 . Basta reparar, por exemplo, que só m tem dimensão de massa não nula. Logo não pode formar com g e l um parâmetro adimensional. Por outro lado não é possível anular a dimensão temporal entre g e l . Logo concluímos directamente que h só depende de θ_0 e T tem a forma da eq.(1.54).

Antes de abandonar este exemplo, convém reflectir um pouco sobre o que fizemos. Ao fim ao cabo acabamos de *deduzir* uma lei física, sem fazer uma única experiência. Será que podemos de facto recostar-nos num sofá e, usando as nossas células cinzentas, descobrir como se comporta o mundo? Na verdade, a ausência de um conteúdo empírico no nosso raciocínio é apenas aparente. A nossa suposição inicial sobre as variáveis de que pode depender o período do pêndulo resume observações muito importantes. O período do pêndulo poderia, à partida, depender de muito mais variáveis como, o tipo de material que o constitui, o local onde oscila (latitude e/ou longitude), o diâmetro do fio de suspensão etc, etc. Não deixa no entanto de ser interessante que tendo assim limitado o número de parâmetros, foi depois possível chegar tão longe com base no princípio de homogeneidade dimensional.

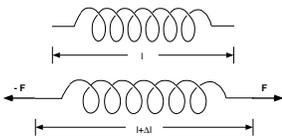


Figura 1.2: o alongamento da mola é proporcional a \mathbf{F}

Velocidade do Som

Suponhamos que aplicamos duas forças iguais e opostas no extremo de uma mola. Sabemos que a deformação é proporcional à força

$$F = k\Delta l \quad (k, \text{ constante da mola}) \quad (1.56)$$

(Uma questão: é mais usual definir a constante da mola supondo uma das extremidades fixas e aplicando a força na outra. As duas definições são equivalentes?)

Suponhamos agora que, em vez da mola temos uma barra sólida. Se a força não ultrapassar o limite de elasticidade da barra temos de novo a relação da eq.(1.56) entre a variação de comprimento da barra e a força.

Mas como depende k do material e da geometria da barra? Se duplicarmos o seu comprimento k varia? E se variarmos a secção? Imaginemos a barra constituída por duas partes do mesmo comprimento colocadas topo a topo. É óbvio que a barra A , estando em equilíbrio tem uma resultante das forças aplicadas nula. Isto é a barra B exerce sobre A uma força $\mathbf{F}' = -\mathbf{F}$. Mas então, designando por k' a constante de força relativa a uma barra de comprimento $l/2$,

$$\Delta l_A = \frac{F}{k'} \quad (1.57)$$

As forças nas extremidades de B são também \mathbf{F} e $-\mathbf{F}$. Logo

$$\Delta l_B = \frac{F}{k'} \quad (1.58)$$

em que k' é a contante de força relativa a uma barra de metade do comprimento. Mas

$$\Delta l = \Delta l_A + \Delta l_B = F\left(\frac{1}{k'} + \frac{1}{k'}\right) = F\frac{2}{k'} \quad (1.59)$$

Isto significa que

$$k = \frac{k'}{2} \quad (1.60)$$

Por outras palavras a constante k é inversamente proporcional ao comprimento da barra. Em relação às dimensões transversais podemos raciocinar de modo semelhante. Supomos a barra dividida longitudinalmente em duas. As forças aplicadas a cada uma nas extremidades tem agora módulo $F/2$. Mas, como é óbvio, cada uma das duas partes sofre o mesmo alongamento que a barra completa. Assim

$$k'\Delta l = \frac{F}{2} \quad (1.61)$$

ou seja $k' = k/2$. A constante k é proporcional à área da secção da barra. Em resumo,

$$k = E\frac{A}{l} \quad (1.62)$$

em que E deve ser independente das dimensões da barra, característico do material de que é feita. É conhecido como módulo de Young. Assim temos para a relação entre o alongamento da barra e a força de estiramento

$$\frac{F}{A} = E\frac{\Delta l}{l} \quad (1.63)$$

As dimensões de E são exactamente as de uma pressão. No SI a respectiva unidade é o Pa (Pascal). Valores típicos para sólidos[4], andam na gama das dezenas a centenas de GPa (1 GPa = 10^9 Pa).



Figura 1.3: cada metade da barra está sujeita às mesmas forças que a barra completa

Agora que sabemos caracterizar as forças elásticas que se exercem num sólido vejamos o que podemos aprender sobre a propagação do som nos mesmos. Como o som implica a propagação de uma deformação elástica, parece claro que a sua velocidade vai depender do módulo de Young. Este determina as forças que cada parte do sólido exerce sobre as vizinhas. Mas se pensarmos nas leis de Newton, sabemos que o movimento é determinado, não apenas pelas forças que actuam sobre os corpos, mas também pelas respectivas massas. Por outro lado é um dado adquirido que a velocidade de propagação do som é uma característica de cada material e não depende da geometria dos corpos onde se propaga. Assim sendo, deve depender, não da massa do corpo, mas da massa volúmica do material que o constitui. Sem mais informações arrisquemos

$$v_{som} = f(E, \rho) \quad (1.64)$$

Olhemos para as dimensões

$$[E] = [\text{Pressão}] = ML^{-1}T^{-2} \quad (1.65)$$

$$[\rho] = ML^{-3} \quad (1.66)$$

Ora

$$\left[\frac{E}{\rho}\right] = L^2T^{-2} \quad (1.67)$$

as dimensões do quadrado de uma velocidade. Logo

$$v_{som} = \sqrt{\frac{E}{\rho}} h(E, \rho) \quad (1.68)$$

em que $h(E, \rho)$ é adimensional. Mas não é possível formar um parâmetro adimensional de E e ρ , pelo que h não pode depender de quaisquer destes parâmetros e terá que ser uma constante adimensional.

$$v_{som} = \alpha \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (1.69)$$

Como exemplo calculemos $\sqrt{E/\rho}$ para o alumínio, $E = 71 \text{ GPa}$, $\rho = 2.7 \text{ g cm}^{-3}$ [4], o que dá

$$v_{som}(Al) = 5.13 \times 10^3 \text{ m s}^{-1} \quad (1.70)$$

A velocidade do som no alumínio é, 5100 m s^{-1} [4]. Uma análise mais completa mostra que $\alpha = 1$.

Força de Stokes e Número de Reynolds

Dentro da mesma filosofia consideremos agora um exemplo no campo da física de fluidos. É uma área onde a análise dimensional é particularmente útil.

Consideremos um corpo de forma esférica imerso num fluido. Se este se mover exercerá sobre o corpo uma força na direcção do seu movimento. Note-se que poderemos também considerar que é o corpo que se move no fluido em repouso. O importante é o movimento relativo sólido – fluido. De que poderá depender tal força? Certamente da velocidade relativa sólido – fluido, U e das dimensões do corpo. Poderemos também pensar que pode depender da massa volúmica do fluido. Um fluido muito rarefeito não deve arrastar com muita força o sólido. Vejamos então as dimensões

$$[R] = L, \quad (\text{raio}) \quad (1.71)$$

$$[\rho] = ML^{-3}, \quad (\text{massa volúmica}) \quad (1.72)$$

$$[U] = LT^{-1}, \quad (\text{velocidade}) \quad (1.73)$$

$$[F] = MLT^{-2}, \quad (\text{força}) \quad (1.74)$$

Vemos, por inspecção que $F \propto \rho$ (dimensão 1 na massa); por outro lado $F \propto U^2$ (para acertar as dimensões de T). Portanto

$$[\rho U^2 R^2] = MLT^{-2} = [F] \quad (1.75)$$

ou seja

$$F = \rho U^2 R^2 h(\rho, U, R) \quad (1.76)$$

A função h deve ser adimensional. Mas como não é possível, com os seus argumentos, formar um parâmetro adimensional, h deve reduzir-se a uma constante:

$$F = k \rho U^2 R^2 \quad (1.77)$$

e toda a dependência de F nos parâmetros do problema fica determinada.

Nesta altura podemos tentar impressionar um experimentalista com esta lei física deduzida por raciocínio puro! Ele poderia argumentar, com justeza, que de facto o nosso ponto de partida (a selecção dos parâmetros de que cremos que F possa depender) resulta de uma experiência prévia, tem pois um forte conteúdo empírico. Mas, mais provavelmente, limitar-se-á a apontar que o nosso resultado está errado pois, é bem conhecido experimentalmente, que a baixas velocidades, a força é proporcional a U , não a U^2 . Trata-se da força de atrito de Stokes. Como é possível?

Com efeito a nossa suposição de partida é demasiado restritiva, pois ignora uma característica do fluido, a *viscosidade*. Para explicar o que é teremos que fazer um longo parêntesis.

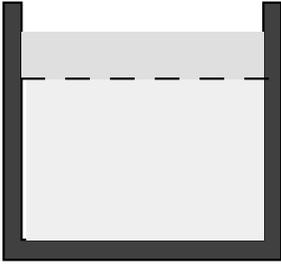


Figura 1.4: o peso da camada sombreada de líquido é suportado pela pressão do líquido que está em baixo.

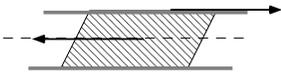


Figura 1.5: sólido sujeito a tensões de corte.

Viscosidade de Stokes

Consideremos um recipiente cheio de líquido, por exemplo água. A porção de líquido sombreada na fig(1.2) é actuada pela força de gravidade. O respectivo peso vale

$$\Delta p = \rho g \Delta V \quad (1.78)$$

(ρ , massa volúmica, ΔV , volume)

O que sustenta esta porção de líquido e o impede de cair? Naturalmente as forças de pressão exercidas pelo líquido que está por baixo. Este líquido é comprimido pelo peso do líquido acima dele (e da coluna de ar por cima deste). Deforma-se (muito pouco, pois os líquidos, como os sólidos, são pouco compressíveis) e daí resultam forças de pressão que se exercem normalmente à fronteira entre as duas porções de líquido. Naturalmente essas forças são proporcionais à área da superfície e por isso é bem definida a força por unidade de área, a pressão. O ponto é que os líquidos se comportam de modo muito semelhante aos sólidos sob acção de tensões compressivas (normais às superfícies através das quais se exercem).

Mas consideremos agora uma situação um pouco diferente. Uma camada de líquido está contida entre duas placas horizontais, sólidas. O líquido, normalmente, adere ao sólido. Isto é, se arrastarmos uma das placas horizontalmente o líquido que está em contacto com ela move-se também. Se entre as placas estivesse um sólido o deslocamento horizontal induziria uma deformação no mesmo. Surgiria uma força elástica que se oporia ao deslocamento. Seria necessário manter aplicada uma força externa para manter a placa deslocada da sua posição inicial. Se imaginarmos uma superfície a separar o sólido em duas camadas vemos claramente que a condição de equilíbrio da parte superior implica que a inferior exerça sobre ela uma força *paralela à superfície através da qual ela se exerce*. Estas tensões são designadas por tensões de corte.

Um líquido responde a tensões de corte de um modo muito diferente de um sólido. As camadas de líquido podem deslizar umas sobre as outras. A placa superior pode estar em equilíbrio, sem forças externas, em qualquer posição. Em equilíbrio, num líquido, não há tensões de corte. Mas por experiência sabemos que *enquanto a placa e o líquido estão em movimento* surgem de facto tensões de corte que se lhe opõem – as forças de viscosidade.

Para uma classe vasta de líquidos (não todos) verifica-se que para uma velocidade da placa superior U e uma camada de espessura l de líquido, a força por unidade de área que é necessário exercer externamente sobre a placa para a manter em velocidade uniforme vale

$$\frac{F}{A} = \eta \frac{U}{l} \quad (1.79)$$

O coeficiente η é a viscosidade. Note-se que, como a placa se desloca a uma velocidade uniforme, a resultante das forças que nela actuam é nula. Logo esta expressão determina também o valor da força que o líquido exerce sobre a placa.

À primeira vista esta definição pareceria indicar que a viscosidade é uma propriedade da interface líquido—sólido, mais do que do líquido em si. De facto não é assim. O que na realidade se verifica na situação considerada é que a velocidade no seio do líquido varia de um valor nulo na placa inferior até U , na superior, de um modo linear. Isto é

$$v_x(y) = U \frac{y}{l} \quad (1.80)$$

Se imaginarmos uma superfície paralela às placas a separar duas partes do líquido vemos que a força que cada uma destas partes exerce sobre a outra é ainda dada pela eq.(1.80) uma vez que não há acelerações no sistema. O que estamos a dizer, portanto, é que a força exercida através da superfície de separação entre as partes A e B do líquido vale

$$\frac{F}{A} = \eta \frac{U}{l} = \eta \frac{dv_x(y)}{dy} \quad (\text{No sentido negativo do eixo } xx) \quad (1.81)$$

Em conclusão, um deslizamento de uma camada de líquido sobre outra, (variações de componentes da velocidade segundo um dado eixo numa direcção perpendicular ao mesmo, $dv_x/dy \neq 0$) dá origem a tensões de corte proporcionais à viscosidade do líquido.

A Força de Stokes

Estamos agora em condições de voltar à discussão da força sobre um sólido em torno do qual se move um fluido. Parece claro que a viscosidade do líquido é relevante. Com efeito se o líquido adere à superfície do sólido terá que haver variações de velocidade no seio do fluido e surgirão tensões de corte determinadas pela viscosidade. Analisando dimensionalmente η

$$[\eta] = (MLT^{-2})(L^{-2})(L)(LT^{-1})^{-1} = ML^{-1}T^{-1} \quad (1.82)$$

Levemos em conta a informação do nosso amigo experimentalista, $F \propto U$. Temos

$$F = Uf(\rho, R, \eta) \quad (1.83)$$

As dimensões da função f são fáceis de determinar

$$[f] = \left[\frac{F}{U} \right] = MT^{-1} \quad (1.84)$$



Figura 1.6: para mover a placa a velocidade uniforme é necessário manter uma força aplicada. O deslizamento de camadas de líquido origina tensões de corte.

O produto ηR tem precisamente estas dimensões pelo que

$$F = \eta UR \times h(\rho, R, \eta) \quad (1.85)$$

em que a função h é agora adimensional. Mas não há nenhum parâmetro adimensional que se possa formar a partir de produtos de potências de ρ , R e η . Senão vejamos

$$[\rho^\alpha R^\beta \eta^\gamma] = M^{\alpha+\gamma} L^{-3\alpha+\beta-\gamma} T^{-\gamma} \quad (1.86)$$

Para termos um produto adimensional

$$\begin{aligned} \alpha + \gamma &= 0 \\ -3\alpha + \beta - \gamma &= 0 \\ \gamma &= 0 \end{aligned} \quad (1.87)$$

que só tem a solução $\alpha = \beta = \gamma = 0$. Em conclusão a função h reduz-se a uma constante adimensional

$$F = k_s \eta UR \quad (1.88)$$

Neste regime, de $F \propto U$, a dependência no raio da esfera é linear e a força não depende da massa volúmica do líquido.

Finalmente, e para encerrar esta discussão sobre fluidos, podemos colocar o problema com toda a generalidade, sem fazer suposições sobre a dependência da força na velocidade.

$$F = f(\rho, \eta, R, U) \quad (1.89)$$

que podemos sempre escrever na forma

$$F = \eta UR \times h(\rho, \eta, R, U) \quad (1.90)$$

em que, de novo, h é adimensional. Mas com estes quatro parâmetros já é possível formar um produto adimensional. De facto, o trabalho já está feito. Como ηUR e $\rho U^2 R^2$ tem as mesmas dimensões (as de uma força) a razão entre eles é adimensional

$$\mathcal{R} = \frac{\rho U^2 R^2}{\eta UR} = \frac{\rho UR}{\eta} \quad (1.91)$$

Este parâmetro é designado por *número de Reynolds*.

A análise dimensional conduz então ao resultado

$$F = \eta UR \times h(\mathcal{R}) \quad (1.92)$$

Repare-se que, na medida em que incluímos na discussão todos os parâmetros relevantes, a função $h(\mathcal{R})$ é universal, a mesma para todos os fluidos (desde que caracterizados por uma viscosidade do tipo acima definido) e esferas sólidas (para outras formas geométricas a função será diferente).

O número de Reynolds caracteriza o regime de variação de F com U . Para $\mathcal{R} \ll 1$ será de esperar que $h(\mathcal{R}) \approx h(0)$ e teremos um regime em que $F \propto U$. Mas para $\mathcal{R} \approx 1$ ou superior esse regime pode ser modificado. Com efeito as características do escoamento variam substancialmente com \mathcal{R} . Para \mathcal{R} pequeno o escoamento é ordenado e estacionário. A velocidade do fluido em cada ponto não varia no tempo. Para $\mathcal{R} \approx 20$ desenvolvem-se turbilhões na parte de trás do corpo sólido, que para $\mathcal{R} \approx 100$, acabam por descolar dando origem a variações temporais na velocidade do fluido em cada ponto. Para \mathcal{R} muito elevado a esteira do sólido tem um comportamento desordenado (turbulento) (ver fig.(1.7)).

Convém notar o poder da análise dimensional. A descrição que acabamos de fazer aplica-se a inúmeras situações. Dois quaisquer escoamentos com η 's, R 's, U 's e ρ 's totalmente diferentes terão as mesmas características se os respectivos números de Reynolds forem idênticos. Uma das consequências práticas destas ideias é que é possível estudar o comportamento de grandes massas líquidas (por exemplo, uma albufeira) com modelos de dimensões reduzidas, se a massa volúmica e a viscosidade do líquido do modelo forem escolhidas de modo a conduzir ao mesmo número de Reynolds. O número de Reynolds é apenas um de muitos parâmetros adimensionais que surgem no estudo da mecânica de fluidos.

Leituras Recomendadas

- *Classical and Modern Physics*, K. Ford, Vol I Cap. 2. Uma boa obra, na tradição americana de curso introdutório com cobertura global de todas as áreas da Física. Tem alguns anos e tem sido suplantado por obras mais recentes, com apresentações gráficas excepcionais, mas nem sempre com lucidez comparável.
- *Forces and Particles*, B. Pippard, Cap. 7 Um livro relativamente avançado, que contém uma discussão cuidada de alguns dos tópicos deste capítulo.
- *Sistema Internacional* Guilherme de Almeida Cap. 3 A ênfase é mais em sistemas de unidades mas no capítulo 3 trata alguns exemplos de análise dimensional.

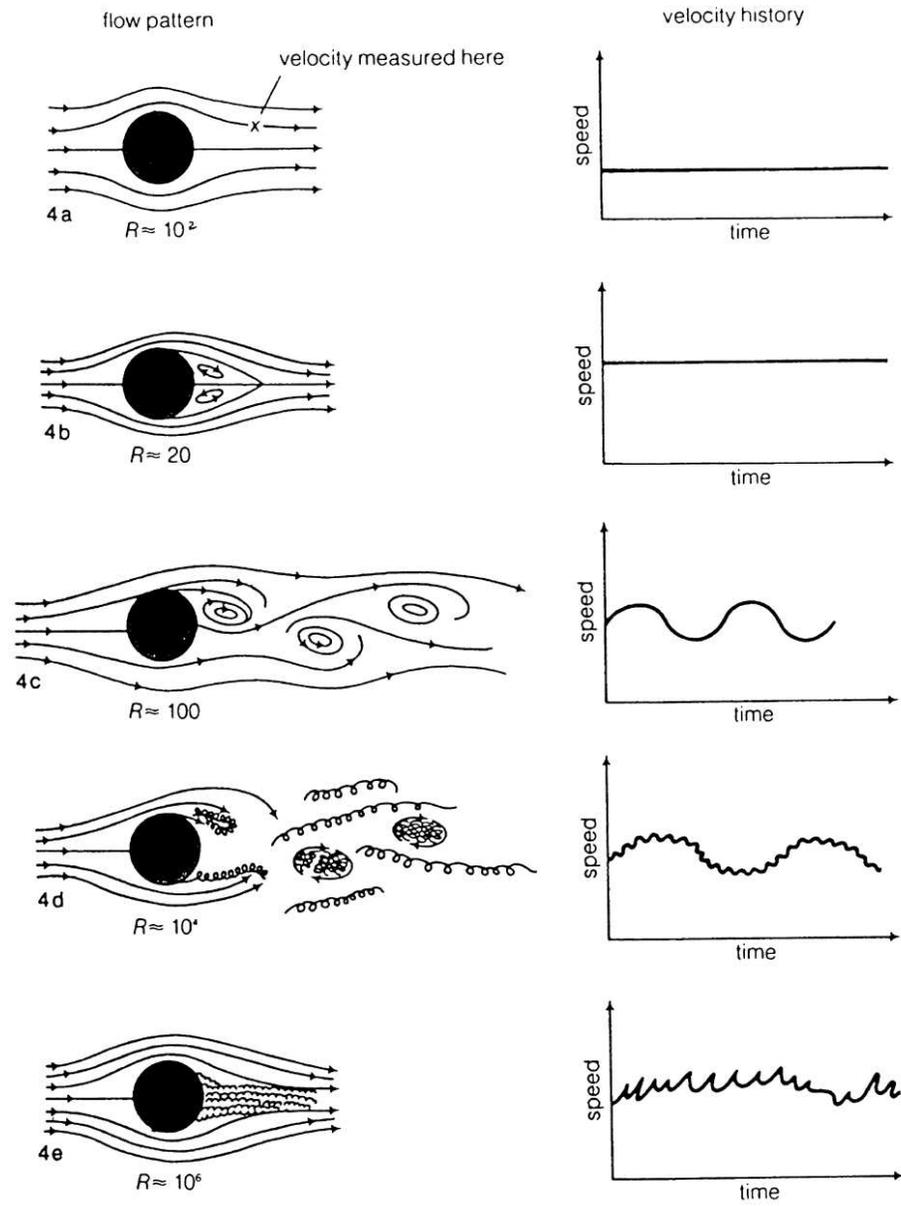


Figura 1.7: escoamentos de um fluido em torno de uma esfera para vários valores do número de Reynolds [5]

Capítulo 2

Dimensões atômicas

O tamanho dos átomos

De que tamanho são os átomos? A investigação experimental desta questão constitui uma história fascinante, plena de invenção e criatividade. Uma excelente introdução pode ser encontrada nas notas de J. Bessa de Sousa *Introdução à Física da Matéria*[1]. A invenção do microscópio de efeito de túnel veio coroar esta história com imagens extraordinárias, que permitem resolver individualmente os átomos de um dado material[2].

No presente capítulo tomaremos como um dado adquirido a actual possibilidade de a ciência determinar com precisão as características individuais de átomos (dimensões, energias, etc), numa variedade de circunstâncias (isolados, em moléculas, em átomos). Tentaremos, com ideias simples, compreender o que determina as escalas características de certas propriedades. Vejamos alguns exemplos.

Uma consulta a um quadro periódico revelará que os raios atômicos variam entre 0.49 \AA (Hélio) e 3.34 \AA (Césio). Se levarmos em conta que as massas dos átomos variam de um factor de 200 temos que reconhecer que os raios são razoavelmente constantes.

Na tabela 1 [3] descobrimos algo semelhante para os comprimentos de ligação química (distâncias internucleares) em várias moléculas. A distância H–H no H_2 é a mais curta da lista, 0.7 \AA , sendo a mais longa inferior a 3 \AA . Não há ligações químicas com distâncias internucleares de 10 ou 100 \AA . Veremos mais à frente que nos sólidos e líquidos as distâncias interatómicas são também desta ordem de grandeza. Considerações semelhantes se podem fazer a respeito de energias.

Poder-se-ia, certamente, fazer um curso de um semestre inteiro sobre métodos de cálculo de distâncias internucleares em moléculas. O cálculo de energias de coesão de sólidos poderia ocupar um curso de pós-graduação. Mas, enquanto estes cálculos detalhados são realmente tarefas complexas,

a compreensão das ordens de grandeza, das escalas características, não exige conhecimentos tão aprofundados. Não há razão, pois, para que, nesta perspectiva limitada, nos coibamos de abordar, desde já, estas questões.

Na base da nossa compreensão destas características está o modelo atômico descoberto por Rutherford em 1911, mas cuja física só seria correctamente compreendida em 1926, com o advento da mecânica quântica.

O átomo de Rutherford-Bohr

A experiência de Rutherford

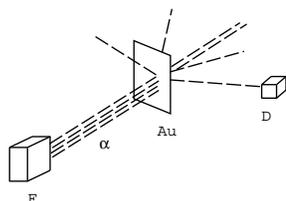


Figura 2.1: Esquema da experiência de Rutherford. F, fonte; Au, folha de ouro; D, detector.

A experiência de Rutherford, em 1911, foi a primeira incursão directa da ciência na estrutura interna do átomo e culminou com a descoberta do núcleo atômico. A ideia de base era extremamente simples. Consistia em dirigir partículas α de alta velocidade contra uma fina folha de material (Rutherford usou ouro) e observar, em detalhe, os desvios que sofrem. Naturalmente, estes desvios dependem das forças de interacção entre as partículas α e os átomos do material. Na altura desta experiência eram conhecidos alguns factos sobre os átomos. As suas dimensões são da ordem de 1 \AA . Sabia-se que existiam electrões, partículas com massa quase 2000 vezes inferiores à do átomo mais leve (o de hidrogénio), que facilmente se desprendiam dos átomos. A natureza das partículas α , átomos de hélio sem dois electrões, tinha sido estabelecida pelo próprio Rutherford em experiências anteriores.

Rutherford observou que quase todas as partículas α atravessavam a folha de ouro quase sem desvio nenhum. A folha era realmente extremamente fina, do tipo usado para “dourar” metais. Quantos átomos de ouro atravessava cada partícula? Cada metro quadrado da lâmina tinha uma massa de cerca de 2 g. Como a massa volúmica do ouro é 19.3 g cm^{-3} a espessura será $t = 2 \times 10^{-4} / 19.3 \approx 10^{-5} \text{ cm}$. Supondo um raio atômico da ordem de 1 \AA a distância entre átomos seria cerca de 2 \AA , $2 \times 10^{-8} \text{ cm}$; a espessura referida corresponde a cerca de 500 camadas atômicas. Por outro lado, com estas dimensões os átomos estão encostados uns aos outros. A massa atômica do ouro é de 197 u.m.a. (unidades de massa atômica), isto é, uma mole de átomos de ouro tem uma massa de 197 g. A massa de um átomo pode pois ser calculada conhecido o número de Avogadro e obtém-se $m = 3.3 \times 10^{-22} \text{ g}$. Um centímetro cúbico de ouro tem uma massa de 19.3 g e, portanto, 5.8×10^{22} átomos. O volume por átomo é $1.7 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$. Um átomo de raio 1 \AA ocupa um volume de $(4\pi/3)(10^{-8})^3 = 0.4 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$, uma fracção apreciável do volume disponível por átomo. Em conclusão, se os átomos fossem esferas duras, impenetráveis pelas partículas α , estas não seria capazes de atravessar o ouro. No entanto Rutherford também observou que uma pequena fracção de partículas sofriam grandes desvios, algumas eram

	Bond	D , kcal/mole	r_e , Å	k , 10^5 dynes/cm	
Hydrogen	HH	103.24	0.7417	5.733	
Halogen acids	HF	134	0.917	9.655	
	HCl	102.2	1.275	5.157	
	HBr	86.5	1.414	4.116	
Hydrides	HI	70.5	1.604	3.141	
	LiH	~58	1.595	1.026	
	BeH	~53	1.343	2.263	
	BH	~70	1.233	3.03	
	CH (diatomic)	80	1.130	4.484	
	NH	~85	1.038	6.0	
	OH	103	0.971	7.791	
	NaH	47	1.887	0.781	
	MgH	46	1.731	1.275	
	AlH	67	1.646	1.620	
	SiH (in SiH ₄)	~76	1.456	2.77	
	PH (in PH ₃)	~77	1.42	3.2	
	SH	85	1.34	4.20	
	KH	43	2.244	0.561	
	CaH	39	2.002	0.977	
	RbH	39	2.367	0.515	
	SrH	38	2.145	0.854	
	CsH	42	2.494	0.467	
	BaH	42	2.232	0.809	
	First row elements	Li ₂	25	2.672	0.255
LiF		137			
BeO		124	1.331?	7.510?	
BeF		92?	1.361	5.767	
B ₂		69?	1.589	3.583	
BC (in B(CH ₃) ₃)		(66)	1.56		
BN		92?	1.281	8.328	
BO		~185	1.205	13.65	
BF		195?	1.262	8.045	
CC		137?	1.312	9.52	
CN		129?	1.172	16.29	
CO		224±3?	1.128	19.02	
CF		~106			
N ₂		170.2	1.094	22.96	
NO		122?	1.151	15.94	
NF (in NF ₃)		(56)	1.37		
O ₂		117.2	1.207	11.765	
Carbon bonds		OF (in F ₂ O)	(45.3)	1.41	5.27 or 4.26
		CH	80	1.120	4.484
		(CH)H	~92		
	(CH ₂)H	~87			
	(CH ₃)H	101	1.094	5.394	
	CH av	90.5	1.08		
	(C ₆ H ₅)H	77.5			
	(CCl ₃)H	90			
	C-C av	66.2	1.54	4.5	
	C=C av	112.9	1.35	9.6	
	C≡C av	150.3	1.21	15.6	
	(CH)≡(CH)	166?	1.20	17.2	
	(CH ₂)=(CH ₂)	125?	1.353	10.90	
	(CH ₃)-(CH ₃)	83	1.54	4.57	
	(CN)-(CN)	112	1.37	6.75 or 5.22	
	(CH ₃)-(CN)	103	1.460	5.2 or 4.94	
	(CH ₂)=(CO)	~80	1.30	9.8	
	(CH ₃)-(CO)	~17			
	(CF ₃)-(CF ₃)	124	1.52	5.45	
	(CH ₃)-(CF ₃)	117	1.53		
C-N av	(55.5)	(1.47)			
C=N av	~112				
C≡N av	(160.6)		(17.7)		

Tabela 2.1: Tabela de energias de dissociação, comprimentos de ligação e constantes de força para várias ligações químicas[3].

mesmo reflectidas.

O modelo atómico mais em voga, devido a Thompson, a quem é atribuída a descoberta do electrão, considerava o átomo como uma esfera de carga positiva de raio da ordem de 1 \AA contendo quase toda a massa do átomo e na qual estariam embebidos os electrões. Com base nos seus resultados Rutherford raciocinou que estas esferas deveriam, por um lado, ser quase transparentes às partículas α ; mas se assim fosse, não se vislumbrava no modelo de Thompson algo que pudesse explicar os grandes desvios que por vezes se observavam. Em alternativa a este modelo Rutherford propôs que no interior do átomo existiria uma região de dimensões extremamente reduzidas (muito menores que as do átomo) onde estaria concentrada toda a massa e carga positiva—o núcleo. O tamanho do átomo, sendo muito superior ao do núcleo, seria determinado pelo movimento dos electrões. Sendo a distância a que estes orbitam o núcleo muito superior às dimensões do mesmo, era natural supor que a interacção entre electrões e núcleo fosse do tipo de Coulomb, tal como entre núcleo e partículas α . Experiências posteriores de colaboradores de Rutherford, Geiger e Marsden, em 1913, vieram confirmar, de um modo inequívoco, a visão de Rutherford. Mas, como iremos ver, este modelo colocou problemas insolúveis à física clássica, alguns dos quais poderemos discutir do ponto de vista de análise dimensional. Mas antes disso iremos analisar com um pouco mais de detalhe os argumentos de Rutherford, aproveitando a oportunidade para apresentar alguns conceitos gerais que nos serão úteis em vários contextos.

Energia de interacção entre duas cargas

As forças que duas cargas exercem uma sobre a outra são iguais em módulo, têm a direcção da linha que as une e opostas em sentido. Sendo \mathbf{F}_{12} a força de q_1 sobre q_2

$$\mathbf{F}_{12}(\mathbf{r}) = k \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{e}_{12} \quad (2.1)$$

em que \hat{e}_{12} é o versor (vector de módulo unitário) da direcção de $\mathbf{r}_{12} \equiv \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$; r é a distância entre as cargas $r = |\mathbf{r}_{12}|$. A constante k no SI é dada por $k \equiv 1/(4\pi\epsilon_0)$. A força de Coulomb é um exemplo de uma força central cuja forma genérica é,

$$\mathbf{F}_{12}(r) = F(r)\hat{e}_{12}. \quad (2.2)$$

Para forças repulsivas $F(r) > 0$ e para forças atractivas $F(r) < 0$. Provar-se-á mais tarde, no estudo da mecânica, que, para sistemas de partículas com interacções deste tipo se pode formular um princípio de conservação de energia. No caso de duas partículas, afirma que, na ausência forças exercidas por outros corpos (sistema isolado), a energia total das duas partículas, soma

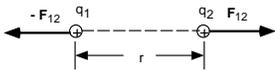


Figura 2.2: Lei de Coulomb

das energias cinéticas com uma energia potencial $U(r)$, mantém-se constante, não variando durante o movimento das partículas:

$$\frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 + U(r) = \text{const.} \quad (2.3)$$

Para fixar ideias, imaginemos a força repulsiva. Suponhamos as partículas inicialmente em repouso, a uma distância r . Se as largarmos afastar-se-ão sob acção da força repulsiva. A energia cinética das partículas aumentará. Logo, $U(r)$ deve diminuir com o aumento da distância r . Consideremos uma segundo instante em que uma das partículas se deslocou de Δr_1 e a outra Δr_2 , ambas na direcção radial. Por conservação de energia

$$U(r) = U(r + \Delta r_1 + \Delta r_2) + \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 \quad (2.4)$$

uma vez que, inicialmente, a energia cinética era nula. Mas por outro lado, sabemos que a variação de energia cinética de cada partícula é igual ao trabalho realizado pela força que a outra exerce. É certo que essa força varia à medida que a distância entre as partículas aumenta. Mas podemos sempre imaginar deslocamentos Δr_1 e Δr_2 muito mais pequenos que r , a distância inicial. Nesse caso $F(r)$ será praticamente constante no deslocamento e o trabalho realizado sobre cada partícula vale

$$W_1 = F(r)\Delta r_1 \quad (2.5)$$

$$W_2 = F(r)\Delta r_2 \quad (2.6)$$

(note-se que as forças têm a direcções dos deslocamentos). Assim

$$W_1 + W_2 = F(r)\Delta r = \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 \quad (2.7)$$

Tendo em conta a eq.(2.4) obtemos

$$F(r) = \frac{U(r) - U(r + \Delta r)}{\Delta r} \quad (2.8)$$

Como as expressões da eqs.(2.5-2.6), para W_1 e W_2 só são válidas para $\Delta r \rightarrow 0$ concluímos que

$$F(r) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{U(r) - U(r + \Delta r)}{\Delta r} = -\frac{dU(r)}{dr} \quad (2.9)$$

Obtivemos assim a relação geral entre a lei de força e a energia de interacção. Se reexaminarmos este argumento vemos que ele também é válido para forças atractivas. Nesse caso $F(r)$ é negativo. Largadas do repouso, as partículas aproximam-se. Δr_1 e Δr_2 são negativos. Todas as equações que escrevemos continuam válidas.

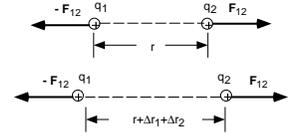


Figura 2.3: Duas cargas em instantes próximos.

Para forças repulsivas ($F(r) > 0$), a derivada dU/dr é negativa, o que significa que $U(r)$ decresce com a distância. De facto as forças são de molde a aumentar a energia cinética quando as partículas se afastam, logo a energia potencial deve diminuir. Para forças atractivas passa-se o oposto: $F(r) < 0$ e $U(r)$ cresce com a distância r .

Como exemplo, consideremos o caso da lei de Coulomb. Como $F(r) = \alpha/r^2$ ($\alpha \equiv kq_1q_2$) vem

$$U(r) = \frac{\alpha}{r} + \text{const} \quad (2.10)$$

Repare-se que adicionar um valor constante a $U(r)$ não tem qualquer consequência no princípio de conservação de energia. No caso da lei de Coulomb, como em muitas outras situações de interesse, quando o afastamento das partículas aumenta a força diminui. Para afastamentos muito grandes, $r \rightarrow \infty$, $F(r) \rightarrow 0$. Pela eq.(2.9) a energia de interacção tende para um valor constante (derivada nula). Nesse limite o princípio de conservação de energia traduz-se na constância da energia cinética apenas, já que as partículas são livres. É usual definir o valor constante de $U(r \rightarrow \infty)$ como zero. Esta escolha de zero de energia corresponde escolher a constante da eq.(2.10) igual a zero. Assim,

$$U(r) = k \frac{q_1 q_2}{r}. \quad (2.11)$$

Para forças repulsivas ($q_1 q_2 > 0$) $U(r)$ é positivo e para forças atractivas ($q_1 q_2 < 0$), negativo. Este resultado compreende-se, facilmente, comparando a energia de duas partículas paradas à distância r (energia total igual a $U(r)$) com as mesmas partículas paradas a distância infinita, um estado que pela nossa convenção tem energia nula. Se as partículas se repelem o primeiro estado é de energia superior. Ao largarmos as partículas elas afastam-se e acabarão muito distantes com alguma energia cinética. Por conservação de energia a soma das suas energias cinéticas será exactamente $U(r)$. No caso de forças atractivas, para chegarmos ao estado de energia zero, temos que exercer forças externas para afastar as partículas. Essas forças realizam trabalho positivo sobre o sistema de partículas. Ou seja, aumentam a energia do sistema. Logo a energia inicial $U(r)$ é negativa. Em conclusão, para forças atractivas a energia total pode ser negativa (inferior à energia do estado de energia cinética nula, com afastamento infinito). Os estados correspondentes chamam-se estados ligados. Nestes estados a distância máxima entre partículas é limitada. A energia de interacção cresce com a distância entre as partículas. Se a energia total é negativa existirá um valor de r para o qual $U(r)$ é igual á energia total. A distância entre as partículas não pode ultrapassar esse valor. Isto porque a energia total da partícula não pode ser inferior ao valor da sua energia potencial, pois a energia cinética é sempre positiva.

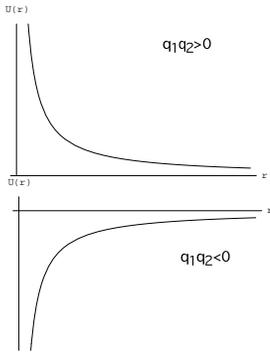


Figura 2.4: Energia potencial de duas cargas, nos casos repulsivo, $q_1 q_2 > 0$, e atractivo, $q_1 q_2 < 0$

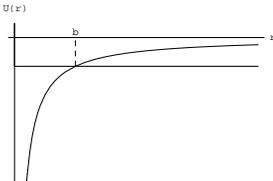


Figura 2.5: Duas partículas com energia E , não podem afastar-se mais do que b

Potencial de uma distribuição esférica de carga

No modelo de Thompson a carga positiva do átomo distribui-se numa esfera de raio d em que d é da ordem de 1 \AA . Para compreendermos a interacção de um átomo e a partícula α (de acordo com este modelo) iremos generalizar o estudo da secção anterior para o caso de uma distribuição esférica de carga e uma carga pontual. Para isso precisamos de dois resultados importantes do electromagnetismo que iremos apresentar sem demonstração:

- O campo eléctrico criado por uma distribuição esférica de carga, de carga total Q , *no seu exterior* é o mesmo que o de uma carga pontual Q situada no seu centro.
- O campo eléctrico de uma distribuição esférica de carga ôca, *na cavidade interior*, é nulo.

Estes resultados aplicam-se a todas as interacções à distância que têm a mesma forma da Lei de Coulomb, $F(r) \propto 1/r^2$. Nomeadamente, à interacção gravítica. Com efeito, usamos este resultado para escrever para o peso de um objecto de massa m à superfície da Terra

$$P = mG \frac{M_T}{R^2} \equiv mg \quad (2.12)$$

em que M_T e R são a massa e o raio da Terra. Esta força é a que uma massa M_T colocada no centro da Terra exerce sobre o corpo de massa m .

Como consequência deste resultado, a força entre uma carga pontual e a distribuição esférica de carga de raio a é dada pela expressão da eq.(2.1) enquanto a carga pontual estiver no exterior dessa distribuição ($r > a$).

$$F(r) = k \frac{qQ}{r^2} \quad (r > a) \quad (2.13)$$

e a energia de interacção é dada por

$$U(r) = k \frac{qQ}{r} \quad (r > a) \quad (2.14)$$

Para uma distância $r < a$ podemos imaginar a nossa esfera de carga dividida em duas partes, uma interior à nossa carga e outra exterior. O campo criado pela parte interior é o de uma carga pontual. O da camada exterior é nulo. Se a nossa carga estiver a uma distância $r < a$ do centro da distribuição a carga da parte interior será $Q(r) = \rho \times 4\pi r^3/3$ em que ρ é a carga por unidade de volume da esfera. Sendo Q a carga total, temos $Q = \rho 4\pi a^3/3$. Conjugando este dois resultados, podemos escrever

$$Q(r) = Q \frac{r^3}{a^3} \quad (2.15)$$

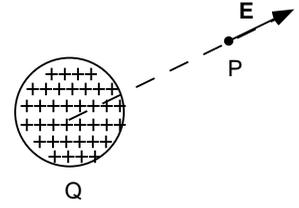


Figura 2.6:O campo em P o de uma carga pontual.

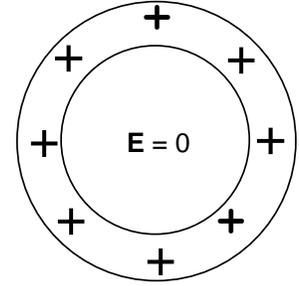


Figura 2.7:O campo é nulo dentro da cavidade.

e para a força exercida sobre a carga pontual q

$$F(r) = k \frac{qQ(r)}{r^2} = kqQ \frac{r}{a^3} \quad (2.16)$$

Usando a eq.(2.9) obtemos

$$U(r) = -kqQ \frac{r^2}{2a^3} + \text{const} \quad (r < a) \quad (2.17)$$

Temos pois duas expressões para a energia de interacção, uma válida para $r > a$ (eq.(2.14)) e a outra para $r < a$ (eq.(2.17)). As duas expressões terão que dar o mesmo valor em $r = a$. Esta condição determina o valor da constante que surge na eq.(2.17). Obtém-se

$$U(r) = \begin{cases} k \frac{qQ}{r} & r > a \\ k \left(\frac{3}{2} \frac{qQ}{a} - \frac{qQr^2}{2a^3} \right) & r < a \end{cases} \quad (2.18)$$

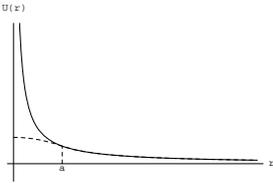


Figura 2.8: energia potencial de uma carga no campo de uma carga pontual (linha sólida) e de uma esfera de raio a , (linha a tracejado). Os valores coincidem para $r > a$.

O aspecto mais importante desta expressão comparada com a de duas cargas pontuais é o valor finito (e máximo) em $r = 0$. A energia cresce como $1/r$ até $r = a$ mas depois satura para um valor finito para $r = 0$, $U(0) = (3/2)kqQ/a$. Na próxima secção exploraremos as consequências deste resultado no contexto da experiência da Rutherford.

Descoberta do núcleo atómico

As partículas α usadas na experiência tinham energias cinéticas da ordem dos 5 MeV.¹

Podemos agora apreciar melhor o dilema colocado pelos resultados da experiência. A maior parte das partículas α atravessa a folha de ouro. Vimos atrás que não é crível pensar que os átomos sejam esferas duras com forças que impeçam a penetração das partículas α . Se assim fosse a folha seria praticamente impenetrável. Mas existe sempre a repulsão electrostática entre as esferas de carga positiva e as partículas α . Será que esta pode explicar os desvios destas? Imaginemos uma partícula α que se dirige para o centro de um átomo. À medida que se aproxima a sua energia cinética diminuirá devido ao aumento de energia potencial $U(r)$. Poderemos então ter uma situação em que a partícula pára a uma distância r do centro à qual a sua energia potencial $U(r)$ é igual à sua energia cinética inicial. Essa partícula seria reflectida e voltaria para trás repelida pelo átomo. Partículas cuja direcção fosse próxima do centro de um átomo poderiam sofrer desvios apreciáveis.

¹Recorde-se que 1 eV é a energia que um electrão adquire ao passar entre dois pontos com 1 Volt de diferença de potencial. Assim uma energia de V electrões -volt corresponde a $e \times V$ Joule, em que $-e$ é a carga de um electrão.

Mas esta explicação não leva em conta os valores das energias envolvidas. O ouro tem um número atômico de 79. A esfera de carga positiva tem uma carga de $79 \times e$. O máximo de energia potencial da partícula α será de

$$U(0) = \frac{3}{2}k \frac{qQ}{d} = \frac{3}{2}k \frac{2 \times 79e^2}{d} \quad (2.19)$$

Calculando este valor para um d de 1 \AA obtemos um valor da ordem de 1000 eV. Ora, as partículas α tinham energias da ordem de 5 *milhões* de eV! Quer dizer, o efeito das esferas atômicas no movimento das partículas α é mínimo. Uma partícula dirigida directamente para o centro de um átomo sofrerá uma ligeiríssima diminuição de velocidade na aproximação. Mas ficará muito longe de parar. Numa direcção próxima desta terá um desvio muito pequeno da sua direcção original. Uma esfera de carga com estas dimensões nunca poderá reflectir uma partícula com energia de 5 MeV!

Repare-se que é possível relaxar as nossas hipóteses sem alterar esta conclusão. Por exemplo, de acordo com o modelo de Thompson, a própria partícula α será uma esfera. Mas isso só pode diminuir ainda mais a energia de interacção. A carga da partícula nunca poderá estar concentrada no centro do átomo onde $U(r)$ é máximo. Por outro lado a distribuição de carga do modelo não tem que ser uniforme. Mas não é difícil ver, por análise dimensional, que se o átomo tiver uma dimensão característica d a energia de interacção máxima com uma carga q tem que ser da forma

$$U_{max} = \beta k \frac{qQ}{d} \quad (2.20)$$

(note-se que a energia de interacção deve ser sempre proporcional aos valores das duas cargas, porque as forças eléctricas são proporcionais às cargas) em que β é uma constante adimensional, que no caso da distribuição uniforme vale $3/2$. Mas em geral será da ordem de 1 e não alterará a estimativa da ordem de grandeza de U_{max} . Também não levamos em conta o efeito dos electrões do átomo de ouro. Mas a sua presença diminui a carga efectiva do átomo e, de novo, só pode baixar $U(r)$. Em resumo, a interacção com uma distribuição de carga positiva de dimensões da ordem 1 \AA é incapaz de explicar os grandes desvios de algumas das partícula α .

Rutherford teve a inspiração de propor que uma redução de várias ordens de grandeza do valor da dimensão da esfera de carga positiva do átomo poderia explicar os resultados. Com efeito se a carga positiva estiver concentrada numa região muito mais pequena que o átomo em si a interacção entre a partícula α e o átomo será extremamente forte para partículas que se aproximem desse núcleo. O valor de U_{max} cresce proporcionalmente a $1/d$. Com base nessa hipótese Rutherford e seus colaboradores calcularam a distribuição de desvios que seriam de esperar se cada partícula α fosse

desviada por um só núcleo, com um interacção correspondente à de duas cargas pontuais. Esse cálculo correspondeu perfeitamente (sem parâmetros ajustáveis) aos resultados das experiências de Geiger e Marsden.

Podemos até, a partir destes resultados, obter uma estimativa para um limite superior do tamanho do núcleo de ouro. Olhando para o sistema constituído por uma partícula α e o átomo de ouro que com que ela colide vemos que a energia total é de 5 MeV. É a energia cinética inicial da partícula α . A energia de interacção cresce à medida que distância diminui. Existirá um valor de r para o qual $U(r)$ valerá exactamente 5 MeV. A distância entre a partícula α e o núcleo não pode ser menor que esse valor, pois isso implicaria uma energia cinética negativa. Isto é

$$U(r_{min}) \equiv k \frac{Ze^2}{r_{min}} = E_c \quad (2.21)$$

Usando os valores $k = 9 \times 10^9$, $e = 1.6 \times 10^{-19}$ e $E_c = 5 \times 10^6 \times 1.67 \times 10^{-19} = 8 \times 10^{-13}$ Joule obtemos

$$r_{min} = 2.3 \times 10^{-14} \text{ m} = 2.3 \times 10^{-4} \text{ \AA} \quad (2.22)$$

A experiência de Geiger e Marsden verificou que, até distâncias desta ordem de grandeza, a interacção entre a partícula α e o núcleo de ouro correspondia a uma interacção entre duas cargas pontuais. Em conclusão a soma dos raios do núcleo de ouro e partícula α deve ser inferior a este valor, que, note-se, é *dez mil* vezes inferior ao tamanho de um átomo.

Estando a carga positiva e a massa do átomo concentrada no núcleo, as dimensões dos átomos serão determinadas pelo movimento dos electrões em torno do mesmo. Até distâncias várias ordens de grandeza inferiores à distância dos electrões ao núcleo a interacção entre este e as partículas α é do tipo de Coulomb, como resulta da análise anterior. Parece então natural supor que o movimento dos electrões será determinado pela mesma interacção. Como vamos ver isso coloca muitos problemas ao modelo de Rutherford.

O átomo de hidrogénio

A constante que falta

Consideremos, para fixar ideias, o caso do átomo mais simples, o de hidrogénio. A força entre o electrão e o núcleo tem a forma

$$F(r) = k \frac{e^2}{r^2} = \frac{e'^2}{r^2} \quad (2.23)$$

A lei de força introduz pois uma constante na teoria deste átomo, e'^2 , cujas dimensões são

$$[e'^2] = [F \times r^2] = ML^3T^{-2} \quad (2.24)$$

e cujo valor no SI é $e'^2 = 2.3 \times 10^{-28} \text{N m}^2$. Por outro lado, temos as massas do núcleo e do electrão como parâmetros relevantes para determinar os movimentos dentro do átomo. Sabemos também que $m_e \ll m_n$. Isto implica que as acelerações do núcleo são muito pequenas comparadas com as do electrão (as forças sobre cada uma das partículas são iguais em módulo, pelo princípio de acção e reacção). Podemos, em primeira aproximação, desprezar as acelerações do núcleo e supô-lo imóvel. Formalmente isso corresponde a tomar o limite $m_n \rightarrow \infty$ (ou, de outro modo, supor $m_e/m_n \rightarrow 0$). Nesta aproximação a massa do núcleo desaparece como parâmetro. Ficamos com mais um parâmetro apenas, a massa do electrão.

O átomo de hidrogénio é uma estrutura estável com propriedades bem definidas:

- *O tamanho:* Embora o raio do átomo não possa ser definido do mesmo modo que para uma esfera macroscópica o átomo de hidrogénio tem dimensões bem definidas. O electrão orbita o núcleo a distâncias da ordem de 1 \AA .
- *A energia de ionização:* Para afastar o electrão para uma distância grande do núcleo é necessário fornecer energia ao átomo. Para um átomo no seu estado de mais baixa energia essa energia é de 13.6 eV . Como vimos atrás, isso significa que o electrão e o núcleo formam um estado ligado de energia -13.6 eV . Se o electrão estiver a uma distância r do átomo e tiver uma velocidade v a sua energia, soma da cinética mais potencial, será:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e'^2}{r} \quad (2.25)$$

Estamos pois a dizer que existe um estado em que E toma o valor (mínimo) de -13.6 eV .

- *As frequências do espectro de radiação:* É possível fazer um átomo emitir luz fornecendo-lhe energia (por exemplo através da passagem de uma corrente eléctrica como nas lâmpadas de fluorescência). Já no tempo de Rutherford se sabia que a luz emitida por cada tipo de átomo tinha um conjunto de frequências bem determinado, que se manifesta nos espectros de riscas. De acordo com a teoria clássica da radiação uma carga com movimento de período T emite radiação com frequência $f = 1/T$ (e, eventualmente com harmónicos $2f, 3f, \dots$). Neste contexto o espectro de riscas significa que os movimentos possíveis do electrão têm frequências bem determinadas f_0, f_1, \dots , iguais às frequências observadas no espectro de riscas do átomo.

O átomo imaginado por Rutherford tem as suas propriedades determinadas por dois parâmetros e'^2 e m_e . Assim, por exemplo, o seu raio deve ser

determinado por eles

$$r_0 = f(e'^2, m_e) \quad (2.26)$$

tal como a energia de ionização

$$E_1 = g(e'^2, m_e) \quad (2.27)$$

e as frequências espectrais

$$f_n = h_n(e'^2, m_e) \quad (2.28)$$

a função f tem que ter as dimensões de um comprimento. Como não há combinações adimensionais de e'^2 e m_e terá que ter a forma

$$f(e'^2, m_e) = \text{const} \times (e'^2)^\alpha m_e^\beta \quad (2.29)$$

Dadas as dimensões destes dois parâmetros, não demora 10 segundos a verificar que não existe escolha possível de α e β que faça com que f tenha dimensões de um comprimento. Do mesmo modo se poderia verificar a impossibilidade de definir uma energia ou frequência a partir destes parâmetros. O átomo de Rutherford não pode ter um tamanho, energia ou período característicos. Uma descrição do átomo que envolva apenas os parâmetros e'^2 e m_e , não pode dar origem a uma estrutura com propriedades estáveis. Esta indeterminação reflecte o facto de que é possível uma órbita electrónica a qualquer distância do núcleo. Não é difícil ao leitor convencer-se disso considerando, por exemplo, órbitas circulares com velocidade uniforme. Como a força é dirigida para o núcleo e tem um valor constante, para distância constante, existem movimentos desse tipo, que têm uma aceleração centrípeta também dirigida para o centro da órbita e de módulo constante. Só que uma tal órbita pode existir com qualquer raio. O respectivo período e a energia da órbita variam continuamente com o raio da mesma. Com efeito, da lei de Newton

$$F(r) = m_e a_c \Rightarrow \frac{e'^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r} \quad (2.30)$$

em que $a_c = v^2/r$ é a aceleração centrípeta, tira-se a seguinte relação entre a velocidade e o raio de órbita:

$$v^2 = \frac{e'^2}{m_e r}. \quad (2.31)$$

O período ($T = 2\pi r/v$) é dado por

$$T^2 = 4\pi^2 \frac{m_e}{e'^2} r^3 \quad (2.32)$$

e a energia pode ser obtida substituindo a eq.(2.31) na eq.(2.25)

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{r} \quad (2.33)$$

Podemos obter qualquer período ou energia, dependendo de r . E não há qualquer processo de definir um raio de órbita característico com as constantes e'^2 e m_e .

Para introduzir uma constante extra na descrição do átomo teremos que modificar ou a lei de interação ou a dinâmica. Como iremos ver, foi a segunda hipótese que vingou. Em 1911 já existia uma modificação importante das leis da dinâmica—a teoria da relatividade de Einstein. As leis de Newton são modificadas para velocidades próximas da luz. Por outras palavras é introduzida a velocidade da luz como constante universal na formulação das leis da mecânica. Será c a constante que falta? Será o movimento do electrão relativista?

Com esta constante adicional não há qualquer dificuldade em definir uma energia, $E = m_e c^2$, ou uma distância, $r_0 = e'^2/m_e c^2$. Os respectivos valores são $E = 0.5 \text{ MeV} = 0.5 \times 10^6 \text{ eV}$ e $r_0 = 2.8 \times 10^{-15} \text{ m}$. Estas escalas diferem várias ordens de grandeza das que são características do átomo de hidrogénio (13.6 eV e 10^{-10} m). Se o raio do átomo fosse dado por uma expressão do tipo $a_0 = \alpha r_0$ a constante adimensional teria que ser da ordem de 10^5 o que não é usual para constantes adimensionais. Mas, mais convincentemente, é possível fazer uma estimativa da velocidade do electrão no átomo de hidrogénio e concluir que ela é bastante inferior à da luz. O átomo de hidrogénio tem várias riscas espectrais na zona do espectro visível cujos comprimento de onda λ andam entre 4000 \AA e 7000 \AA . As frequências correspondentes são dadas por

$$\lambda f = \frac{\lambda}{T} = c \quad (2.34)$$

o que dá, para a zona do visível:

$$f \sim 0.4 \times 10^{15} - 0.75 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \quad (2.35)$$

O período de movimento do electrão é então da ordem $T \sim 10^{-15} \text{ s}$. Sendo d a dimensão característica do átomo a velocidade pode ser estimada em

$$v \sim \frac{d}{t} \sim 10^5 \text{ m s}^{-1} \quad (2.36)$$

isto é $v/c \sim 10^{-3}$. Estamos no limite não relativista e a velocidade da luz não deve ser um parâmetro relevante.

Bohr e a constante de Planck

Foi Niels Bohr que, em 1913, introduziu uma nova constante universal na teoria do átomo. Mas esta constante já existia num contexto diferente. Planck tinha-a introduzido em 1900 numa tentativa (bem sucedida) de explicar a distribuição em frequência da energia radiada por um corpo a uma

dada temperatura. Cinco anos mais tarde Einstein desenvolveu as ideias de Planck ao propor que radiação de frequência f está quantificada em pacotes de energia (quanta de luz, ou fótons) dados por

$$E = hf \quad (2.37)$$

em que h é a constante de Planck. Não era de modo nenhum claro que esta constante, que caracterizava propriedades da radiação electromagnética, tivesse algo a ver com a dinâmica do átomo. Bohr teve a ousadia de propor que sim. Claro que uma nova constante implica uma nova lei. Bohr fez dois postulados surpreendentes. No primeiro, propôs que, de todas as órbitas classicamente permitidas, só algumas são possíveis e estáveis; mais precisamente, aquelas em que o momento angular do electrão (órbita circular) vale

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (2.38)$$

($\hbar \equiv h/2\pi$ é a constante de Planck reduzida, ou como é universalmente conhecida “h cortado”) e n é um inteiro. No segundo postulado defendeu que o átomo só emite radiação quando um electrão transita entre duas órbitas permitidas, emitindo um quantum de luz, de energia igual à diferença de energia das órbitas final e inicial e com frequência dada pela relação de Einstein (eq.(2.37)).

A hipótese de Bohr é absolutamente incompreensível no contexto da física clássica no âmbito da qual é formulada. Durante 13 anos os físicos tiveram condições semelhantes a esta *enxertadas* em teorias clássicas com as quais continuavam a calcular as órbitas.

Mas o seu sucesso na previsão do espectro do átomo de hidrogénio era impossível de ignorar. Com efeito, combinando o seu postulado relativo ao momento cinético, eq.(2.38), com a eq.(2.31) obtemos um conjunto discreto de órbitas possíveis com raios

$$r_n = n^2 a_0 \quad (2.39)$$

em que

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e'^2} \quad (2.40)$$

é o raio de Bohr e tem o valor de 0.53 \AA . As energias correspondentes são

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{r_n} = -\frac{1}{n^2} R \quad (2.41)$$

em que

$$R \equiv \frac{1}{2} \frac{m_e e'^4}{\hbar^2} \quad (2.42)$$

e vale precisamente 13.6 eV. Pelo segundo postulado, numa transição entre duas órbitas, $n_i \rightarrow n_f$ é emitido um fóton de energia $E = E_{n_i} - E_{n_f}$ e frequência dada pela equação de Einstein, eq.(2.37)

$$f_{if} = \frac{R}{2\pi\hbar} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (2.43)$$

Esta fórmula descreve com excelente grau de precisão o espectro de radiação do átomo de hidrogénio². Note-se que não contém qualquer parâmetro ajustável. Apenas constantes fundamentais cujos valores já eram conhecidos na altura.

Apesar deste sucesso, o próprio Bohr tinha plena consciência da precariedade da sua teoria e do seu mais que questionável enxerto de condições de quantificação como a eq.(2.38) na teoria clássica. Foi impossível de generalizar para átomos mais complexos (por exemplo, o de hélio). Alguns aspectos do postulado de Bohr sobreviveram na nova mecânica (mecânica quântica) que veio substituir a clássica e que foi inventada em 1926 por Schrödinger e Heisenberg. Mas o aspecto fundamental é que a mecânica quântica introduz também, para além das constantes que caracterizam as interações e das massas, a constante \hbar . Assim a teoria de Bohr tem pelo menos o conjunto correcto de constantes para descrever o átomo.

Recordemos as dimensões

$$\begin{aligned} [m_2] &= M \\ [e'^2] &= ML^3T^{-2} \\ [\hbar] &= ML^2T^{-1} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Com estes parâmetros não é difícil ver que existe uma única escala de comprimentos, precisamente $\hbar/m_e e'^2$, o raio de Bohr. A partir daí obtêm-se as escalas de energia e frequência que Bohr encontrou a partir dos seus postulados. No que se segue exploraremos sobretudo este aspecto da teoria em situações mais complexas. A teoria de Bohr tem todas as constantes fundamentais necessárias para a caracterização do átomo. Ainda que não possa ser generalizada com facilidade para átomos com mais do que um electrão, ou para moléculas, esse facto é suficiente para podermos tirar algumas conclusões sobre algumas das suas características.

²A constante R define uma escala de energia, o Rydberg. A substituição das constantes pelos seus valores SI na eq.(2.38) dá o valor de R em Joule. As tabelas indicam normalmente o valor de R em m^{-1} . A razão é a seguinte: um fóton de energia E tem um comprimento de onda dado por $1/\lambda = f/c = E/hc$. O valor de R em m^{-1} é o valor do inverso do comprimento de onda de um fóton com energia $m_e e'^4/2\hbar^2$, isto é, $R(m^{-1}) = m_e e'^4/(4\pi\hbar^3 c) = 1.097 \times 10^{-7} m^{-1}$.

Raios e energias em átomos polieletrónicos

Consideremos agora um átomo de número atómico Z . O seu núcleo tem carga Ze . A força com que atrai cada electrão é dada por

$$F(r) = -\frac{Ze^{\prime 2}}{r^2}. \quad (2.45)$$

Comparando com o átomo de hidrogénio ($Z = 1$) vemos que na lei de interacção temos a substituição $e^{\prime 2} \rightarrow Ze^{\prime 2}$. Para um tal núcleo o raio de Bohr seria

$$a'_0 = \frac{\hbar^2}{m_e Ze^{\prime 2}} = \frac{a_0}{Z} \quad (2.46)$$

Quererá isto dizer que um átomo de $Z = 50$ (estanho), por exemplo, é 50 vezes menor que o de hidrogénio? Já mencionamos atrás que os raios atómicos variam entre 0.5 Å e 3 Å, enquanto que Z tem uma variação de um factor de 100 ao longo do quadro periódico.

Na verdade estamos a esquecer-nos que um átomo de carga nuclear Ze tem $\dots Z$ electrões. Estes repelem-se mutuamente e essa repulsão compensa largamente o aumento de carga do núcleo. Do jogo destes dois factores resulta um raio atómico razoavelmente constante em ordem de grandeza. Um electrão é atraído pela carga Ze do núcleo mas repellido por $Z - 1$ outros electrões. O raio atómico é determinado pelo movimento dos electrões mais exteriores. Recordemos que uma distribuição esférica de carga cria no seu exterior um campo idêntico ao que criaria se estivesse concentrada no seu centro. Se $Z - 1$ electrões se distribuíssem com simetria esférica em torno do núcleo o campo no exterior desta distribuição seria o de uma carga pontual $Ze + (Z - 1)(-e) = e$, exactamente o do núcleo de hidrogénio.

Naturalmente a situação real é muito mais complexa e só com um tratamento quântico completo da estrutura do átomo é possível compreender as variações características do raio atómico ao longo do quadro periódico. Mas este argumento permite compreender porque é que uma única escala de distância caracteriza o tamanho de todos os átomos.

A situação para as energias electrónicas é um pouco mais complicada. Já referimos atrás que a energia de ionização do átomo de hidrogénio é de 13.6 eV. Num átomo com muitos electrões há vários estados energéticos ocupados, com diferentes energias de ligação. O argumento dado atrás para o raio sugere que os electrões mais fracamente ligados (que mais facilmente podem ser afastados do resto do átomo) devem ter energias semelhantes à energia de ionização do átomo de hidrogénio. Esta suposição é confirmada pela consulta ao quadro periódico (ver Tabela 2.2)

Mas há electrões muito mais fortemente ligados ao núcleo. Os electrões que se movem em órbitas mais interiores não sentirão repulsão de electrões

Elemento	Z	E_1 (eV)
H	1	13.59
O	8	13.62
K	19	4.34
Cu	29	7.73
Pb	82	7.42
U	92	6.05

Tabela 2.2: energia de ionização mais baixa para vários elementos.

mais exteriores, pois como vimos na discussão do modelo de Thompson, uma camada esférica de carga tem no seu interior (ôco) um campo nulo. Ignorando completamente o efeito dos restantes $Z - 1$ electrões devemos obter um limite superior para energia de ligação. A constante de Rydberg para um átomo com carga nuclear Z e apenas um electrão é obtida da do átomo de hidrogénio apenas pela substituição $e'^2 \rightarrow Ze'^2$,

$$R' = \frac{m(Ze'^2)^2}{2\hbar^2} = Z^2R. \quad (2.47)$$

Como Z atinge valores da ordem de 100 isto corresponde a energias da ordem de 10^5 eV. Esta estimativa revela-se um pouco exagerada. O efeito de repulsão entre electrões reduz este valor de quase uma ordem de grandeza. As energias de ligação variam entre valores da ordem de alguns eV até cerca de 10^4 eV. Numa transição entre dois níveis com uma diferença de energia de 1 eV teremos radiação de comprimento de onda

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \frac{\Delta E}{2\pi\hbar c} = \frac{e}{2\pi\hbar c} = = \frac{1.6 \times 10^{-19}}{2\pi(1.05 \times 10^{-34})(3 \times 10^8)} \\ &= 0.08 \times 10^{-7} \text{ m}^{-1} \end{aligned} \quad (2.48)$$

o que dá $\lambda \sim 12000\text{Å}$ na região de infravermelho do espectro. Para energias da ordem de 10^4 eV teremos comprimentos de onda 10^4 vezes inferiores $\lambda \sim 1.2\text{Å}$. Radiação deste comprimento de onda corresponde à região de raios X do espectro electromagnético. Em conclusão devemos esperar os espectros atómicos, associados a transições electrónicas, a abranger desde o infravermelho até os raios X para os átomos mais pesados.

Moléculas e sólidos

Comprimentos de Ligação e Energias de Dissociação

Na tabela 2.1 retirada do *Handbook of Physics* [3] apresentam-se valores das energias de dissociação e distâncias internucleares para vários tipos de ligação química em diferentes moléculas. Para uma molécula diatómica, a energia de dissociação é, basicamente, a energia de ligação dos dois átomos, isto é, a energia necessária para separar os dois átomos até uma distância suficientemente grande para que a sua interacção possa ser desprezada (ver secção 2.2.1. Mesmo em moléculas poliatómicas é possível, analisando certas reacções, determinar a energia necessária para “partir” uma dada ligação. Por vezes a energia associada a uma determinada ligação entre dois tipos de átomo ($C - C$, $C - N$, etc) é aproximadamente constante, de molécula para molécula, e é possível associar-lhe uma *energia de ligação média*.

A primeira observação é que as distâncias internucleares variam entre cerca de $1 \sim 2 \text{ \AA}$. Não há ligações químicas com distâncias internucleares de 10 ou 100 \AA . As energias de dissociação estão nas unidades favoritas dos químicos, kcal/mole. Recordemos que uma caloria vale 4.18 Joule. Designando por N_0 o número de Avogadro vemos que

$$\begin{aligned} 1 \text{ kcal/mole} &= \frac{4.18 \times 10^3}{N_0} \text{ J/molécula} \\ &= \frac{4.18 \times 10^3}{N_0 e} \text{ eV/molécula} = 0.043 \text{ eV/molécula} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Assim 100 kcal/mole são 4.35 eV/molécula. A consulta da tabela mostra que as energia de dissociação são tipicamente da ordem de $2 \sim 6 \text{ eV}$ por ligação. Quer a escala de distâncias quer a de energias são as mesmas que para os átomos.

A razão é que a ligação química é um fenómeno de natureza essencialmente electrónica e dominado pelo comportamento dos electrões mais fracamente ligados—os electrões de valência. Os núcleos, com os electrões mais fortemente ligados, formam uma unidade relativamente inalterada pela interacção entre os diferentes átomos. A ligação química envolve sobretudo os electrões mais fracamente ligados, os electrões de valência. Estes vêm então uma carga nuclear efectiva da ordem de e devido ao efeito de blindagem dos outros electrões. Temos então as seguintes interacções envolvidas na ligação química:

- Atracção entre os electrões de valência e os núcleos rodeados dos electrões fortemente ligados.

$$F_{el-n} \sim \frac{e'^2}{r_{el-n}^2} \quad (2.50)$$

- A repulsão entre as unidades constituídas pelos núcleos e electrões fortemente ligados

$$F_{n-n} \sim \frac{e'^2}{r_{n-n}^2} \quad (2.51)$$

- A repulsão entre electrões de valência

$$F_{el-el} \sim \frac{e'^2}{r_{el-el}^2} \quad (2.52)$$

Como vemos estas interacções introduzem apenas uma constante dimensional e'^2 . Além deste parâmetro teremos a massa do electrão m_e e a constante de Planck \hbar que traduz a natureza quântica do fenómeno. As massas nucleares não devem ser parâmetros relevantes, em primeira aproximação,

por serem muito superiores à do electrão. O argumento é semelhante ao que usamos na discussão do átomo de hidrogénio. O movimento dos núcleos deve ser muito mais lento que o dos electrões devido à diferença de massa. Em primeira aproximação são considerados imóveis e o estado electrónico é calculado para uma dada posição dos núcleos. A energia total será, naturalmente, função dessa posição. A configuração de equilíbrio da molécula corresponde à distância internuclear para a qual essa energia é mínima. Em conclusão, temos exactamente os mesmos parâmetros dimensionais que no caso do átomo de hidrogénio, e'^2 , m_e e \hbar . Não surpreende, então que tenhamos a mesma escala de distâncias

$$d \sim \frac{\hbar^2}{m_e e'^2} \quad (2.53)$$

e de energias

$$\epsilon = \frac{m_e e'^4}{2\hbar^2} \quad (2.54)$$

e, portanto distâncias internucleares da ordem de poucos Å e energias de dissociação de alguns eV. Recordemos a propósito que uma reacção química é fundamentalmente um rearranjo de ligações. O que acabamos de dizer permite-nos concluir que não devemos esperar mais do que uma variação de energia de alguns eV por ligação (absorvidos ou libertados conforme a reacção for endotérmica ou exotérmica).

Como ilustração desta ideia recordemos que os explosivos convencionais derivam a energia que libertam de reacções químicas, não podendo por isso libertar mais do que alguns N_0 eV por mole de material (N_0 , número da Avogadro); mas os explosivos nucleares resultam de reacções nucleares, que alteram a estrutura dos próprios núcleos. Isso envolve interacções mais fortes que as electromagnéticas, interacções nucleares, com uma escala de energia, tipicamente *um milhão* de vezes superior à das interacções electromagnéticas nos átomos. Por exemplo a energia média de ligação por nucleão nos núcleos é de cerca de 8 MeV (10^6 eV)

Constantes de Força e Frequências de Vibração Molecular

A tabela referida tem uma terceira coluna relativa a constantes de força. Vimos acima que, para efeito de determinação de movimentos electrónicos, os núcleos de uma molécula podem ser considerados em repouso, devido à sua elevada massa. Mas, naturalmente a energia electrónica e portanto a energia total do agregado molecular dependerá da posição dos núcleos. Esquemáticamente a dependência da energia na distância internuclear será do tipo representado na fig.(2.8). Para grandes distâncias temos o estado de átomos separados (zero de energia, por convenção). A molécula só se poderá formar

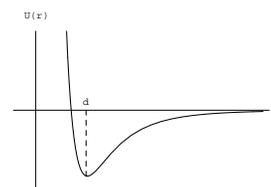


Figura 2.9: energia de uma molécula em função da distância internuclear.

se a energia for negativa, para distâncias finitas. A distância de equilíbrio corresponderá ao mínimo de energia³. A interação repulsiva entre núcleos é a dominante a muito pequenas distâncias e a energia torna-se positiva para r muito pequeno. Se afastarmos os núcleos da posição de equilíbrio (o que pode acontecer, por exemplo, numa colisão entre duas moléculas) surgem forças que tendem a fazê-las voltar à distância de equilíbrio. Para pequenos deslocamentos a força é proporcional a esse deslocamento

$$F(r_0 + \Delta r) = -k\Delta r \quad (2.55)$$

(se $\Delta r > 0$ a força deve ser atractiva, se $\Delta r < 0$ repulsiva). Tal como uma mola, uma ligação química pode ser caracterizada por uma constante de força. É claro da discussão anterior que estas constantes devem ser determinadas, mais uma vez, por e^2 , \hbar e m_e . Atentando às respectivas dimensões

$$[k] = [\text{força} \times \text{distância}^{-1}] = [\text{energia} \times \text{distância}^{-2}] \quad (2.56)$$

obtemos como estimativa

$$k \sim \frac{R}{a_0^2} \sim 48 \text{ eV } \text{Å}^{-2} \quad (2.57)$$

A tabela apresenta os valores de k em dyne cm^{-1} que vale $6.25 \times 10^{-5} \text{ eV } \text{Å}^{-2}$. Por exemplo, $k(H-H) = 35.6 \text{ eV } \text{Å}^{-2}$, $k(C-C) = 28.2 \text{ eV } \text{Å}^{-2}$.

As forças referidas na eq.(2.55) fazem com que as moléculas vibrem se os núcleos se afastarem das posições de equilíbrio. Esta oscilação terá um período determinado pela constante k e pela massa nuclear (agora sim ela é importante pois são os núcleos que se movem). Por análise dimensional, as frequências de vibração serão da ordem de (para núcleos de número de massa $A \sim 1$)

$$f_{vib} \sim \sqrt{\frac{k}{m_p}} \quad (2.58)$$

em que m_p a massa do protão. Usando a nossa estimativa de k

$$f_{vib} \sim \sqrt{\frac{R}{a_0^2 m_p}} \quad (2.59)$$

Usando $\hbar^2/2ma_0^2 = R$ e ignorando factores numéricos adimensionais, chegamos a

$$f_{vib} \sim \sqrt{\frac{m_e}{m_p}} f_{el} \quad (2.60)$$

³No mínimo, $dU/dr \equiv F(r) = 0$, ver secção 2.2.1. O anulamento da força entre os dois núcleos caracteriza a situação de equilíbrio

em que $f_{el} = R/h$ é da ordem de grandeza das frequências que correspondem a mudanças de estado dos electrões (eq(2.43)). Como $m_e/m_p \sim 1/2000$ concluimos que $f_{vib} \sim 10^{-2} f_{el}$. Na teoria quântica os estados de vibração das moléculas também constituem um conjunto de níveis discretos. As transições entre eles também podem ser acompanhadas da emissão de radiação. Mas, como vemos, as frequências dos fotões respectivos são muito mais baixas do que em transições electrónicas e correspondem a radiação na zona do infravermelho.

Sólidos

A massa volúmica de um sólido é dada pela razão entre a sua massa e o seu volume, $\rho = m/V$. Se a distância entre átomos vizinhos for designada por d o volume por átomo pode ser estimado como sendo da ordem de $v_{at} \sim d^3$. A massa num tal volume é a massa de um átomo. Logo num sólido com um único tipo de átomo podemos escrever para a massa volúmica

$$\rho \sim \frac{m_{at}}{d^3} \quad (2.61)$$

o que nos permite estimar a distância interatómica a partir de ρ e da massa molar do elemento (massa de uma mole em gramas)

$$d \sim \left(\frac{M}{N_0 \rho} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.62)$$

(N_0 é o número de Avogadro). A tabela (2.3) contém dados retirados do *SDB*[4], mas acessíveis em qualquer bom quadro periódico, e na última coluna mostra os valores de d em Å estimados pela fórmula anterior. É de notar que tal como nas moléculas as distâncias interatómicas estão entre $2 \sim 3$ Å. O argumento que demos para as distâncias internucleares nas moléculas aplica-se também aqui.

No caso de redes cristalinas cúbicas é possível um cálculo mais rigoroso de d . O alumínio, por exemplo tem uma estrutura cristalina do tipo cúbica de faces centradas. Isto significa que é constituído por repetição de uma célula cúbica em que os átomos de alumínio ocupam os vértices e o centro das faces. Cada átomo de um vértice é partilhado por oito células; cada átomo de uma face por duas. Isto significa que há um total de $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ átomos por célula unitária. Logo a massa volúmica é

$$\rho = 4 \frac{m_{at}}{a^3} \quad (2.63)$$

em que a é a aresta do cubo. Encontra-se para o *Al* $a = 4$ Å. A menor distância entre átomos é meia diagonal de uma face, isto é $d = a/\sqrt{2} = 2.86$ Å.

Elemento	ρ g cm ⁻³	M	d (Å)
Al	2.7	27	2.55
Cr	7.2	52	2.29
Cu	8.9	63	2.27
Ga	7.9	157	2.11
Pb	11	207	3.2
Ir	22.4	192	2.44
Au	19.3	197	2.57
Pt	21.4	195	2.47

Tabela 2.3: estimativa de distâncias interatômicas em alguns sólidos.

Encoraja-se o leitor a pegar num quadro periódico e confirmar com mais generalidade que as variações de massa volúmica da matéria sólida são mais devidas às diferenças de massa dos átomos que das distâncias entre eles.

Leituras Recomendadas

- *Physics for the Inquiring Mind*, E. M. Rogers Cap 40. Uma obra muito original que merece bem uma vista de olhos.
- *Introdução à Física da Matéria*, J. Bessa de Sousa. Estas notas podem ser encontradas na Biblioteca do Departamento de Física da Universidade do Porto e constituem uma excelente alternativa e complemento da perspectiva que foi aqui adoptada.

Capítulo 3

Modelos Determinísticos

Equações de Movimento na Dinâmica de Newton

A Realidade e os Modelos

Uma massa presa à extremidade de uma mola. É difícil imaginar um sistema físico mais simples. Mas, se pensarmos bem na quantidade de fenômenos que podemos testemunhar num tal sistema, a nossa impressão pode sair modificada. Vejamos:

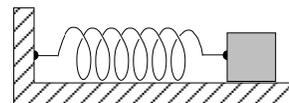


Figura 3.1:Um sistema físico simples?

- Deformação elástica da mola e movimento da massa.
- Alterações de temperatura do sistema e do ambiente circundante.
- Variação da massa por desgaste na mesa.
- Alterações físicas (fadiga) das propriedades elásticas da mola.
- Alterações químicas (corrosão).
- Flutuações de pequena amplitude da posição da massa, mesmo quando macroscopicamente em repouso.

Tudo isto são processos que podem e estão a ocorrer neste sistema. Como é possível chegar a uma descrição consistente de um fenómeno quando o número de processos simultâneos, num sistema tão simples, é já tão elevado?

A descrição científica envolve, de um modo geral, a construção de um modelo, uma representação simplificada da realidade que pretende apenas captar uma pequena parte do que se poderia à partida descrever. Nesta construção do modelo entram muitas suposições, muitas operações que, a maior parte das vezes, nem sequer são explicitadas. Assim por exemplo:

- Limitando as “janelas” temporais (espaciais) de observação pode tornar-se possível ignorar fenômenos que ocorrem em escalas muito rápidas ou

muito lentas. Por exemplo, fenómenos como a fadiga do metal da mola, a sua corrosão, o desgaste da massa, ocorrem em escalas de tempo de observação de meses ou mesmo de anos. As oscilações da massa podem ter períodos de alguns segundos. Um tempo de observação de alguns minutos é mais do que suficiente para medir períodos de oscilação, mas nesta escala de tempo os fenómenos mais lentos não se manifestam. Considerações semelhantes se aplicam a escalas espaciais. Por exemplo, estando a mola presa a uma das faces da massa, esta pode deformar-se quando se move. Mas, enquanto que o deslocamento do centro da massa pode ser de alguns centímetros, a variação das dimensões da massa pode não ultrapassar alguns décimos ou centésimos de mm.

- Limitando a gama de observações de variáveis físicas podemos, frequentemente, simplificar a descrição. Por exemplo podemos usar régua e cronómetros para medir tempos e posições mas ignorar variações de temperatura, campos electromagnéticos, etc.
- Podemos escolher as condições das experiências de modo a manter fixas certas grandezas físicas estudando apenas as variações das outras.

Seria possível continuar esta lista. Um momento de reflexão confirma que a descrição de um fenómeno, envolve, em geral, a construção do modelo e que esta passa por uma selecção de observáveis possíveis $x(t)$, $y(t)$, ... cujos valores e variações temporais pretendemos compreender.

O que é de certo modo notável (mas que por outro lado é quase uma pré-condição de existência de uma descrição científica) é que, das simplificações referidas, possa resultar um conjunto de grandezas físicas “completo”, no sentido em que o seu comportamento e evolução possa ser estudado sem referência às inúmeras grandezas que, embora presentes no sistema real, foram eliminadas no processo de construção do modelo. Concretamente, referindo-nos ao exemplo da massa e mola é possível uma descrição do movimento usando uma única variável $x(t)$ que caracteriza o deslocamento relativo à posição de equilíbrio. Para descrever a evolução temporal de $x(t)$ não é necessária qualquer referência à miríade de fenómenos físicos e químicos que acompanham esse movimento.

A Dinâmica de Newton

A dinâmica de Newton é o primeiro conjunto de leis gerais que permite a construção sistemática de leis de evolução para uma grande número de sistemas físicos. Este “esquema” newtoniano assenta em duas vertentes:

- a) *As leis da dinâmica*: a segunda lei, em particular, determina a aceleração de um corpo em termos da resultante das forças sobre ele exercidas.

As várias componentes da aceleração estão relacionadas com o modo como variam no tempo as coordenadas do corpo. Estas podem ser determinadas através da observação do seu movimento. Veremos também que o movimento pode ser reconstruído a partir do conhecimento dessa aceleração. A segunda lei reduzir-se-ia a uma definição de força, se não fosse complementada por uma especificação independente que permita calcular as forças e daí inferir as acelerações. É aqui que surge a segunda vertente do esquema newtoniano.

- b) As leis de força:** no esquema newtoniano as forças sobre um corpo são atribuídas à presença (próxima ou distante) de outros corpos. As leis de força especificam estas interacções, determinando o valor das forças em termos da configuração dos corpos.

É a combinação destes dois aspectos que confere à mecânica newtoniana o seu carácter de descrição completa do movimento. A configuração dos corpos determina os valores das forças. Essa forças, pela segunda lei, determinam as acelerações e, portanto, a variação temporal dessa configuração. Neste capítulo vamos concretizar este programa em alguns exemplos. Teremos oportunidade de apresentar algumas ideias cuja importância e aplicabilidade transcende largamente o âmbito de mecânica.

Velocidade e Aceleração

Consideremos uma coordenada de posição de um corpo $x(t)$. Queremos considerar o problema de determinar a velocidade, $v_x(t)$, e aceleração, $a_x(t)$, correspondentes, a partir de $x(t)$ e também o problema inverso, de reconstruir $x(t)$ a partir do conhecimento da aceleração.

Considerando um intervalo de tempo Δt , definimos a velocidade média do corpo nesse intervalo

$$v_m = \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (\text{velocidade média em } [t, t + \Delta t]) \quad (3.1)$$

que podemos reescrever como

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v_m \Delta t \quad (3.2)$$

Esta equação é exacta pois, no fundo, é a definição de velocidade média no intervalo $[t, t + \Delta t]$. Mas suponhamos que queremos caracterizar o movimento para todos os instantes do intervalo $[t, t + \Delta t]$. Não podemos, por exemplo, escrever

$$x(t + h) = x(t) + v_m h \quad (0 \leq h \leq \Delta t) \quad (3.3)$$

porque a velocidade média num intervalo mais pequeno que Δt não é em geral a mesma que em Δt . Só seria se o movimento fosse uniforme (a mesma

velocidade média em qualquer intervalo). O conceito de velocidade média está associado não a um instante, mas a um intervalo de tempo finito. No entanto, considerando intervalos sucessivamente mais pequenos, podemos chegar a um conceito de conceito de velocidade instantânea, isto é, associada a cada instante

$$v_x(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} = \frac{dx(t)}{dt}. \quad (3.4)$$

Se recordarmos a noção matemática de limite vemos que por mais pequeno que seja um número real $\epsilon > 0$ podemos sempre escolher um Δt suficientemente pequeno tal que

$$\left| \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} - v_x(t) \right| < \epsilon \quad (3.5)$$

Designando por ϵ' a diferença que surge no primeiro membro, isto significa que

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v_x(t)\Delta t + \epsilon'\Delta t = x(t) + (v_x(t) + \epsilon')\Delta t \quad (3.6)$$

em que $|\epsilon'| < \epsilon$. A velocidade média num intervalo à volta de t é $v_x(t) + \epsilon'$, a velocidade instantânea em t mais uma correcção, que pode ser tornada tão pequena quanto queiramos se tomarmos Δt suficientemente pequeno. A velocidade instantânea em t caracteriza o movimento num intervalo de tempo infinitesimal à volta de t .

A relação entre aceleração e velocidade é idêntica à relação que acabamos de discutir, entre $v_x(t)$ e $x(t)$. Do mesmo modo que $v_x(t)$ caracteriza a variação de $x(t)$ assim $a_x(t)$ caracteriza a variação de $v_x(t)$. Definimos uma aceleração média,

$$a_m = \frac{v_x(t + \Delta t) - v_x(t)}{\Delta t} \quad (\text{aceleração média em } [t, t + \Delta t]) \quad (3.7)$$

e instantânea

$$a_x(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{v_x(t + \Delta t) - v_x(t)}{\Delta t} = \frac{dv_x(t)}{dt} \quad (3.8)$$

Dizemos que $v_x(t)$ é a primeira derivada de $x(t)$ em ordem a t . Logo $a_x(t)$ é a primeira derivada de $v_x(t)$ em ordem a t e a segunda derivada de $x(t)$:

$$a_x(t) = \frac{dv_x(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dx}{dt} \right) \equiv \frac{d^2x}{dt^2} \quad (3.9)$$

Como na eq.(3.6) podemos escrever

$$v_x(t + \Delta t) = v_x(t) + a_x(t)\Delta t + \epsilon''\Delta t = v_x(t) + (a_x(t) + \epsilon'')\Delta t. \quad (3.10)$$

A aceleração instantânea, $a_x(t)$ caracteriza a variação de velocidade num intervalo de tempo infinitesimal em torno de t .

Voltemos ao nosso exemplo inicial da massa na mola. Designemos por $x(t)$ o deslocamento da massa relativamente à sua posição de equilíbrio. A força sobre a massa é devida à mola. E a força que esta exerce pode exprimir-se à custa da sua variação de comprimento

$$F = -k\Delta l \quad (3.11)$$

Mas $\Delta l = x(t)$, o deslocamento da massa da posição de equilíbrio. O resultado é uma lei de força

$$F = -kx \quad (3.12)$$

que exprime a força em termos da posição da massa. A segunda lei toma então a forma

$$a_x(t) \equiv \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x(t). \quad (3.13)$$

Vimos acima como a partir de $x(t)$ se poderia obter $a_x(t) \equiv d^2x/dt^2$. O nosso problema de dinâmica ficou resumido a esta *equação de movimento*, isto é, à procura de movimentos $x(t)$ cuja $a_x(t)$ satisfaça a eq.(3.13).

Estas definições generalizam-se facilmente para sistemas mais complexos. Por exemplo, é simples incluir forças de atrito que dependem em geral da velocidade do corpo. Se a massa estiver sujeita a um atrito do tipo de Coulomb, no seu deslizamento sobre uma mesa, temos uma força adicional com sinal oposto à velocidade (mg é a reacção normal da mesa sobre a massa)

$$F_a = -\mu mg \operatorname{sgn}(v_x) \quad (3.14)$$

em que:

$$\operatorname{sgn}(v_x) = \begin{cases} +1 & v_x > 0 \\ -1 & v_x < 0 \end{cases}$$

A equação de movimento teria a forma:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x(t) - \mu g \operatorname{sgn}(v) \quad (3.15)$$

De um modo inteiramente geral, para um sistema caracterizado por uma coordenada $x(t)$, a equação de movimento terá uma forma

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f((x(t), v(t))) \quad (3.16)$$

em que a função $f(x, v)$ será determinada pelas leis de força.

Na maior parte das situações, a especificação da configuração de uma sistema requer mais do que uma única coordenada. Por exemplo, para uma

partícula material em movimento a 3 dimensões teríamos 3 coordenadas $x(t), y(t), z(t)$, das quais poderíamos definir três velocidades

$$v_x(t) = \frac{dx}{dt} \quad (3.17)$$

$$v_y(t) = \frac{dy}{dt} \quad (3.18)$$

$$v_z(t) = \frac{dz}{dt} \quad (3.19)$$

e 3 acelerações.

$$a_x(t) = \frac{dv_x}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} \quad (3.20)$$

$$a_y(t) = \frac{dv_y}{dt} = \frac{d^2y}{dt^2} \quad (3.21)$$

$$a_z(t) = \frac{dv_z}{dt} = \frac{d^2z}{dt^2} \quad (3.22)$$

A segunda lei é válida para cada uma destas componentes,

$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= F_x/m \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= F_y/m \\ \frac{d^2z}{dt^2} &= F_z/m \end{aligned} \quad (3.23)$$

As equações de movimento ficariam completas, por exemplo, se soubéssemos a dependência das componentes da força nas coordenadas de posição da partícula.

$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= f_x(x, y, z) \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= f_y(x, y, z) \\ \frac{d^2z}{dt^2} &= f_z(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Obtemos assim um sistema de equações de natureza semelhante à eq.(3.16)

O conteúdo de uma equação de movimento

Consideremos então uma equação de movimento genérica com a forma

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f(x(t), v(t)) \quad (3.25)$$

em que supomos a função $f(x, v)$ conhecida. Como estamos a lidar com uma única coordenada usaremos o símbolo v para identificar a respectiva componente de velocidade. Que informação contém esta equação de movimento e como obtê-la?

Recordemos a definição de aceleração

$$a(t) = \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{dv}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} \quad (3.26)$$

Isto significa que para Δt suficientemente pequeno

$$\frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} = a(t) + \epsilon \quad (3.27)$$

em que ϵ é tão pequeno quanto se queira. Isto é:

$$v(t + \Delta t) = v(t) + a(t)\Delta t + \epsilon\Delta t \quad (3.28)$$

e de modo semelhante

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \epsilon'\Delta t. \quad (3.29)$$

Usando a equação de movimento

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \epsilon'\Delta t \quad (3.30)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + f(x(t), v(t))\Delta t + \epsilon\Delta t \quad (3.31)$$

Usando um Δt suficientemente pequeno as correcções $\epsilon'\Delta t$ e $\epsilon\Delta t$ podem fazer-se desprezáveis em comparação com os termos anteriores pois $\epsilon, \epsilon' \rightarrow 0$ se $\Delta t \rightarrow 0$. Isto é, com uma precisão tão boa quanto queiramos

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t \quad (3.32)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + a(t)\Delta t = v(t) + f(x(t), v(t))\Delta t \quad (3.33)$$

Estas equações, fórmulas de Euler, permitem-nos calcular x e v num instante $t + \Delta t$ se os conhecermos no instante t . Mas Δt é infinitesimal, ou seja, as fórmulas só são válidas no limite $\Delta t \rightarrow 0$. Suponhamos então que conhecemos num dado instante $t = t_0$ os valores de $x(t_0) \equiv x_0$ e $v(t_0) \equiv v_0$. Como podemos determinar $x(t)$ e $v(t)$ para um t qualquer? Podemos dividir o intervalo $[t_0, t]$ em N intervalos de duração Δt . Para N grande Δt será pequeno. Usando as fórmulas de Euler, partindo de $t = t_0$

$$x_1 \equiv x(t_0 + \Delta t) = x_0 + v_0\Delta t \quad (3.34)$$

$$v_1 \equiv v(t_0 + \Delta t) = v_0 + f(x_0, v_0)\Delta t. \quad (3.35)$$

Estas equações podem ser iteradas

$$x_2 \equiv x(t_0 + 2\Delta t) = x_1 + v_1\Delta t \quad (3.36)$$

$$v_2 \equiv v(t_0 + 2\Delta t) = v_1 + f(x_1, v_1)\Delta t \quad (3.37)$$

Ou, genericamente, com as designações $x_n \equiv x(t_0 + n\Delta t)$ e $v_n \equiv v(t_0 + n\Delta t)$,

$$x_n = x_{n-1} + v_{n-1}\Delta t \quad (3.38)$$

$$v_n = v_{n-1} + f(x_{n-1}, v_{n-1})\Delta t \quad (3.39)$$

Estas fórmulas, como dissemos, só são válidas para $\Delta t \rightarrow 0$. Em rigor teríamos pois que calcular $x(t) = x(t_0 + N\Delta t)$, $v(t) = v(t_0 + N\Delta t)$ por este processo e depois calcular o limite $N \rightarrow \infty$ e $\Delta t \rightarrow 0$ com $N\Delta t = t - t_0$. Ao usar a fórmulas de Euler cometemos, em cada passo, erros $\epsilon\Delta t$ em que $\epsilon \rightarrow 0$ se $\Delta t \rightarrow 0$. Em N passos teremos um erro majorado por $N\epsilon_0\Delta t$ em que ϵ_0 é o majorante dos erros da cada passo. Como, em cada passo, $\epsilon \rightarrow 0$, se $\Delta t \rightarrow 0$, podemos esperar o mesmo do majorante ϵ_0 em muitas situações. Desse modo o erro em N passos, $N\epsilon_0\Delta t$, tende para zero quando $N \rightarrow \infty$, $\Delta t \rightarrow 0$ e $N\Delta t = t - t_0$. Se o erro em $x(t)$ e $v(t)$ tende para zero neste limite, $\Delta t \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$), ele deverá ser pequeno quando Δt é pequeno. Esta ideia constitui a base da utilização das equações de Euler para encontrar soluções numéricas das equações de movimento. Nesta aplicação não tomamos o limite matemático $\Delta t \rightarrow 0$ (que obrigaria a iterar as equações um número infinito de vezes), mas usamos um Δt finito, mas suficientemente pequeno para que o erro seja tolerável.

Antes de prosseguir com exemplos concretos, importa salientar alguns aspectos decorrentes desta construção.

As equações de movimento, que acabamos de reduzir às relações de recorrência das eqs(3.38,3.39), permitem-nos a construção das soluções $x(t)$, $v(t)$ se conhecermos num dado instante, t_0 , os valores de x (x_0) e de v (v_0). No fundo algo que já sabíamos da nossa experiência. O movimento de um corpo sujeito a determinadas forças pode ser iniciado em qualquer posição e com qualquer velocidade. As equações de movimento fixam *univocamente* o movimento conhecidos esses valores.

O intervalo Δt tanto pode ser negativo como positivo. Na definição de velocidade ou aceleração o limite $\Delta t \rightarrow 0$ inclui valores de Δt positivos e negativos. As condições “iniciais” podem ser finais. As equações de movimento podem ser usadas para encontrar os valores de $x(t)$ e $v(t)$ para $t < t_0$ (no passado) para os quais, em $t = t_0$, o sistema tem $x(t_0) = x_0$ e $v(t_0) = v_0$.

Finalmente gostaríamos de chamar a atenção para a relação estreita que existe entre estas ideias e o conceito de integral.

O deslocamento como integral da velocidade

Como subproduto da nossa discussão podemos formular a questão de obter a coordenada $x(t)$ se for conhecida a velocidade $v_x(t) \equiv dx/dt$ e o valor de x num dado ponto $x(a) \equiv x_0$. Note-se que no caso das equações de movimento, não conhecemos $v(t)$ nem sequer $a(t)$, para todo o t à partida. Apenas conhecemos a maneira como a aceleração depende da posição e velocidade. Dividindo o intervalo $[a, t]$ em N intervalos, $[a, a+h]$, $[a+h, a+2h] \dots [a+(N-1)h, t]$, ($t = a + Nh$) podemos escrever

$$\begin{aligned} x(a+h) &= x_0 + v_x(a)h \\ x(a+2h) &= x(a+h) + v_x(a+h)h = x_0 + v_x(a)h + v_x(a+h)h \\ &\vdots \\ x(t) &= x_0 + v_x(a)h + v_x(a+h)h \\ &\quad + v_x(a+2h)h + \dots + v_x(a+(N-1)h)h \end{aligned} \quad (3.40)$$

Se for de facto conhecida a velocidade v_x no intervalo $[a, t]$, as somas do segundo membro destas equações podem, em princípio, ser calculadas. No entanto este resultado só é válido para $h \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, $Nh = t - a$, isto é

$$x(t) - x(a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-1} v_x(a + nh)h \quad (3.41)$$

A expressão do segundo membro é definida como sendo o *integral* da função $v(t)$ entre a e t . O deslocamento é o *integral* da velocidade.

$$x(t) - x(a) = \int_a^t v_x(t') dt' \quad (3.42)$$

De um modo semelhante poderíamos mostrar

$$v_x(t) - v_x(a) = \int_a^t a_x(t') dt'. \quad (3.43)$$

O Método de Euler para Integração numérica

As equações de Euler

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t \quad (3.44)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + f(x(t), v(t))\Delta t \quad (3.45)$$

são, como vimos, correctas no limite $\Delta t \rightarrow 0$. Mas se estivermos dispostos a tolerar um erro dentro de uma determinada margem podemos usá-las com

um Δt finito. Nesse caso permitem-nos formular um método aproximado de resolução das equações de movimento. A melhor maneira de o ilustrar é através de um exemplo. Voltemos à equação de movimento da mola com massa

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x(t) \quad (3.46)$$

Começemos por notar que o único parâmetro dimensional k/m tem as dimensões do quadrado de uma frequência:

$$[k] = [F]L^{-1} = MT^{-2} \quad (3.47)$$

$$[m] = M \quad (3.48)$$

Este problema tem pois um tempo característico $\tau = \sqrt{m/k}$. Para concretizar um método numérico temos que fixar o valor de τ e das condições iniciais. Suponhamos $\tau = 1$ e usemos

$$x(0) = 1 \quad (3.49)$$

$$v(0) = 0 \quad (3.50)$$

Mais tarde veremos que estas condições não são tão particulares como poderiam parecer à primeira vista.

As equações de recorrência do método de Euler são, neste caso,

$$x_n \equiv x(n\Delta t) = x_{n-1} + v_{n-1}\Delta t \quad (3.51)$$

$$v_n \equiv v(n\Delta t) = v_{n-1} + (-x_{n-1})\Delta t \quad (3.52)$$

já que a equação de movimento é:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x(t) \quad (3.53)$$

Para calcular os valores de x e v precisamos de especificar um passo Δt . Pela natureza do método o valor de Δt deve ser pequeno, pois as equações só são exactas no limite $\Delta t \rightarrow 0$. Mas o que quer dizer pequeno? Menor que 1, que 0.1? Um momento de reflexão mostra que a resposta não pode ser dada deste modo. Com efeito o número real que exprime o valor de Δt *depende do sistema de unidades*. Como veremos este sistema tem um movimento periódico e o período é da ordem de grandeza de τ . Mas, mesmo sem esse conhecimento à posteriori podemos antecipar que as soluções $x(t)$, $v(t)$ ou $a(t)$, tenham um tempo característico τ , ou seja devem ter variações pequenas ($\Delta x/x, \Delta v_x/v_x, \Delta a_x/a_x \ll 1$ em intervalos $\Delta t \ll \tau$). Ora as fórmulas de Euler (eqs.(3.44) e (3.45) são exactas se a aceleração e a velocidade não variarem num passo de integração. Por outras palavras $\Delta t \rightarrow 0$ corresponde

t	x	v	$a(= -x)$
0	1.000	0.000	-1.000
0.2	1.000	-0.200	-1.000
0.4	0.960	-0.400	-0.960
0.6	0.880	-0.592	-0.880
0.8	0.760	-0.768	-0.762
1.0	0.608	-0.920	-0.608
1.2	0.424	-1.042	-0.424
1.4	0.216	-1.127	-0.216
1.6	-0.010	-1.170	+0.010

Tabela 3.1: Integração da equação $d^2x/dt^2 = -x(t)$ pelo método de Euler

ao limite físico $t \ll \tau$ no caso presente. Podemos agora escolher um valor de Δt por exemplo $\Delta t = 0.2$ ($\Delta t/\tau = 0.2$) e calcular explicitamente x_n e v_n .

$$\begin{aligned}
 x_0 &= x(0) = 1 \\
 v_0 &= v(0) = 0 \\
 x_1 &= x(0) + v_0\Delta t = x_0 = 1 \\
 v_1 &= v(0) + (-x_0)\Delta t = -0.2 \\
 x_2 &= x_1 + v_1\Delta t = 1 + (-0.2)(0.2) = 0.96 \\
 v_2 &= v_1 + (-x_1)\Delta t = -0.4 \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Sugere-se que o leitor tente verificar por este processo os valores da Tabela 1. O trabalho envolvido numa aplicação tão simples do método convencê-lo-á rapidamente que estes métodos numéricos só podem ser de alguma utilidade com recurso a meios de cálculo automático (ou então com muita paciência!).

Nas secções que se seguem apresentam-se vários exemplos de aplicação destes métodos a alguns problemas, construídos numa folha de cálculo. Deixaremos também para essa altura uma discussão (muito sumária) dos erros envolvidos nas aproximações que fizemos. Este exemplo fica apenas como uma ilustração do método. Terminamos esta secção com um resumo dos principais resultados. Para uma equação de movimento

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f(x(t), v(t)) \tag{3.55}$$

com condições iniciais

$$x(t_0) = x_0 \quad (3.56)$$

$$v(t_0) = v_0 \quad (3.57)$$

obtemos as seguintes equações de recorrência para a determinação de $x(t)$ e $v(t)$.

$$x_n \equiv x(t_0 + n\Delta t) = x_{n-1} + v_n \Delta t \quad (3.58)$$

$$v_n \equiv v(t_0 + n\Delta t) = v_{n-1} + f(x_{n-1}, v_{n-1}) \Delta t \quad (3.59)$$

O leitor poderá facilmente adaptar estas ideias ao cálculo aproximado de integrais tendo em conta a secção anterior.

Solução Numérica do Oscilador Harmónico

O Método de Euler numa folha de cálculo

A aplicação dos métodos acima discutidos só é viável com recurso a meios automáticos de cálculo. Para acompanhar estas notas foram preparados vários exemplos numa folha de cálculo. A folha de cálculo não é, certamente, o tipo de software mais adequado para aplicações científicas sérias. Mas existe uma em quase todos os computadores pessoais, é de muito fácil utilização e perfeitamente adequada para as aplicações que podemos fazer a este nível. Estas notas não pretendem ensinar a usar este software. Iremos concentrar-nos nos resultados invocando cálculos em que as equações de Euler são iteradas várias dezenas (ou centenas) de vezes, sem qualquer dificuldade, uma vez que as contas são feitas pelo computador. Creio que a descrição dos algoritmos é suficientemente detalhada para permitir ao leitor reproduzir estes exemplos no seu software favorito, caso isso lhe seja possível.

Começamos por reproduzir (fig.2) um gráfico relativo ao problema da massa e mola (movimento harmónico simples), assim como alguns dos primeiros valores de x e v (comparem-se com os da Tabela 1).

O gráfico mostra resultados pouco abonatórios da qualidade da aproximação. É patente o aumento da amplitude de oscilação, o que, claramente, não acontece no caso real da massa e mola. Poderíamos nesta altura perguntar o que acontece se escolhermos um Δt mais pequeno. Na fig.3 reduzimos Δt para metade, $\Delta t = 0.1$. A alteração nos resultados do cálculo é evidente e constitui uma indicação clara de que deveríamos procurar usar valores ainda mais pequenos para Δt .

Na realidade o método de Euler raramente é utilizado em exemplos concretos. Embora extremamente útil para explicar a natureza do método de resolução numérica de equações, na prática, ele é suplantado por métodos

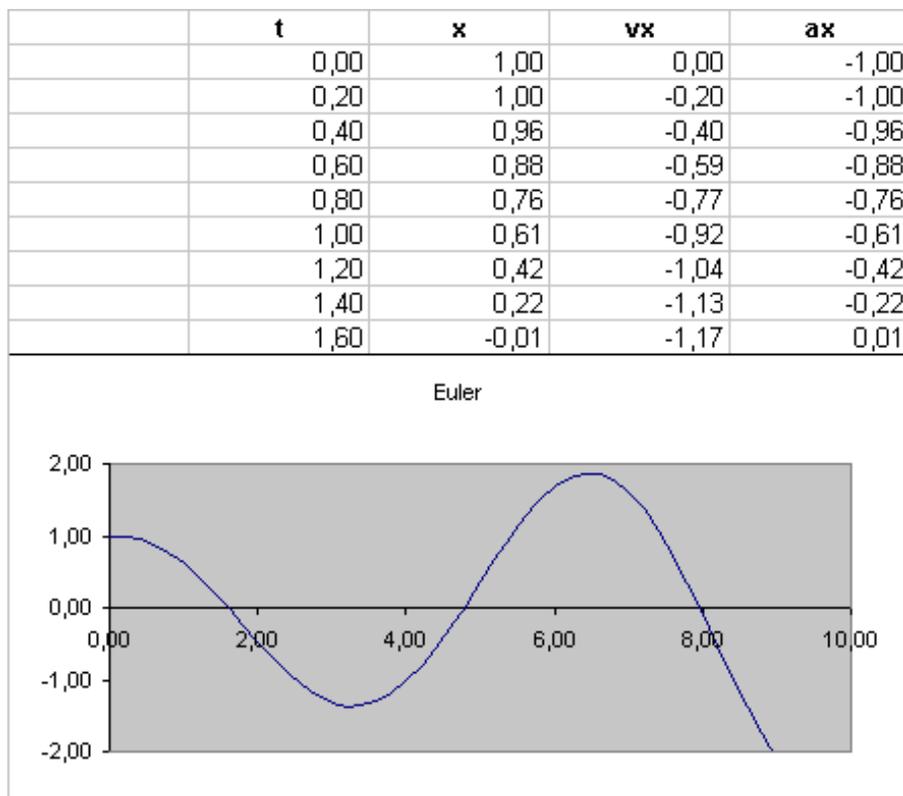


Figura 3.2: O método de Euler para a massa e mola. $\Delta t = 0.2, k/m = 1$.

muito mais eficientes, que para pouco mais esforço de cálculo, conduzem a resultados com muito menor erro.

Na fig.4 mostramos uma comparação entre o método de Euler, um segundo método que vamos utilizar a seguir, Runge-Kutta de segunda ordem e também o resultado analítico para este problema. Este último não é difícil de obter. Recordemos a equação de movimento ($k/m = 1$)

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -x(t) \quad (3.60)$$

A derivada da função $\cos(t)$ é $-\sin(t)$ e de $\sin(t)$ é $\cos(t)$. Isto significa que se derivarmos duas vezes qualquer uma destas funções obtemos a mesma função multiplicada por -1 . Isto é, $\sin(t)$ e $\cos(t)$ são soluções da equação de movimento. Esta equação é linear, isto é se somarmos duas soluções, ou multiplicarmos uma solução por uma constante, obtemos uma solução. Assim $A\sin(t) + B\cos(t)$ (A e B , quaisquer) também satisfaz a equação de movimento. Qual será então a solução com as condições iniciais $x(0) = x_0, v(0) = v_0$? É possível acomodar estas condições mediante a escolha de A

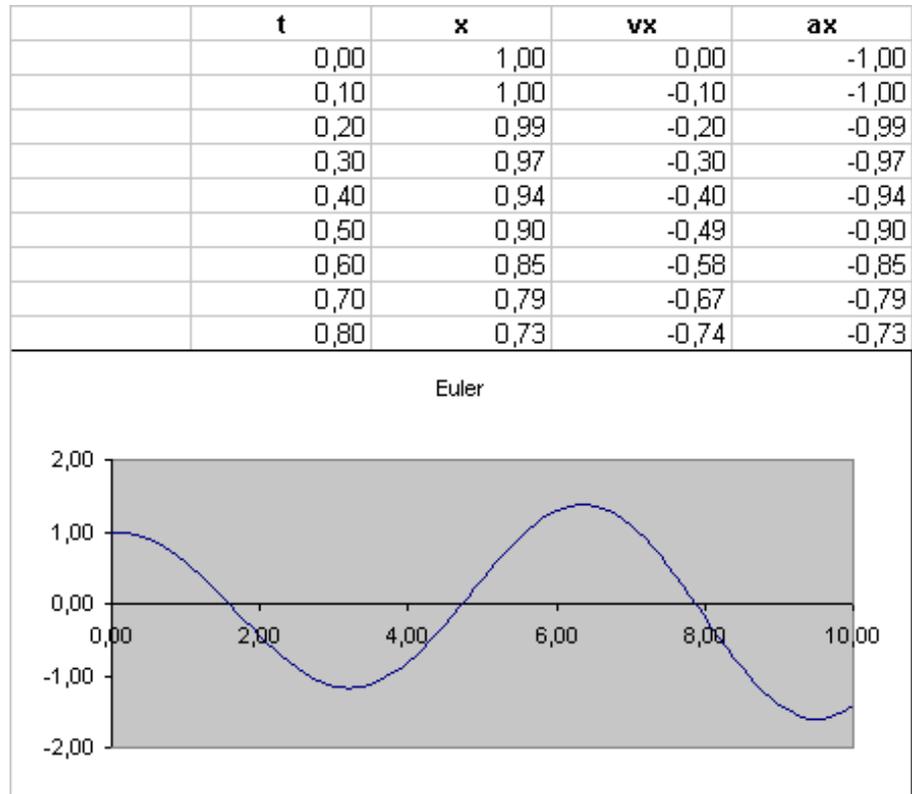


Figura 3.3: O método de Euler para a massa e mola. $\Delta t = 0.1, k/m = 1$.

e *B*. Com efeito

$$x(t) = x_0 \cos(t) + v_0 \sin(t) \quad (3.61)$$

tem $x(0) = x_0$ e $v(0) = v_0$ além de satisfazer a equação de movimento. Logo é a *solução*, pois como vimos atrás, só há uma nestas condições.

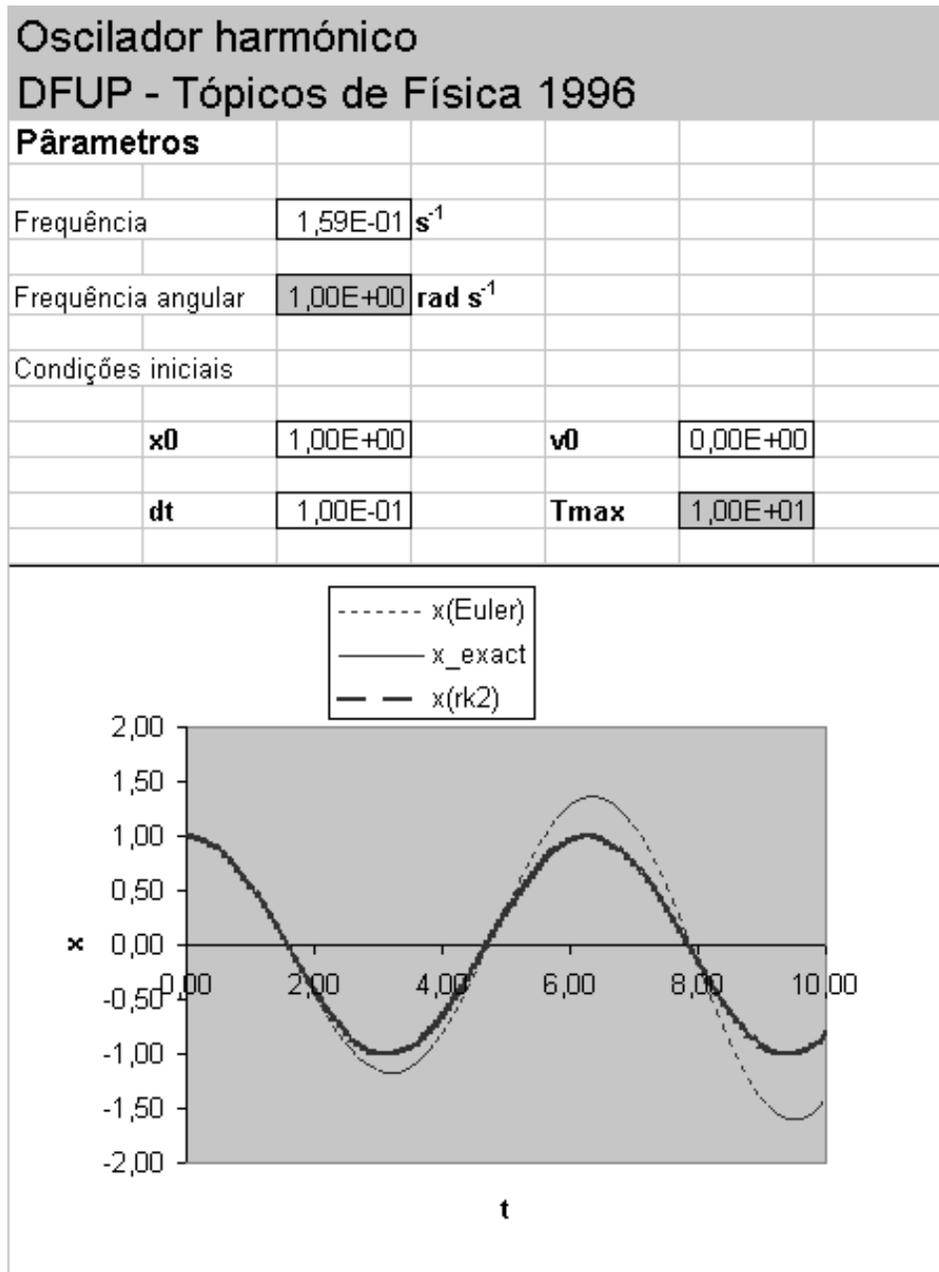


Figura 3.4: Comparação entre os métodos de Euler, Runge-Kutta e o resultado exacto.

O Método Runge-Kutta de segunda ordem

Com o único fim de motivar a introdução do método de Runge-Kutta vamos fazer uma discussão heurística de alguns problemas do método de Euler. Deixaremos uma análise mais cuidada dos erros para outras disciplinas.

Para ilustrar as limitações do método de Euler é útil considerar uma equação de primeira ordem envolvendo apenas $x(t)$ e a sua primeira derivada

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t)) \quad (3.62)$$

A função $f(x)$ é suposta conhecida. Pretendemos construir a solução com condição inicial $x(t_0) = x_0$. Imaginemos por um momento que poderíamos traçar o gráfico da solução real da equação. A equação de movimento permite calcular $f(x_0)$ a derivada da solução real em $x = x_0$. Mas para $x(t_0 + \Delta t)$ escrevemos

$$x^{(e)}(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + f(x_0)\Delta t \quad (3.63)$$

o que corresponde a substituir a verdadeira função $x(t)$ no intervalo $[t_0, t_0 + \Delta t]$ por uma recta de declive $f(x_0)$. O erro $x^{(e)}(t_0 + \Delta t) - x(t_0 + \Delta t)$ será por excesso se a curvatura de $x(t)$ for negativa neste intervalo, isto é, se a sua derivada diminuir de t_0 para $t_0 + \Delta t$. Se a curvatura for positiva o erro será por defeito. Ora o método de Euler aproxima a velocidade média no intervalo sempre pelo valor inicial da velocidade. Ao dar um novo passo de integração, se a curvatura de $x(t)$ não tiver mudado de sinal o erro será no mesmo sentido. Pela natureza do método Δt deve ser pequeno. Isto é, é de esperar que, entre pontos onde a curvatura da função muda de sinal, haja um grande número de passos de integração. Os erros terão todos o mesmo sinal e acumular-se-ão.

Esta ideia está ilustrada na fig.5. A linha carregada corresponde à solução real da equação de movimento. A linha a tracejado é a aproximação de Euler. Como se vê ao fim de um passo o valor de $x(t)$ foi calculado por defeito. Representam-se também as soluções da equação de movimento que passam por cada um dos pontos $(t_1, x_1), (t_2, x_2) \dots$ calculados pelo método de Euler. Como se vê, em cada passo o método de Euler transporta-nos para uma solução cada vez mais afastada da original.

Este problema poderia ser corrigido se substituíssemos na fórmula de Euler $f(x(t_0))$ por $f(x(t_0 + \Delta t/2))$, a velocidade no ponto médio do intervalo. Claro que essa velocidade não é, necessariamente igual à velocidade média no intervalo Δt . Mas às vezes será superior, outras vezes inferior, e os erros poderão compensar-se de um modo mais eficaz que no caso anterior. Mas o problema é precisamente que $x(t_0 + \Delta t/2)$, tal como $x(t_0 + \Delta t)$, não é conhecido. É precisamente o que pretendemos calcular, os valores de $x(t)$ em instantes diferentes de t_0 (futuros ou passados). O método de Runge-Kutta de segunda ordem consiste precisamente em usar o método de Euler

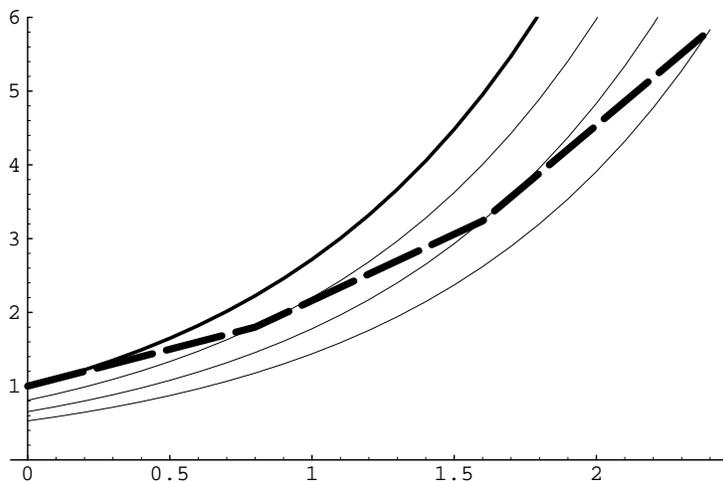


Figura 3.5: Ilustração da instabilidade do método de Euler.

para estimar $x(t_0 + \Delta t/2)$. Definindo:

$$k = f(x_0)\Delta t \equiv \Delta x^{(\epsilon)} \quad (3.64)$$

o incremento de x pelo método de Euler, pomos

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + f\left(x_0 + \frac{k}{2}\right)\Delta t \quad (3.65)$$

$$= x(t_0) + f\left(x_0 + \frac{\Delta x^{(\epsilon)}}{2}\right)\Delta t \quad (3.66)$$

Seria deslocado fazer aqui uma análise dos erros envolvidos nesta aproximação. Limitar-nos-emos a referir que a estimativa que fazemos da velocidade média

$$v_m \approx f\left(x_0 + \frac{\Delta x^{(\epsilon)}}{2}\right) \quad (3.67)$$

não é necessariamente por excesso num intervalo de curvatura positiva, nem por defeito num intervalo de curvatura negativa.

Para ilustrar as possibilidades deste método podemos aplicá-lo ao problema do oscilador relativamente ao qual conhecemos a solução analítica. Escrevamos as equações do método para equações de segunda ordem. Consideremos um problema de dinâmica inteiramente geral com um força $F(x, v)$ (1 dimensão)

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{m}F(x, v) \equiv f(x, v). \quad (3.68)$$

Se escrevermos

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (3.69)$$

a equação de movimento é

$$\frac{dv}{dt} = f(x, v) \quad (3.70)$$

Por esta via reduzimos o problema a duas equações de primeira ordem nas variáveis independentes x e v

$$\frac{dx(t)}{dt} = v(t) \quad (3.71)$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = f(x(t), v(t)) \quad (3.72)$$

Uma solução deste sistema de equações $(x(t), v(t))$, na medida em que é solução da primeira, garante que a função $v(t)$ é de facto a derivada de $x(t)$, a velocidade.

Escrever agora as equações do método de Runge-Kutta é relativamente simples. Começamos por calcular os incrementos pelo método de Euler para ambas as variáveis:

$$\Delta x^{(\epsilon)} = v(t)\Delta t \quad (3.73)$$

$$\Delta v^{(\epsilon)} = f(x(t), v(t))\Delta t \quad (3.74)$$

As variações de x e v , no intervalo Δt são calculadas supondo que a velocidade média neste intervalo é $v(t) + \Delta v^{(\epsilon)}/2$ e que a aceleração é $f(x(t_0) + \Delta x^{(\epsilon)}/2, v(t) + \Delta v^{(\epsilon)}/2)$:

$$\Delta x = \left(v(t) + \frac{\Delta v^{(\epsilon)}}{2} \right) \Delta t \quad (3.75)$$

$$\Delta v = f \left(x(t) + \frac{\Delta x^{(\epsilon)}}{2}, v + \frac{\Delta v^{(\epsilon)}}{2} \right) \Delta t. \quad (3.76)$$

Usando a mesma notação que anteriormente

$$x_n = x(t_0 + n\Delta t) \quad (3.77)$$

$$v_n = v(t_0 + n\Delta t) \quad (3.78)$$

e definindo

$$k_n = v_n \Delta t \quad (3.79)$$

$$k'_n = f(x_n, v_n) \Delta t \quad (3.80)$$

(os incrementos pelo método de Euler), obtemos as relações de recorrência

$$x_{n+1} = x_n + \left(v_n + \frac{k'_n}{2}\right)\Delta t \quad (3.81)$$

$$v_{n+1} = v_n + f\left(x_n + \frac{k_n}{2}, v_n + \frac{k'_n}{2}\right)\Delta t \quad (3.82)$$

No gráfico da fig.4 o resultado desta aproximação para o movimento harmónico simples ($f(x, v) = -(k/m)x$), com $k/m = 1$ e $\Delta t = .1$, não se consegue distinguir da solução exacta. No mesmo gráfico está também o resultado do método de Euler.

Órbitas planetárias

As Equações de Movimento na Gravitação Newtoniana

Agora que dispomos de um modelo numérico minimamente utilizável, vamos aplicá-lo a um problema de grande interesse físico: o movimento de um planeta sob a acção do campo gravítico de uma estrela.

Falamos em planeta e estrela por uma única razão: a massa de uma estrela, M , é em geral várias ordens de grandeza superior à de um planeta, m . Pelo princípio da acção e reacção as forças sobre o planeta e a estrela são iguais em módulo:

$$|\mathbf{a}_e| = \frac{\mathbf{F}}{M} \quad (\text{aceleração da estrela}) \quad (3.83)$$

$$|\mathbf{a}_p| = \frac{\mathbf{F}}{m} \quad (\text{aceleração do planeta}) \quad (3.84)$$

e

$$|\mathbf{a}_e| \ll |\mathbf{a}_p| \quad (3.85)$$

Em primeira aproximação podemos considerar $\mathbf{a}_e \approx 0$. Num referencial ligado à estrela ela estará em repouso. No que se segue a estrela ocupa, imóvel, a origem dos eixos de referência.

Uma segunda simplificação torna-se possível a partir da observação que as órbitas são planas. Imaginemos uma dada posição e velocidade inicial para o planeta. O vector de posição \mathbf{r} e a velocidade \mathbf{v} definem um plano. A força da estrela sobre o planeta tem a direcção de \mathbf{r} ; a aceleração está, pois, neste plano. Ao fim de um pequeno intervalo Δt , $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{v}\Delta t$, $\Delta \mathbf{v} = \mathbf{a}\Delta t$ estão ainda no mesmo plano. A órbita permanece no plano definido num dado instante por \mathbf{r} e \mathbf{v} . Escolhendo esse plano como o plano xy a posição do planeta pode ser especificada por duas coordenadas apenas, $x(t)$ e $y(t)$.

Pela lei da gravitação universal, temos

$$\mathbf{F} = -\frac{GMm}{r^2}\hat{\mathbf{e}}_r \quad (3.86)$$

em que $\hat{e}_r = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$, é o vector de módulo unitário com a direcção e sentido de \mathbf{r} . Como \mathbf{r} tem componentes (x, y) temos

$$\hat{e}_r = \frac{1}{|\mathbf{r}|}(x, y) = \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}\right) \quad (3.87)$$

e as componentes x e y da força

$$F_x = -GMm\frac{x}{r^3} \quad (3.88)$$

$$F_y = -GMm\frac{y}{r^3} \quad (3.89)$$

em que $r^2 = x^2 + y^2$. As equações de movimento são:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -GM\frac{x}{r^3} \quad (3.90)$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -GM\frac{y}{r^3} \quad (3.91)$$

Temos agora duas componentes de posição e não apenas uma como no caso do oscilador. A velocidade tem também duas componentes v_x e v_y e as equações de movimento podem ser reescritas como

$$\frac{dx}{dt} = v_x \quad (3.92)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y \quad (3.93)$$

$$\frac{dv_x}{dt} = -GM\frac{x}{r^3} \quad (3.94)$$

$$\frac{dv_y}{dt} = -GM\frac{y}{r^3} \quad (3.95)$$

Nesta forma é bem claro o modo de integrar estas equações. Temos quatro variáveis (x, y, v_x, v_y) e as equações de movimento fixam as derivadas temporais destas grandezas. Conhecido o respectivo valor no instante t o método de Euler dá os incrementos num intervalo Δt

$$\Delta x^{(\epsilon)} = v_x(t)\Delta t \quad (3.96)$$

$$\Delta y^{(\epsilon)} = v_y(t)\Delta t \quad (3.97)$$

$$\Delta v_x^{(\epsilon)} = -GM\frac{x(t)}{r(t)^3}\Delta t \quad (3.98)$$

$$\Delta v_y^{(\epsilon)} = -GM\frac{y(t)}{r(t)^3}\Delta t \quad (3.99)$$

($r(t) \equiv \sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}$). No método de Euler os valores de x, y, v_x e v_y em $t + \Delta t$ seriam calculados somando o respectivo incremento ao valor

correspondente em t . Nos cálculos que a seguir se apresentam utilizou-se o método de Runge Kutta de segunda ordem e por uma questão de referência escrevemos agora as equações de recorrência:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + (v_x(t) + \frac{\Delta v_x^{(\epsilon)}}{2})\Delta t \quad (3.100)$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + (v_y(t) + \frac{\Delta v_y^{(\epsilon)}}{2})\Delta t \quad (3.101)$$

$$v_x(t + \Delta t) = v_x(t) - \frac{GM \frac{x + \Delta x^{(\epsilon)}/2}{((x + \Delta x^{(\epsilon)}/2)^2 + (y + \Delta y^{(\epsilon)}/2)^2)^{3/2}}{\Delta t} \quad (3.102)$$

$$v_y(t + \Delta t) = v_y(t) - \frac{GM \frac{y + \Delta y^{(\epsilon)}/2}{((x + \Delta x^{(\epsilon)}/2)^2 + (y + \Delta y^{(\epsilon)}/2)^2)^{3/2}}{\Delta t} \quad (3.103)$$

Os incrementos $\Delta x^{(\epsilon)}$, $\Delta y^{(\epsilon)}$, $\Delta v_x^{(\epsilon)}$ e $\Delta v_y^{(\epsilon)}$ são definidos pelas eqs.(3.96-3.99). São equações com um aspecto algo aterrorizador. Uma única iteração feita manualmente seria suficiente para fazer perder a paciência. Mas uma vez programados num computador o trabalho deixa de ser nosso. Fixamos as condições iniciais $x(0)$, $y(0)$, $v_x(0)$, $v_y(0)$ e aplicamos as relações de recorrência das eqs.(3.100-3.103) para calcular x , y , v_x , v_y em Δt , $2\Delta t$, \dots . Deste modo conseguimos reconstruir uma órbita a partir do conhecimento de quatro condições iniciais, duas coordenadas e duas componentes de velocidade do planeta.

Nas páginas seguintes (figs.(3.6-3.9)) mostram-se várias órbitas, calculadas usando as eqs(3.100-3.103), com as respectivas condições iniciais. Iremos seguidamente discutir alguns aspectos dessas órbitas. Mas algumas perguntas surgem imediatamente: em que unidades estão expressos os valores das coordenadas e dos tempos? Qual a massa da estrela? Na próxima secção abordamos esta questão. Veremos que o mesmo cálculo pode determinar órbitas em torno *de um corpo de qualquer massa*, mediante uma mudança adequada das escalas de tempo e distância.

Reescalamento das equações

Qualquer problema físico tem, normalmente um conjunto de escalas de distância, tempo, energia, característicos. É conveniente trabalhar em unidades apropriadas a essa escalas. Nem os astrónomos medem distâncias em angstrom, nem os físicos nucleares em anos-luz. Numa aplicação numérica uma escolha adequada de unidades pode ser mais do que uma conveniência prática.

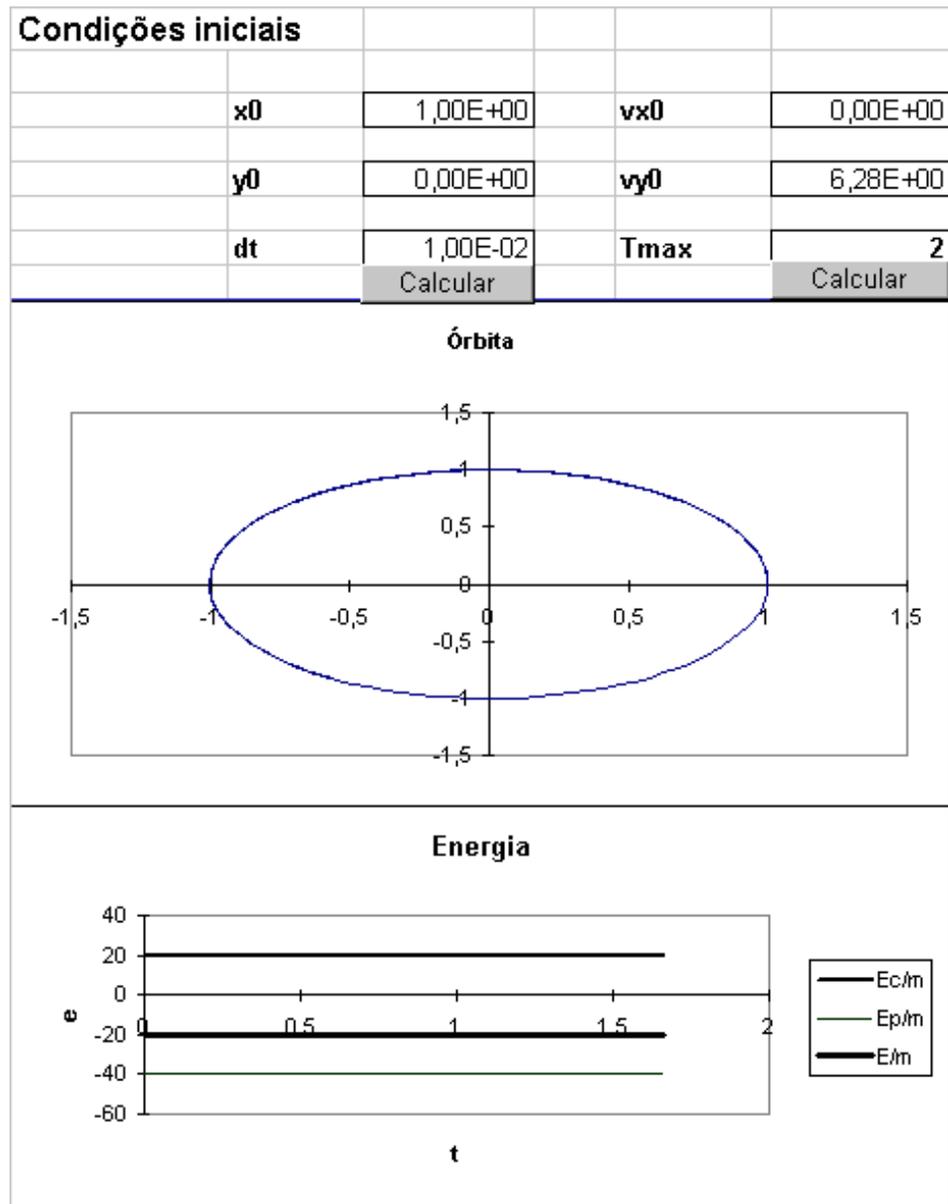


Figura 3.6: Esta órbita é circular. Não parece, porque os eixos xx e yy têm escalas diferentes. Mas note-se que a energia potencial, que só depende de r é constante.

O carácter discreto e finito da representação de números num computador digital implica uma gama de representação limitada. Se tivermos que calcular com números demasiado pequenos ou demasiado grandes podemos incorrer em erros de arredondamento ou de *overflow*. Mas existe uma outra razão importante para um estudo prévio das escalas envolvidas num dado problema. A melhor maneira de a explicar é através do nosso exemplo.

Nas equações de movimento aparece um único parâmetro, GM . Além deste, poderemos também variar as condições iniciais, que, como vimos, correspondem as duas componentes de posição e duas de velocidade. À partida, teríamos cinco parâmetros que poderíamos variar para estudar as diferentes órbitas possíveis. Por exemplo, se quiséssemos estudar órbitas em torno do Sol ou da Terra teríamos que resolver as equações de movimento duas vezes pois o valor de GM não é o mesmo nos dois casos. Acontece no entanto que GM é um parâmetro dimensional, nomeadamente

$$[GM] = L^3 T^{-2} \quad (3.104)$$

O seu valor pode ser mudado por escolha de unidades de tempo e distância. Designemos por l o valor SI de um novo padrão de comprimento e por τ o de tempo; por exemplo, usando como unidade de comprimento a unidade astronómica, $l = 1.5 \times 10^{11}$. Na mudança de unidades

$$x \rightarrow x' = \frac{x}{l} \quad (3.105)$$

$$t \rightarrow t' = \frac{t}{\tau} \quad (3.106)$$

o valor da constante GM passaria a ser

$$GM \rightarrow (GM)' = GM \frac{\tau^2}{l^3} \quad (3.107)$$

Por escolha apropriadas das escalas de tempo e comprimento, l e τ , podemos fixar o valor de $(GM)'$ conforme desejarmos. *As mesmas equações de movimento descrevem órbitas em torno do Sol ou da Terra, ou de qualquer outro corpo, mudando apenas as escalas de distância e/ou tempo.*

Vejam como podemos conseguir isto no caso presente. A aceleração numa órbita circular, com velocidade constante, é centrípeta e tem valor constante. A força gravítica é também dirigida para o centro da órbita e tem módulo constante, pois a distância entre os dois corpos não varia. A segunda lei de Newton reduz-se a

$$a_c = \frac{v^2}{r} = GM \frac{1}{r^2} \quad (3.108)$$

O que dá

$$v^2 = GM \frac{1}{r} \quad (3.109)$$

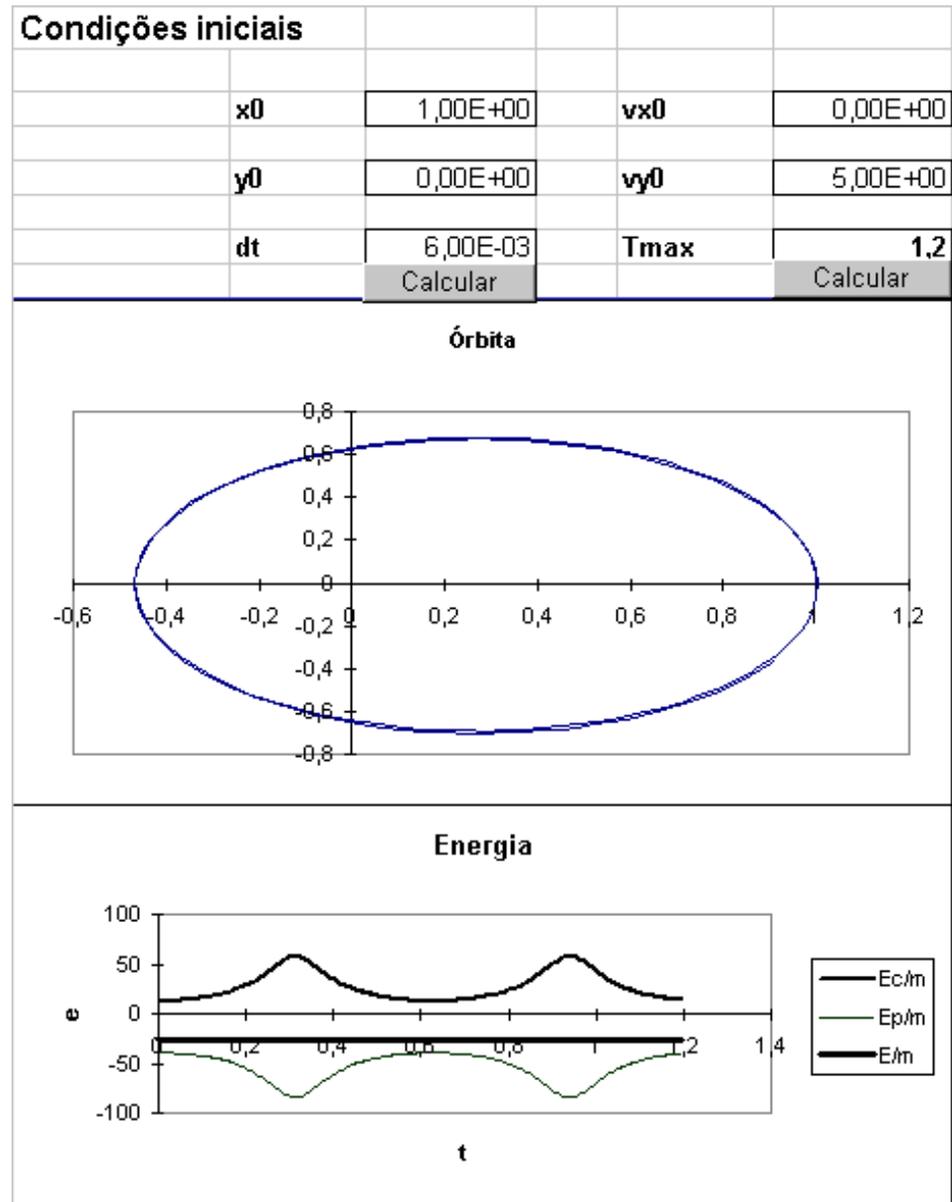


Figura 3.7: Uma órbita elíptica. O ponto inicial é o afélio. A velocidade inicial é inferior à da órbita circular.

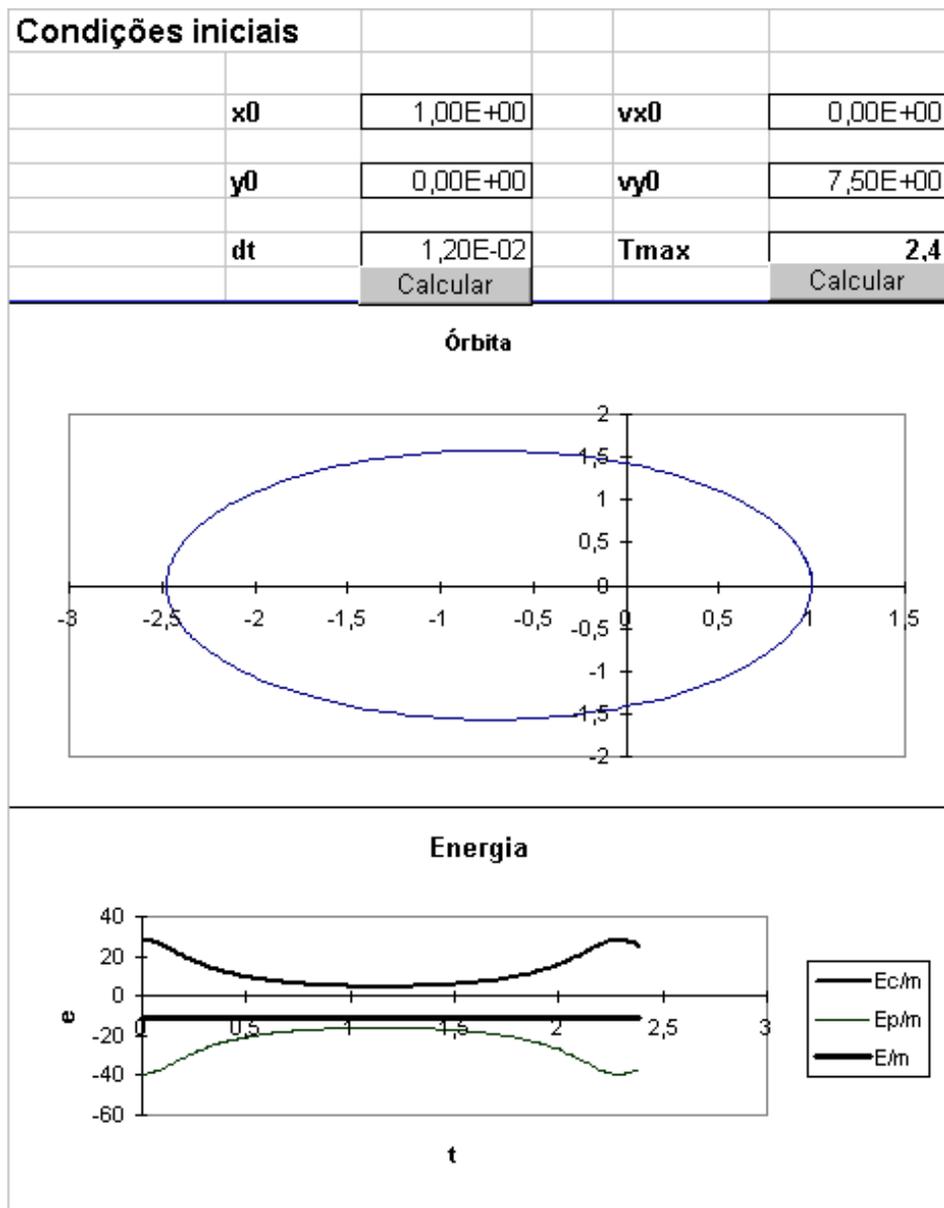


Figura 3.8: Neste caso o ponto inicial é o periélio. A velocidade inicial é superior à da órbita da fig.(3.6).

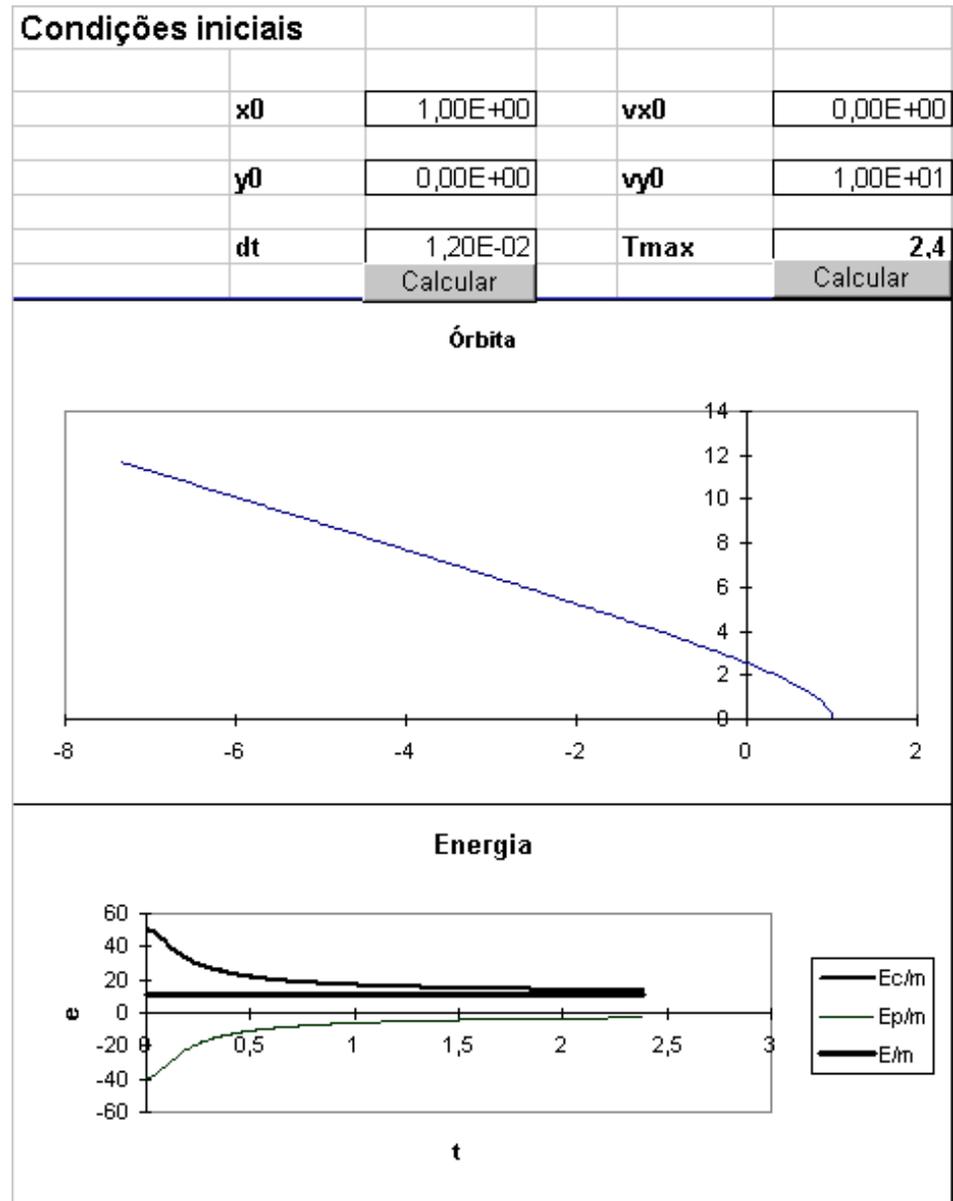


Figura 3.9: Uma órbita aberta. Note-se que a energia total é positiva, ao contrário dos casos anteriores. Assintoticamente o movimento é uniforme.

Parâmetros				
Massa da estrela	2,00E+30	kg	$4\pi^2$	
Escala de Distâncias	1,50E+11	m		
Constante de Gravitação	6,67E-11	$\text{N m}^2 \text{Kg}^{-2}$		
Escala de tempo	3,16E+07	s		1,00E+00 anos
escala de velocidades	4,75E+03	m s^{-1}		

Figura 3.10: Um exemplo de cálculo das unidades de tempo e velocidade, de modo a que GM valha $4\pi^2$.

O período desta órbita é dado pela razão entre o perímetro da órbita, $2\pi r$, e o módulo (constante) da velocidade, $T = 2\pi r/v$; usando a eq.(3.109)

$$\frac{T^2}{r^3} = \frac{4\pi^2}{GM} \tag{3.110}$$

Tomemos agora uma escala de distâncias conveniente. Para órbitas em torno do Sol, $M = 2 \times 10^{30} \text{Kg}$, poderia ser a unidade astronómica $l = 1.5 \times 10^{11} \text{m}$. Para órbitas de satélites em torno da terra, $M = 6 \times 10^{24} \text{Kg}$, conviria mais o raio da Terra $l = 6.4 \times 10^6 \text{m}$. Em qualquer dos casos, escolhamos como unidade de tempo o valor do período de uma órbita circular de raio l , dado pela eq.(3.110). Nestas unidades o valor de T^2/l^3 será por definição 1, ou seja o valor da constante GM será $4\pi^2$, qualquer que seja M .

Foi esta a escolha que foi feita nos cálculos destas órbitas. As equações de movimento são escritas com $GM = 4\pi^2$. A unidade de distância é arbitrária e a de tempo corresponde ao período de uma órbita circular de raio unitário. Na fig.(3.10) mostra-se uma parte da folha de cálculo onde podem ser introduzidos os valores SI de M e da unidade de distância, l e onde são calculados os valores SI da unidade de tempo $\tau = \sqrt{4\pi^2 l^3 / GM}$ e de velocidade $v_0 = l/\tau$. O mesmo cálculo pode descrever uma órbita em torno do Sol ou da Terra (ou de qualquer outro corpo) através de uma reinterpretação das escalas de tempo e distância.

Este exemplo ilustra alguns aspectos a ter em conta sempre que se trabalha com equações de movimento. Frequentemente a tarefa mais importante consiste em explorar a natureza dos movimentos em função dos parâmetros do problema. Mas os valores de parâmetros dimensionais dependem das unidades. Transformações de escala, em que os diferentes parâmetros mudam de acordo com as respectivas dimensões, não alteram a natureza das soluções uma vez que são apenas mudanças de unidades. É pois importante, em cada caso, fazer uma redução dimensional das equações, reduzindo alguns destes parâmetros a valores fixos, mediante escolha apropriada de unidades. Deste modo conseguimos identificar os parâmetros adimensionais (com valor independente das unidades) que de facto determinam a natureza dos movimentos, mesmo antes de iniciarmos qualquer cálculo.

Como exercício de aplicação deste procedimento recordemos a solução do oscilador harmónico desenvolvida na secção 3.2. Na altura pusemos $k/m = 1$ e $x(0) = 1$. Deixamos ao leitor a tarefa de mostrar, que o movimento de qualquer oscilador harmónico de velocidade inicial nula (quaisquer k/m e $x(0)$) pode ser reduzido a este mediante escolha apropriada das escalas de tempo e distância. Como dissemos na altura, a solução obtida é muito mais geral do que parece à primeira vista.

Órbitas abertas e órbitas fechadas

Em cada uma das figs(3.6-3.9) mostram-se, no topo, os valores iniciais da posição e da velocidade, o passo de integração, dt assim como a duração de integração, $T_{max} = \text{número de passos} \times dt$.

As quatro órbitas têm a mesma posição inicial $x_0 = 1$ e $y_0 = 0$, e velocidade $v_{x0} = 0$, variando apenas a velocidade inicial v_{y0} . Esta escolha merece um comentário. Os valores de x_0 e y_0 não têm qualquer significado especial. Como vimos atrás o valor $x_0 = 1$ pode representar qualquer distância à estrela, considerada na origem de coordenadas. Os eixos podem ser escolhidos de modo que um qualquer ponto da órbita esteja sobre o eixo dos xx . Assim não há qualquer perda de generalidade na escolha da posição inicial. A velocidade é escolhida de modo a ser perpendicular ao raio vector da posição inicial. Qualquer órbita terá um ponto em que a distância à estrela é mínima. Se for uma órbita limitada terá também um ponto de distância máxima. Nesses pontos extremos a velocidade é perpendicular ao raio vector de posição. A componente da velocidade na direcção radial é dada por

$$v_r = \frac{dr}{dt} \quad (3.111)$$

Logo num extremo de $r(t)$ (máximo ou mínimo) $v_r = 0$. Deste modo a nossa escolha de condições iniciais coresponde a calcular cada órbita a partir do seu ponto de distância mínima (ou eventualmente máxima) e de novo

não implica qualquer perda de generalidade. Podemos caracterizar todas as órbitas possíveis variando apenas um parâmetro v_{y0} .

A órbita da fig.(3.6) é circular. Vimos atrás que se trata de uma órbita possível desde que a velocidade seja dada pela eq.(3.109)

$$v_c^2 = \frac{GM}{r} \quad (3.112)$$

O período desta órbita é $T = 2\pi r/v_c$. Nas nossas unidades a órbita com $r = 1$ tem $T = 1$, isto é $v_c = 2\pi$. A órbita da fig.(3.7) tem velocidade inicial inferior a v_c e as das figs.(3.8) e (3.9) superiores.

As primeiras três órbitas são fechadas. Mas a órbita da fig.(3.9) parece tender assintoticamente para uma linha recta (note-se a diferença das escala x e y relativamente aos casos em que as órbitas são fechadas).

A diferença entre órbitas abertas e fechadas, é facilmente compreendida tendo em atenção a energia total do corpo que orbita no campo gravítico da estrela.

A integração numérica dá os valores de v_x e v_y em cada instante, o que permite calcular a energia cinética, por unidade de massa do corpo que orbita,

$$\frac{E_c}{m} = \frac{1}{2}v^2 = \frac{1}{2}(v_x^2 + v_y^2) \quad (3.113)$$

Por outro lado a energia potencial do planeta no campo gravítico da estrela obtém-se por analogia com o caso da interação de Coulomb, que tratamos no Capítulo 2. Para uma força de Coulomb atractiva

$$F_C = -k \frac{|q||q'|}{r^2} \quad (3.114)$$

obtivemos

$$U_C(r) = -k \frac{|q||q'|}{r} \quad (3.115)$$

com ($U(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$). Com uma força gravítica

$$F_G = -G \frac{Mm}{r^2} \quad (3.116)$$

obtemos, com a substituição $k|q||q'| \rightarrow GMm'$

$$U_G(r) = -G \frac{Mm}{r} \quad (3.117)$$

o que dá para a energia total

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - G \frac{Mm}{r} \quad (3.118)$$

$$= \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2) - G \frac{Mm}{r} \quad (3.119)$$

Esta grandeza é uma constante de movimento, isto é não varia ao longo da órbita. Nas unidades que estamos a usar

$$\frac{E}{m} = \frac{1}{2}(v^2 - 4\pi^2 \frac{1}{r}) \quad (3.120)$$

Nas figs.(3.6-3.9) representam-se também as energias cinética, potencial e a soma das duas, por unidade de massa do planeta, em função do tempo, para cada uma das órbitas em análise. Podemos verificar que:

- i) a energia total é constante;
- ii) as órbitas fechadas têm energia total negativa;
- iii) a órbita da fig.(3.9) tem energia total positiva;

Como a energia total é constante ela é fixada pelas condições iniciais (no nosso caso por v_{y0}). A energia cinética nunca é negativa. A energia potencial não pode em caso algum ser superior à energia total E :

$$E_P \leq E \quad (E_c \geq 0). \quad (3.121)$$

A igualdade verifica-se se a velocidade do planeta for nula. Se $E < 0$ isto significa que

$$-G \frac{Mm}{r} \leq -|E| \quad (3.122)$$

o que implica

$$r \leq \frac{GMm}{|E|} \quad (3.123)$$

Uma órbita de energia negativa está contida, necessariamente, numa esfera à volta da estrela, de raio $GMm/|E|$. É uma órbita limitada. É necessário fornecer energia ao sistema estrela-planeta, para que este se possa afastar infinitamente da estrela. É um estado ligado. Os estados de energia positiva não são ligados. Se pudessemos continuar a integração no caso da fig.(3.9) veríamos a energia potencial a aproximar-se de zero quando $r \rightarrow \infty$, enquanto a energia cinética tenderia para o valor da energia total. Assintoticamente o movimento do planeta seria rectilíneo e uniforme. A força que sobre ele actua decai como $1/r^2$.

O valor da velocidade inicial que separa as órbitas abertas e fechadas é facilmente calculado a partir da condição de anulamento da energia

$$\frac{1}{2}mv_0^2 - G \frac{Mm}{r_0} = 0 \quad (3.124)$$

$$v_0^2 = \frac{2GMm}{r_0} = 2v_c^2 \quad (3.125)$$

em que v_c é a velocidade da órbita circular de raio r_0 . Com as nossas unidades

$$v_0 = \sqrt{2}v_c = \sqrt{22}\pi = 8.89 \quad (3.126)$$

Na fig.(3.11) representamos uma órbita exactamente com este valor de velocidade inicial. Na secção seguinte concentramo-nos nas órbitas fechadas, pela importância que têm no Sistema Solar.

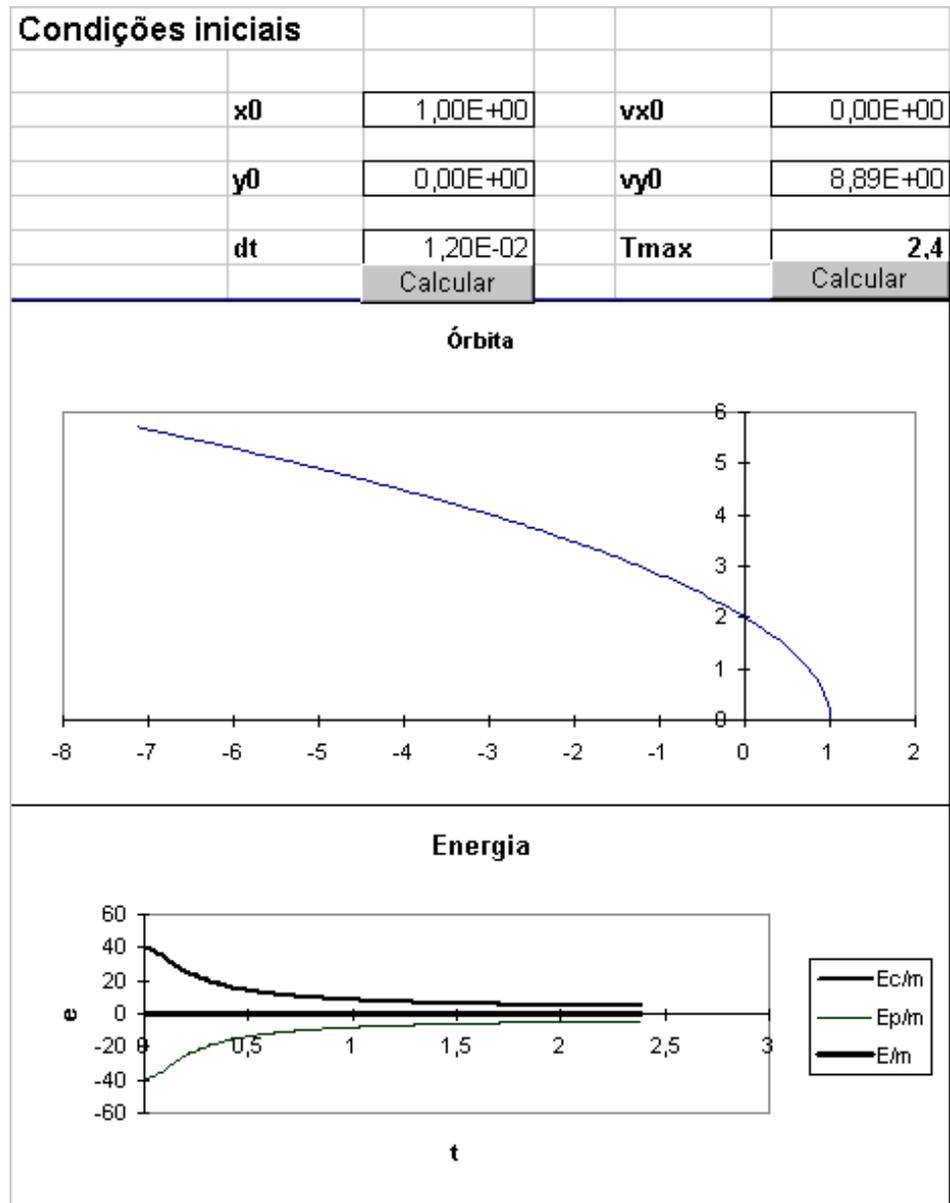


Figura 3.11: Uma órbita de energia nula.

Leis de Kepler

As órbitas dos planetas do sistema solar correspondem a estados ligados. Com base nas observações minuciosas do astrónomo dinamarquês Tycho Brahe, Kepler formulou as suas famosas leis de que recordamos as duas primeiras.

- As órbitas dos planetas são elipses e o Sol ocupa um dos focos.
- (Lei das áreas) As áreas varridas pelo vector de posição de um planeta, em tempos iguais, são iguais (origem Sol).

Newton provou, analiticamente, que estas leis, obtidas empiricamente, eram consequência das suas leis de movimento. Poderemos verificar o mesmo numericamente. No apêndice A recordam-se algumas definições relativas a elipses. De acordo com a primeira lei um dos focos deve ser a origem de coordenadas, onde está a estrela. Como já referimos, o ponto inicial de integração $x = 1$ $y = 0$, como tem $v_r = 0$, é um ponto de distância máxima ou mínima da origem. Logo é um ponto sobre o eixo maior da elipse. O segundo foco estará sobre o eixo xx a uma distância $2ea$ da origem, em que e é a excentricidade e a o semieixo maior da elipse. O semieixo maior da elipse (se a órbita for uma elipse) será dado por

$$2a = x_{max} - x_{min} \quad (3.127)$$

Como temos um lista de coordenadas x não é difícil encontrar o valor mínimo ($x_{max} = 1$, por construção) e obter a

$$a = \frac{1}{2}(x_{max} - x_{min}) = \frac{1}{2}(1 - x_{min}) \quad (3.128)$$

A distância do ponto inicial de integração à origem (sempre 1) permite calcular a excentricidade, pois

$$x_{max} = (1 \pm e)a \quad (3.129)$$

conforme o ponto inicial é o afélio (afastamento máximo) ou periélio (afastamento mínimo).

Em qualquer caso

$$e = \left| \frac{x_{max}}{a} - 1 \right| = \left| \frac{1}{a} - 1 \right| \quad (3.130)$$

O centro da elipse tem coordenada x dada por $(x_{max} + x_{min})/2$. O segundo foco ocupa relativamente a este ponto a posição simétrica do primeiro (origem das coordenadas) e portanto tem coordenada x_f dada por $x_{max} + x_{min}$. Na fig.(3.12) representa-se mais uma órbita com a indicação da excentricidade e semi-eixo maior calculados por este processo.

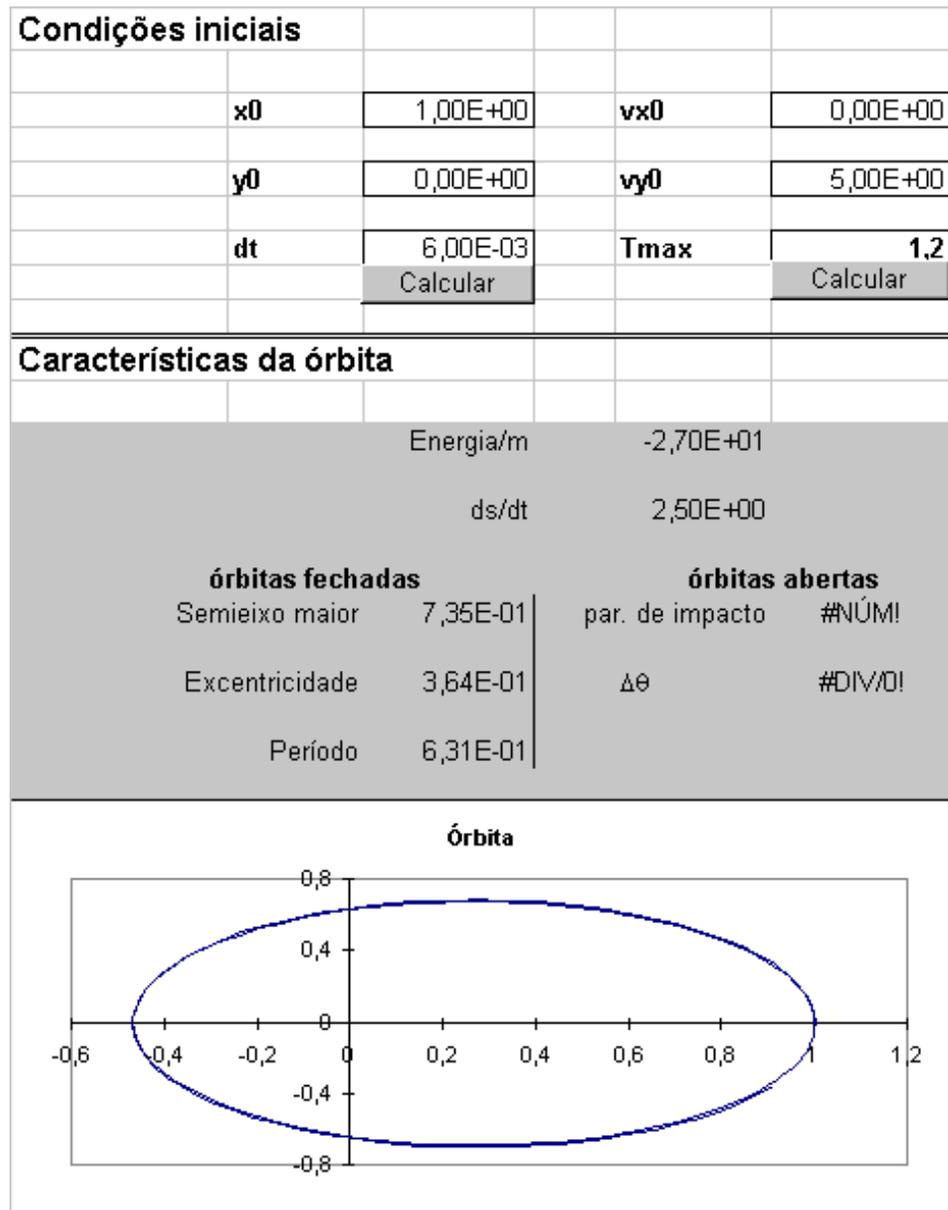


Figura 3.12: As principais características desta órbita, energia, área varrida por unidade de tempo, excentricidade, período, foram calculadas do modo indicado no texto.

Sabendo a posição do segundo foco podemos calcular a soma $d + d'$ para cada ponto da órbita.

$$d + d' = \sqrt{x^2 + y^2} + \sqrt{(x - x_f)^2 + y^2} \quad (3.131)$$

Naturalmente esta determinação de parâmetros é aproximada. A órbita é construída a partir do cálculo de um número discreto de posições e, em geral, o instante em que a órbita volta a cruzar o eixo dos xx poderá não estar entre os instantes calculados. Este erro pode ser controlado variando o passo de integração dt .

Seja $A(T)$ a área varrida pelo raio vector do planeta a partir de um dado instante $t = 0$. A área varrida entre t e $t + \Delta t$ é $\Delta A \equiv A(t + \Delta t) - A(t)$. A segunda lei de Kepler, afirma que a intervalos Δt iguais correspondem ΔA iguais. Isto quer dizer que a área varrida por unidade de tempo, $\Delta A/\Delta t$ é a mesma para qualquer intervalo Δt . Por outras palavras, A *velocidade de varrimento de área* $dA(t)/dt = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \Delta A/\Delta t$ não varia ao longo da órbita. Trata-se de uma segunda lei de conservação a juntar à da energia. Num intervalo de tempo Δt muito curto a área varrida pelo raio vector de posição é a do triângulo cujos lados são $\mathbf{r}(t)$, $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t)$ e $\mathbf{r}(t + \Delta t)$. Mas esta área é metade da área do paralelogramo definido por $\mathbf{r}(t)$ e $\Delta \mathbf{r}$. Usando o resultado do apêndice B

$$\Delta A = \frac{1}{2}(x\Delta y - y\Delta x) \quad (3.132)$$

No limite $\Delta t \rightarrow 0$

$$\Delta x = v_x \Delta t; \quad \Delta y = v_y \Delta t; \quad (3.133)$$

ou seja

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{2}(x(t)v_y(t) - y(t)v_x(t)) \quad (3.134)$$

O segundo membro pode ser calculado a partir da listagem dos valores de \mathbf{r} e \mathbf{v} ao longo do tempo. A segunda lei de Kepler afirma

$$\frac{dA}{dt} = \text{constante}. \quad (3.135)$$

Nas fig.(3.13) mostram-se gráficos da soma das distâncias aos focos, e da área varrida por unidade de tempo, para uma órbita fechada. Como era de esperar num cálculo aproximado não se verifica exactamente a constância destas duas grandezas. No entanto um olhar atento às escalas mostram que as respectivas variações percentuais são, de facto, muito pequenas. Na prática, a existência de leis de conservação serve muitas vezes para aferir a qualidade dos métodos numéricos. É curioso notar que as maiores variações

de dA/dt ocorrem quando o planeta passa mais próximo da estrela. Neste problema, como vimos, não existe uma escala de tempo intrínseca. Mas dada uma distância r temos uma escala de tempo associada, $T \equiv \sqrt{4\pi^2 r^3 / GM}$. Quanto mais pequeno for r mais pequeno será T . Deste modo para manter a mesma qualidade de aproximação o passo de integração deveria ser menor quando o planeta passa mais próximo da estrela.

A lei das áreas foi utilizada para calcular o período das órbitas. Como dA/dt é constante a área varrida entre 0 e t , $A(t) = (dA/dt)t$. Para um período, a área varrida deve ser a área da elipse, $S = \pi ab$, logo $T = S/(dA/dt)$. Os parâmetros geométricos da órbita foram determinados pelo processo acima referido e é possível para cada órbita calcular o período.

T , assim como e e o semieixo maior a , crescem quando a velocidade inicial se aproxima da velocidade limite das órbitas fechadas. Os cometas são corpos com órbitas muito excêntricas. O seu periélio $(1 - e)a$ pode ser várias vezes inferior ao afélio $(1 + e)a$ pois a excentricidade das respectivas órbitas é próxima de 1. Na fig.(3.14) mostra-se uma órbita deste tipo.

Colisões e órbitas abertas

Na fig.(3.15) representa-se uma órbita aberta, iniciada a uma distância da estrela muito superior ao valor da distância mínima. A órbita é quase rectilínea, no início e novamente depois de o planeta se voltar a afastar da estrela. No limite em que $r \rightarrow \infty$ o movimento deverá ser uniforme pois a força gravítica tende para zero. Por conservação de energia a velocidade final deverá ser igual à inicial, pois para $r \rightarrow \infty$ a energia potencial é nula e toda a energia é cinética. O efeito da atracção gravítica da estrela é desviar a direcção de movimento do planeta. Estas órbitas foram encontradas, noutra contexto, a propósito da experiência de Rutherford. A força entre partículas α e os núcleos de ouro é semelhante, na forma, à força gravítica, (força central decaindo com $1/r^2$) embora seja, nesse caso, repulsiva. O movimento inicial das partículas α é rectilíneo. Quando se aproximam dos núcleos de ouro são deflectidas pela força de Coulomb. Como a energia total é positiva voltam a afastar-se acabando por ter um movimento rectilíneo. Um parâmetro importante nestas circunstâncias é o ângulo de desvio. Na fig.(3.16) mostra-se o ângulo que a velocidade faz com o eixo dos xx para a órbita da fig.(3.15). Estas órbitas podem ser caracterizadas pela energia e pelo *parâmetro de impacto*, a distância entre a direcção inicial da velocidade (assíntota da órbita) e a estrela. No caso da experiência de Rutherford as partículas α têm aproximadamente a mesma energia. Mas, como o feixe de partículas tem uma secção recta de dimensões macroscópicas, existe uma distribuição de parâmetros de impacto que se traduz numa distribuição de ângulos de desvio. Os métodos aqui apresentados podem ser usados para reproduzir numericamente os cálculos de Geiger e Marsden, relativos à distribuição de

Condições iniciais				
	x0	1,00E+00	vx0	0,00E+00
	y0	0,00E+00	vy0	7,00E+00
	dt	1,00E-02	Tmax	1.2
		Calcular		Calcular

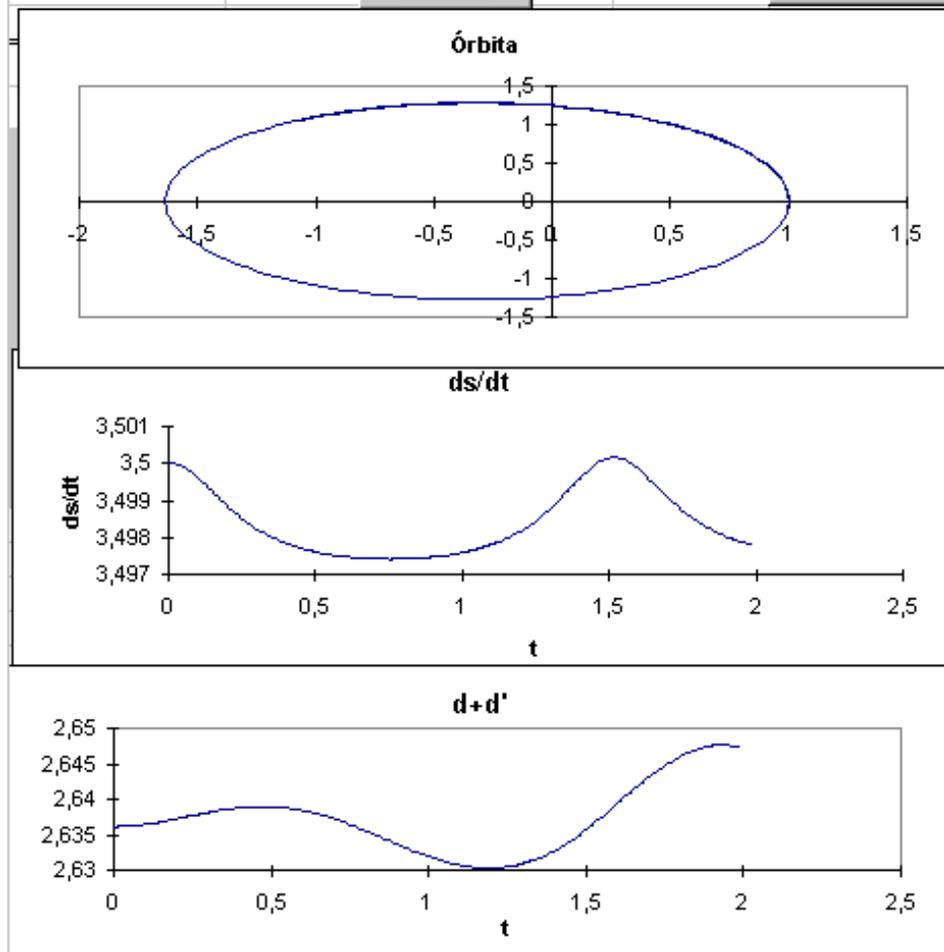


Figura 3.13: As variações da área varrida por unidade de tempo e da soma das distâncias aos dois focos são inferiores a 1%.

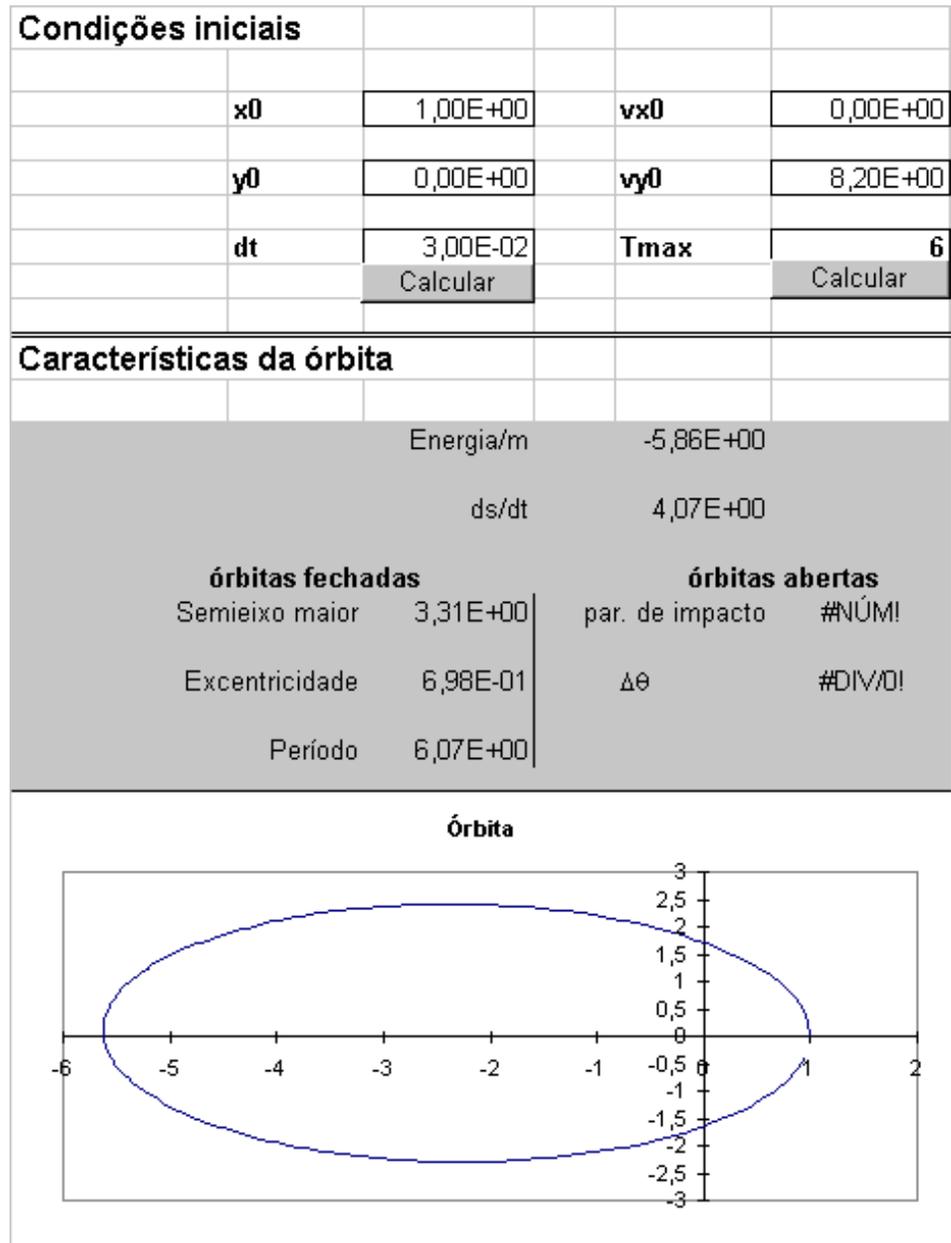


Figura 3.14: Uma órbita muito excêntrica, *quase* aberta.

ângulos de desvio das partículas α , referidos no capítulo 2 e que vieram confirmar a interpretação de Rutherford.

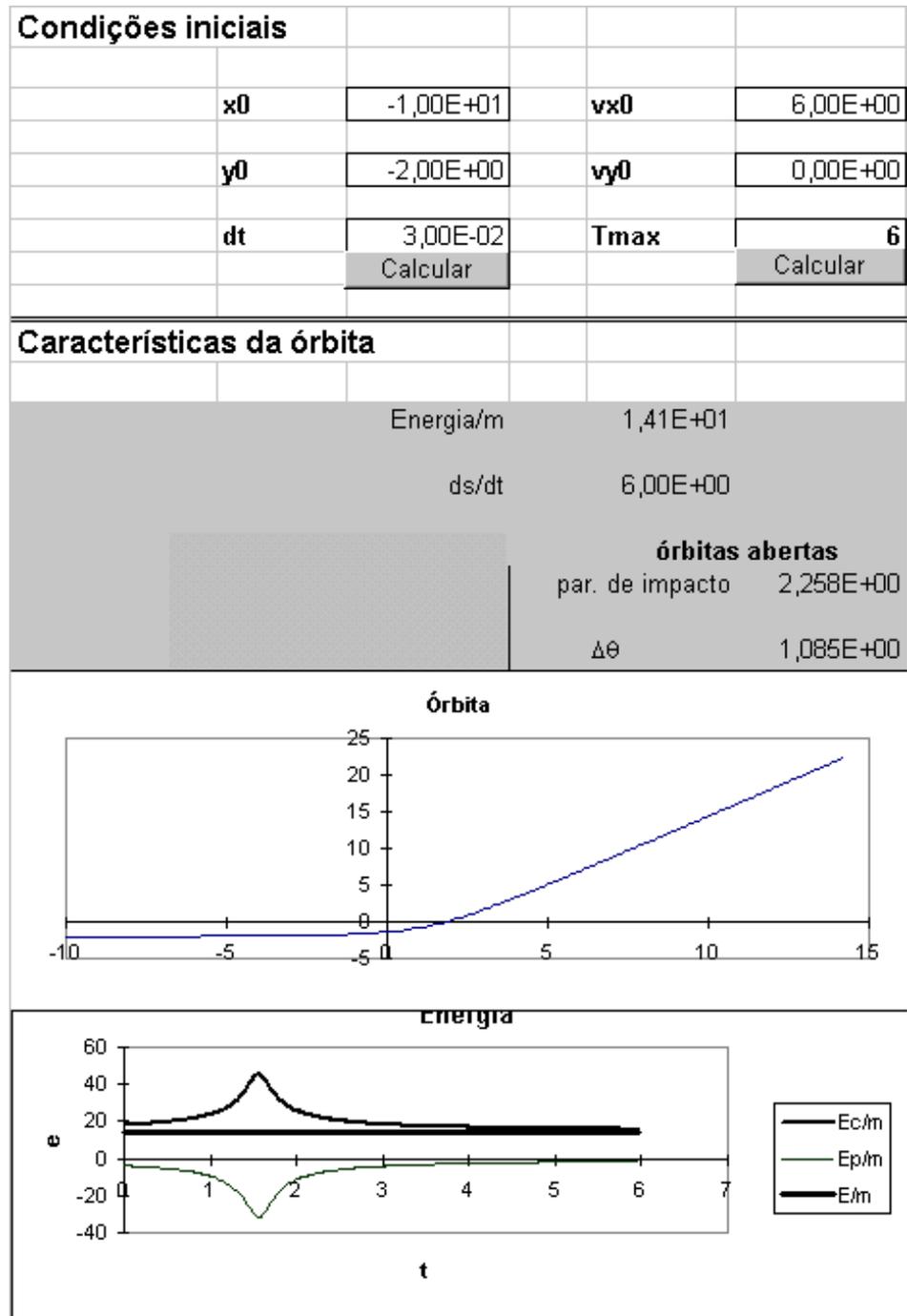


Figura 3.15: Uma órbita aberta. Nos limites $t \rightarrow \pm\infty$ o planeta tem movimento uniforme.

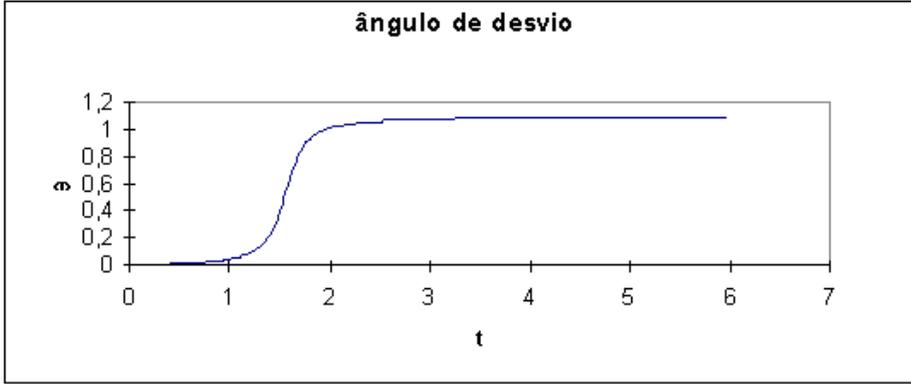


Figura 3.16: O ângulo da velocidade com o eixo dos xx para a órbita da figura anterior.

As leis de conservação e características das órbitas

Há vários resultados importantes que podem ser obtidos sem o cálculo completo das órbitas, se usarmos as leis de conservação, que verificámos numericamente. Como exemplo vamos considerar a excentricidade e o período de uma órbita fechada à medida que a velocidade no periélio se aproxima da velocidade correspondente a uma órbita aberta. Outros exemplos são considerados nos problemas que acompanham estas notas.

Atentemos primeiro nas seguintes relações

$$E/m = \frac{1}{2}v_p^2 - GM\frac{1}{r_p} \tag{3.136}$$

$$\sigma \equiv \frac{dA}{dt} = \frac{1}{2}v_p r_p \tag{3.137}$$

em que E é a energia e v_p e r_p são a velocidade e a distância à estrela no periélio. Note-se que neste ponto a velocidade é perpendicular ao raio vector e daí a segunda igualdade (c.f. eq.(3.134)). A grandezas do primeiro membro são constantes de movimento. Logo no ponto de afastamento máximo, o afélio, temos também

$$E/m = \frac{1}{2}v_a^2 - GM\frac{1}{r_a} \tag{3.138}$$

$$\sigma = \frac{1}{2}v_a r_a \tag{3.139}$$

Ou seja

$$\frac{1}{2}v_a^2 - GM\frac{1}{r_a} = \frac{1}{2}v_p^2 - GM\frac{1}{r_p} \tag{3.140}$$

$$v_a r_a = v_p r_p \tag{3.141}$$

Estas duas equações permitem determinar v_a e r_a em termos de v_p e r_p . Como $r_a/r_p = (1+e)/(1-e)$ podemos obter, em princípio, a excentricidade em termos de r_p e v_p . Eis uma maneira expedita de o fazer

$$v_a = v_p \frac{r_p}{r_a} \quad (3.142)$$

$$\frac{1}{2}v_a^2 - \frac{1}{2}v_p^2 = -\frac{GM}{r_p} \left(1 - \frac{r_p}{r_a}\right) \quad (3.143)$$

Substituindo a primeira equação na segunda obtém-se

$$\frac{1}{2}v_p^2 \left(\frac{r_p^2}{r_a^2} - 1\right) = -\frac{GM}{r_p} \left(1 - \frac{r_p}{r_a}\right) \quad (3.144)$$

ou seja

$$v_p^2 = \frac{GM}{r_p}(1+e) \quad (3.145)$$

Se designarmos por $v_c \equiv GM/r_p$ a velocidade de uma órbita circular de raio r_p podemos escrever este resultado de um modo sugestivo

$$e = \frac{v_p^2}{v_c^2} - 1 \quad (3.146)$$

A excentricidade é nula para $v_p = v_c$ como seria de esperar. Quando $v_p \rightarrow \sqrt{2}v_c$ a excentricidade $e \rightarrow 1$ (note-se que por definição, a velocidade no periélio é sempre superior à velocidade de uma órbita circular de raio r_p). Como estamos a manter r_p fixo o semi-eixo maior da elipse $a = r_p/(1-e)$ diverge neste limite, que, como vimos atrás, separa as órbitas fechadas das abertas (a energia total é nula neste limite, ver eq.(3.126)).

O período pode ser obtido da relação atrás referida $T = S/(dA/dt)$ em que $S = \pi ab = \pi a^2 \sqrt{1-e^2}$ é a área da elipse. Usando a eq.(3.145) e os resultados do Apêndice A podemos obter a terceira lei de Kepler, na sua forma geral, para órbitas elípticas

$$T^2 = 4\pi^2 \frac{a^4(1-e^2)}{v_p^2 r_p^2} = \frac{4\pi^2}{GM} a^3 \quad (3.147)$$

Note-se que $T \rightarrow \infty$ quando v_p tende para a velocidade limite de uma órbita fechada. Estes resultados e outros semelhantes são explorados nos problemas.

Leituras Recomendadas

- *Feynman Lectures on Physics*, Feynman Leighton & Sands, vol I, caps. 8 e 9. Se só puder adquirir uma obra de Física, compre esta. Os três volumes das lições de Feynman, constituem a mais fascinante obra introdutória de Física que conheço.

- *Classical and Modern Physics*, K. Ford, Vol I Cap. 11.

Capítulo 4

Modelos Probabilísticos

Imprevisibilidade e Probabilidade

Temos vindo a discutir problemas em que a evolução dos sistemas é determinística. Por outras palavras, é possível caracterizar num dado instante o estado do sistema de tal modo que os estados posteriores (ou anteriores) são univocamente determinados. Vamos agora considerar problemas em que a possibilidade de calcular uma evolução bem determinada nos escapa. Não nos preocuparemos demasiado com a razão de ser dessa impossibilidade. O objectivo fundamental será, não só descortinar um pouco dos métodos de análise apropriados a estas questões, mas sobretudo aprender a formular as perguntas relevantes.

Consideremos um gás confinado a um recipiente. Suponhamos que num dado instante conhecemos a posição e velocidade de uma das moléculas. Após um certo tempo poderemos saber onde ela se encontra? Poderemos sequer saber se ela se encontra na metade esquerda ou direita do recipiente? Naturalmente a trajectória da molécula é determinada pelas leis de Newton. Mas a nossa especificação do estado inicial é grosseiramente incompleta. Teríamos que conhecer também as posições e velocidades de todas as outras moléculas que poderiam vir a colidir com a que estamos a considerar. As forças sobre a molécula em causa dependem das posições das suas vizinhas e temos que as conhecer para calcular o movimento dela. Mas as posições das vizinhas variam de um modo que depende das posições de outras moléculas. Por outras palavras, não é possível, sequer, contemplar o cálculo do movimento de uma molécula sem calcular o de todas. Mas mesmo que possuíssemos a prodigiosa capacidade de cálculo para um sistema de equações de evolução para $6N$ variáveis, 3 de posição e 3 de velocidade para N moléculas (com $N \sim 10^{23}$) o nosso problema não ficaria resolvido. É que um tal sistema é com toda a certeza caótico, isto é, sensível às condições iniciais. Qualquer pequena incerteza nos valores iniciais da posição e da

velocidade (note-se que para que a incerteza seja “nula” numa coordenada precisávamos de especificar uma sequência infinita de dígitos) será rapidamente amplificada. Todo o jogador (ou jogadora) de bilhar sabe que a menor imprecisão na tacada pode significar a diferença entre duas bolas colidirem ou não e conduzir a um estado final totalmente diferente. Assim no nosso sistema após um tempo muito curto o nosso poder de previsão estaria completamente perdido.

Imaginemos a seguinte experiência conceptual. Colocamos uma determinada molécula no centro da metade direita do recipiente. Preparamos o estado inicial do gás tão pormenorizadamente quanto possível. Depois, esperamos um tempo suficiente para que a molécula possa atravessar o recipiente várias vezes e verificamos se a molécula se encontra do lado direito ou esquerdo. A nossa capacidade de previsão do resultado desta experiência seria nula. Com efeito se a repetirmos, *sempre com a mesma condição inicial, pelo menos tanto quanto podemos dizer*, obteremos resultados variáveis, sem qualquer padrão, *aleatórios*. Não teremos mais sucesso em prever de que lado se encontra a molécula do que em prever se o lançamento de uma moeda vai dar cara ou coroa.

Mas, e esta é a questão fundamental, a quem importa saber a trajectória de uma única molécula de um gás? Que observação física que possamos fazer sobre um gás tem um resultado dependente da trajectória de uma só partícula? Quais são então as questões relevantes?

O valor de qualquer grandeza que possamos medir relativa a um gás será o resultado do comportamento de um grande número de moléculas. Por exemplo, a massa de gás que num dado instante se encontra na metade direita do recipiente poderia ser medida isolando-a da outra metade por uma partição e pesando-a. As moléculas de um gás diluído, como veremos mais à frente, são razoavelmente independentes. Assim, a questão não é onde se encontra uma dada molécula, mas sim quantas se encontram numa dada porção do recipiente. Se as moléculas são independentes, isto é como perguntar, num grande número de lançamentos de uma moeda, quantas vezes sai cara. O facto de *nada podermos prever num único lançamento* significa (entre outras coisas) que temos uma expectativa definida para o que deve acontecer em muitos, nomeadamente devemos ter aproximadamente tantas caras como coroas. No caso do gás teremos também expectativas definidas quanto ao número de moléculas que encontraremos numa dada parte do recipiente. No que se segue exploraremos em mais detalhe esta ideia, tentaremos precisá-la em alguns aspectos, pois ela está na base das afirmações e previsões positivas que podemos fazer relativamente a modelos probabilísticos. Mas antes disso consideremos outro exemplo.

Dois núcleos radioactivos, tanto quanto podemos dizer *absolutamente idênticos*, não decaem, no entanto, ao mesmo tempo. Por exemplo con-

sideremos o isótopo de azoto ^{13}N . Tomemos um núcleo e esperemos 10 minutos. Prever se ele decaiu, ao fim deste tempo, emitindo um positrão e transformando-se em ^{13}C , é uma experiência do tipo *moeda ao ar*. Temos tanta possibilidade de acertar como de prever se uma moeda vai dar cara ou coroa. E repare-se que neste caso, a ciência refere-se a dois núcleos deste tipo como *indistinguíveis*; o acaso é parte essencial deste fenómeno. De novo, sobre o que acontece a *um* núcleo, a nossa ignorância é completa. Mas ao medir a radioactividade de uma amostra não trabalhamos com um núcleo de cada vez. Se conseguíssemos 13 g deste isótopo, teríamos 6×10^{23} núcleos. O seus decaimentos são completamente independentes uns dos outros e, por isso, perguntar quantos núcleos decaem ao fim de 10 minutos é semelhante a perguntar quantas vezes sai cara se lançarmos a moeda 6×10^{23} vezes. E neste caso temos uma expectativa definida de que devemos obter cerca de metade das vezes caras. Isto é, deveremos ter *aproximadamente* metade dos núcleos a decair. Dizemos *aproximadamente* porque, se se trata realmente de um processo aleatório, o número de decaimentos será variável. Os núcleos sobreviventes aos fim de 9 minutos não tem possibilidade de *saber* quantos decaíram nesse intervalo, para poderem perfazer conta certa. Uma das coisas que vamos fazer neste capítulo é tentar quantificar esta variação.

O passeio aleatório (Random Walk)

Modelo para a Difusão

Uma partícula num gás tem um movimento muito irregular marcado pelas sucessivas colisões com outras moléculas. A sua direcção de movimento após cada colisão pode ser considerada como aleatória. A distância entre colisões também varia de modo imprevisível. O movimento pode ser considerado como uma sequência de passos de tamanho e direcções aleatórias. O passeio aleatório é um modelo extremamente simplificado deste processo. Primeiro temos a questão do tamanho dos passos. No caso da difusão o tamanho variará de acordo com uma determinada distribuição. Iremos supor que cada passo tem um tamanho fixo. Além disso o intervalo de tempo que dura cada deslocamento é variável. Imaginaremos um intervalo constante; podemos então medir o tempo através do número de passos. Numa situação realista a direcção de deslocamento variará continuamente no espaço. Suporemos que a partícula se desloca ao longo dos eixos coordenados. Esta hipótese e a anterior correspondem a dizer que as únicas posições possíveis são as de uma rede cristalina cúbica. Será um modelo realista para o movimento de um defeito pontual (um átomo de tipo diferente, um vazio) numa rede. Mas mesmo com todas estas simplificações há um aspecto do fenómeno que é preservado neste modelo: o carácter aleatório de cada deslocamento,

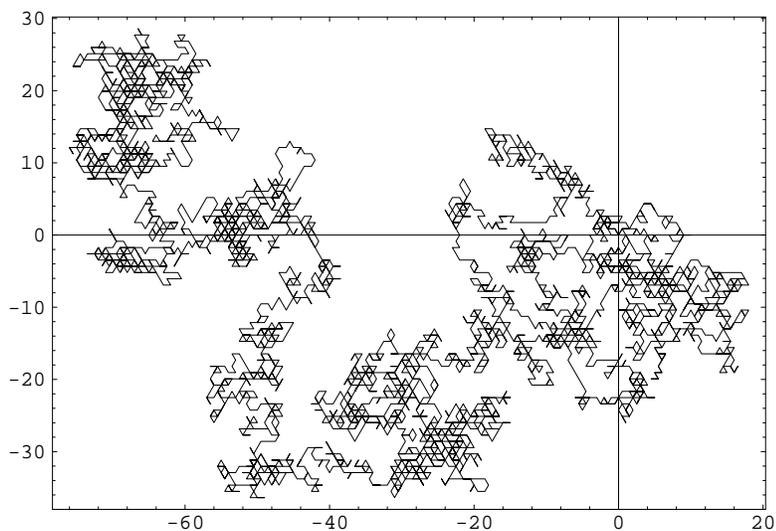


Figura 4.1: uma simulação de um passeio aleatório de 5000 passos numa rede triangular.

independente dos anteriores. Finalmente, limitamos os deslocamentos apenas a um eixo. Esta última simplificação não é tão importante quanto possa parecer. Estudando o movimento ao longo de uma linha podemos aprender muito sobre o movimento numa rede quadrada ou cúbica. Assim, por exemplo, se uma partícula se deslocar entre os pontos de uma rede quadrada (lado 1), em cada instante a sua coordenada x terá uma certa probabilidade de aumentar de 1 unidade, uma certa probabilidade de diminuir de 1 unidade e finalmente uma certa probabilidade de ficar igual, se o deslocamento for ao longo do eixo dos yy . Uma partícula que se desloca numa rede quadrada realiza passeios aleatórios unidimensionais nas coordenadas x e y ; estas variam exactamente como em passeios aleatórios numa linha, generalizados para situações em que se admite que o deslocamento num passo pode ter também o valor 0 além de $+1$ e -1 . Nas páginas que se seguem vamos fazer uma breve introdução a alguns conceitos de teoria de probabilidades. Fá-lo-emos numa perspectiva eminentemente prática, e ilustraremos os conceitos, à medida que forem sendo introduzidos, com o modelo do passeio aleatório.

Espaço de Acontecimentos. Probabilidades

Ao pensar num processo aleatório temos em mente uma experiência, que pode ser repetida, e cujo resultado é variável. Representaremos esta situação introduzindo um conjunto $U = \{e_1, e_2, \dots, e_M\}$, cujos elementos correspondem aos acontecimentos possíveis. Um passo de um passeio aleatório tem um de dois resultados possíveis, passo para a direita e para a esquerda que corresponderá a $U = \{d, e\}$. Se repetirmos a experiência N vezes a frequência relativa do acontecimento e_i é $f_i = N_i/N$ em que N_i é o número de vezes que ocorreu e_i . Trata-se, como é óbvio, de uma grandeza também aleatória. Em duas sequências de N experiências os valores de N_i serão em geral diferentes. Na fig.(4.2) mostram-se 5 passeios de vinte passos. Pela variação da posição final, vê-se que o número de passos d (nos gráficos são deslocamentos no sentido positivo do eixo x) é variável. Mas, por outro lado, temos uma expectativa definida para o valor destas frequências relativas, pelo menos no limite em que N é grande. Esperamos que duas sequências de N grande tenham valores de f_i próximos. Traduziremos esta expectativa associando a cada acontecimento $e_i \in U$ uma probabilidade p_i . No limite em que o número de repetições, N é grande as frequências f_i devem ser próximas de p_i . Dado este significado de p_i , deveremos exigir as seguintes propriedades:

$$p_i \geq 0 \quad \text{para todo } e_i \in U \quad (4.1)$$

$$\sum_{i=1}^M p_i = 1 \quad (4.2)$$

As frequências relativas são não negativas, $f_i \geq 0$. Como estamos a interpretar as probabilidades p_i como valores esperados de f_i devemos exigir a mesma propriedade. Por outro lado, é óbvio que se U inclui todos os resultados possíveis de uma dada experiência, $\sum_{i=1}^M f_i = (N_1 + \dots + N_M)/N = 1$. A soma das frequências relativas é *sempre* 1 e portanto devemos exigir o mesmo para a soma das probabilidades.

Cada um dos passeios da fig.(4.2) pode ser visto como o resultado de uma experiência. Podemos associar a um passeio de N passos um conjunto de acontecimentos U . Por exemplo para $N = 3$ os seus elementos seriam

$$\begin{aligned} e_1 &= (d, d, d); & e_2 &= (d, d, e) \\ e_3 &= (d, e, d); & e_4 &= (e, d, d) \\ e_5 &= (d, e, e); & e_6 &= (e, d, e) \\ e_7 &= (e, e, d); & e_8 &= (e, e, e) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Para um passeio de N passos teremos $2 \times 2 \times \dots = 2^N$ resultados (passeios) possíveis, uma vez que há duas possibilidades para cada passo. A partir

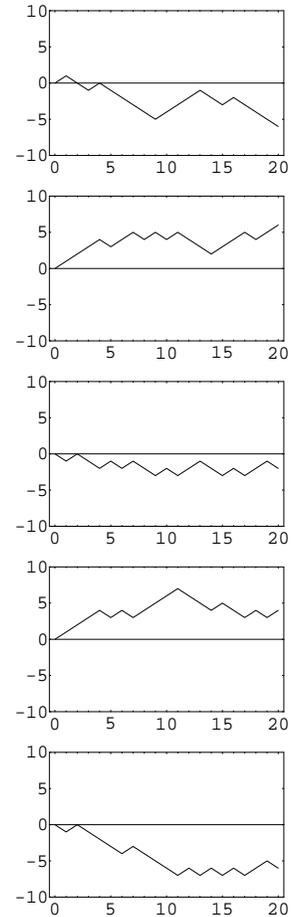


Figura 4.2: cinco passeios de vinte passos. O número de passos em cada sentido é variável.

das probabilidades associadas a cada elemento de U podemos definir probabilidades para qualquer subconjunto de U . Uma pergunta possível, por exemplo, é qual é a frequência com que os dois primeiros passos são iguais. No caso de L passeios com $N = 3$ teríamos

$$f = \frac{N_1 + N_2 + N_7 + N_8}{L} = f_1 + f_2 + f_7 + f_8 \quad (4.4)$$

o que nos leva a atribuir ao conjunto $\{e_1, e_2, e_7, e_8\}$ a probabilidade $p = p_1 + p_2 + p_7 + p_8$. A cada subconjunto $S \subseteq U$ associamos uma probabilidade

$$p(S) = \sum_{e_i \in S} p_i \quad (4.5)$$

Do ponto de vista matemático a interpretação das probabilidades é totalmente irrelevante. Em teoria matemática de probabilidades define-se uma estrutura constituída por um conjunto de acontecimentos U no qual está definida uma aplicação nos números reais, com propriedades que são uma versão mais sofisticada das eqs.(4.1), (4.2) e (4.5), aplicáveis a espaços infinitos e contínuos. No entanto a razão de ser do interesse desta estrutura, e da escolha das suas propriedades fundamentais, é determinada pelas situações reais a que pode ser aplicada, em particular pela interpretação de probabilidades como valores esperados de frequências relativas. As propriedades básicas de probabilidades (na situação muito simplificada de um espaço de acontecimentos discreto e finito) são as destas equações. Juntamos apenas duas convenções de nomenclatura, cuja razão de ser é mais que clara. A um acontecimento (que pode agora ser entendido como qualquer subconjunto de U) com probabilidade nula chamamos *impossível*; se a probabilidade for 1 o acontecimento é *certo*.

Acontecimentos Independentes

O conjunto de acontecimentos da eq.(4.3) pretende representar uma sequência de três experiências idênticas e independentes. Isto significa que as probabilidades p_1, \dots, p_8 devem estar relacionadas com as frequências esperadas para um passo. Para simplificar a notação consideremos apenas dois passos:

$$\begin{aligned} e_1 &= (d, d) & e_2 &= (d, e) \\ e_3 &= (e, d) & e_4 &= (e, e) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Designemos por p a probabilidade de um passo ser d e por $q = (1 - p)$ a de ser e . Parece natural escrever, simplesmente,

$$p_1 = p^2 \quad (4.7)$$

$$p_2 = p_3 = pq \quad (4.8)$$

$$p_4 = q^2 \quad (4.9)$$

Com efeito, esperamos uma fracção p de caminhos com um primeiro passo d . Destes, uma fracção p terá um segundo passo d . Logo o valor esperado da frequência de e_1 será p^2 . De modo idêntico obteríamos as outras equações.

Mas vamos analisar isto do ponto de vista do espaço de acontecimentos cujos elementos são caminhos de *dois* passos, listados na eq.(4.6). Imaginemos L repetições de 2 passos. A frequência relativa de dois passos à direita pode ser escrita, com notação óbvia,

$$f(d, d) \equiv f_1 = \frac{N(d, d)}{L} \quad (4.10)$$

A frequência com que o primeiro passo é d é

$$f(\text{qualquer}, d) = \frac{N(d, d) + N(e, d)}{L} \quad (4.11)$$

Note-se que, para ser consistente com notações consagradas, os passos são listados da direita para a esquerda ((d, e) , é um passo e , seguido de um d). As eqs.(4.10) e (4.11) podem combinar-se como

$$f(d, d) = \frac{N(d, d)}{N(d, d) + N(e, d)} \times \frac{N(d, d) + N(e, d)}{L} \quad (4.12)$$

O valor esperado do segundo factor do segundo membro é p , a probabilidade de um passo ser para a direita. O primeiro factor é a frequência relativa com que, *nos caminhos em que o primeiro passo é d* , o segundo é também d . A frequência com que o segundo passo é d , *sem condições*, é dada por

$$f(d, \text{qualquer}) = \frac{N(d, d) + N(d, e)}{L} \quad (4.13)$$

óbviamente diferente do primeiro factor do segundo termo da eq.(4.12). Estas considerações levam-nos a introduzir a noção de probabilidade condicionada, $p(d|d)$, a probabilidade de o segundo passo ser d *dado* que o primeiro também é. Tendo em atenção a eq.(4.12) esta probabilidade é definida pela equação

$$p(d, d) \equiv p(d|d) \times p(\text{qualquer}, d) = p(d|d) \times p \quad (4.14)$$

e corresponderá ao valor esperado para a frequência $N(d, d)/(N(d, d) + N(e, d))$.

Podemos agora dar um significado preciso ao conceito de independência de acontecimentos. A ideia que o segundo passo não tem qualquer relação com o primeiro, significa, não apenas que a probabilidade de o segundo passo ser d é igual a p , mas também que o valor do primeiro não têm influência nas frequências de ocorrência do segundo. Isto é que o valor esperado das

razões:

$$\begin{aligned} \frac{N(d, d)}{N(d, d) + N(e, d)} & \quad (\text{caminhos em que o primeiro passo é } d) \\ \frac{N(d, e)}{N(d, e) + N(e, e)} & \quad (\text{caminhos em que o primeiro passo é } e) \\ \frac{N(d, d) + N(d, e)}{L} & \quad (\text{todos os caminhos}) \end{aligned} \quad (4.15)$$

é o mesmo, p . Por outras palavras

$$p(d|d) = p(d|e) = p \quad (4.16)$$

e, idênticamente para um segundo passo e ,

$$p(e|d) = p(e|e) = q = (1 - p) \quad (4.17)$$

Quando estas condições são verificadas dizemos que os passos são independentes e obtemos

$$p(d, d) = p^2 \quad (4.18)$$

$$p(d, e) = p(e, d) = pq = p(1 - p) \quad (4.19)$$

$$p(e, e) = q^2 = (1 - p)^2 \quad (4.20)$$

com uma generalização óbvia para qualquer número de passos.

Assim, por exemplo, a probabilidade de ocorrência de *um* dado passeio Γ de N passos, em que N_d são d (e $N - N_d$ são e) será

$$p(\Gamma) = p^{N_d} q^{N - N_d} \quad (4.21)$$

Na situação em que $p = q = \frac{1}{2}$ esta probabilidade é $1/2^N$, isto é todos os passeios tem a mesma probabilidade de ocorrência. É importante notar que a eq.(4.21) dá a probabilidade de um passeio determinado e não a probabilidade de o número de passos de tipo d ser N_d . Para obter esta última teríamos que somar a anterior sobre todos os passeios com N_d passos d .

Variáveis aleatórias

O deslocamento de uma partícula ao fim de N passos de um passeio aleatório, X_N , é um exemplo de uma variável aleatória. A cada um dos acontecimentos possíveis (cada caminho) corresponde um valor de X_N . Por exemplo para $N = 3$ temos (ver eq(4.3))

$$X_3(e_1) = 3 \quad (4.22)$$

$$X_3(e_2) = X_3(e_3) = X_3(e_4) = 1 \quad (4.23)$$

$$X_3(e_5) = X_3(e_6) = X_3(e_7) = -1 \quad (4.24)$$

$$X_3(e_8) = -3 \quad (4.25)$$

O deslocamento no primeiro passo é outro exemplo de uma variável aleatória, que podemos definir no mesmo espaço de acontecimentos:

$$\xi_1(e_1) = \xi_1(e_2) = \xi_1(e_3) = \xi_1(e_5) = 1 \quad (4.26)$$

$$\xi_1(e_4) = \xi_1(e_6) = \xi_1(e_7) = \xi_1(e_8) = -1. \quad (4.27)$$

Com efeito, a variável X_3 pode ser escrita como uma soma $X_3 = \xi_1 + \xi_2 + \xi_3$ usando a definição corrente de soma de funções com valores em \mathcal{R} .

Como estamos a considerar espaços de probabilidade discretos e finitos as variáveis aleatórias tomam um conjunto de valores também discreto e finito. Cada um destes valores corresponde a um dado subconjunto de U . Por exemplo o valor $X_3 = 1$ corresponde ao conjunto de acontecimentos $S = \{e_2, e_3, e_4\}$. A cada valor de uma dada variável aleatória podemos associar uma probabilidade de ocorrência. Por exemplo a probabilidade de X_3 valer 1 seria $p_2 + p_3 + p_4$. De um modo geral, para uma variável ξ a probabilidade de ξ , com valores $\xi(e_i) \in \{x_1, x_2, x_3 \dots x_p\}$, tomar o valor x_α será

$$p_\xi(x_\alpha) \equiv \sum_{\{i:\xi(e_i)=x_\alpha\}} p_i \quad (4.28)$$

em que a soma inclui apenas os acontecimentos e_i tais que $\xi(e_i) = x_\alpha$. Esta equação define a distribuição de probabilidade de ξ , a função $p_\xi(x)$.

Como exemplo vamos determinar a distribuição de probabilidade de X_N . De acordo com a definição

$$P_N(x) = \sum_{\{\Gamma:X_N(\Gamma)=x\}} p(\Gamma) \quad (4.29)$$

em que a soma é sobre todos os passeios Γ de N passos cuja posição final é $x \in \{-N, \dots, N\}$. A posição final pode ser dada em termos do número de passos N_d para a direita, $x = N_d - N_e = 2N_d - N$. A probabilidade correspondente é $p(\Gamma) = p^{N_d}(1-p)^{N-N_d}$. Todos os termos da soma da eq.(4.29) tem o mesmo valor. Deste modo

$$P_N(x) = p^{N_d}(1-p)^{N-N_d} \times \Omega_N(N_d) \quad (4.30)$$

em que $\Omega_N(N_d)$ é o número de passeios de N passos com N_d para a direita sendo $N_d = (x + N)/2$. Este número é dado por

$$\Omega_N(N_d) = \frac{N!}{(N - N_d)!N_d!} \quad (4.31)$$

Eis um argumento que poderá convencer o leitor da validade desta fórmula (ver fig.(4.3)). Representemos os N passos por N caixas vazias. Para especificar um caminho com N_d passos d temos que pegar em N_d símbolos d e

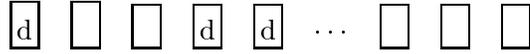


Figura 4.3: para especificar um caminho com N_d passos d num total de N temos que escolher N_d caixas de um total de N .

colocá-los em N_d das N caixas. Como temos N escolhas para a primeira caixa a preencher, $N - 1$ para a segunda, etc, teremos $N(N - 1)(N - 2) \dots (N - N_d + 1)$ possibilidades. Mas deste modo geramos cada passeio mais do que uma vez. De facto duas escolhas correspondentes ao mesmo conjunto de caixas preenchidas, escolhidas numa ordem diferente, representam o mesmo caminho. Cada caminho é, pois, gerado $N_d!$ vezes por este processo. O número de caminhos distintos será $N(N - 1) \dots (N - N_d + 1)/N_d!$, que é a expressão escrita na eq.(4.30).

Em resumo

$$P_N(x) = \frac{N!}{(N - N_d)!N_d!} p^{N_d} (1 - p)^{N - N_d}; \quad N_d = \frac{1}{2}(x + N) \quad (4.32)$$

Os valores de $P_N(x)$ para $N = 100$ estão representados na fig.(4.4) pela curva contínua (note-se que $P(x) = 0$ se x for ímpar). Sobrepostos a esta curva estão os valores da frequência relativa de ocorrência de cada valor de X_N numa simulação em que foram gerados 1000 passeios de 100 passos. O valor de p utilizado foi de $p = 0.7$. Existe um pico pronunciado junto a $x \approx 30$. Na secção seguinte introduzimos conceitos que permitem descrever, sucintamente, características salientes de distribuições de probabilidade como esta, com valores significativos numa região limitada.

Valores médios. Variâncias

Consideremos a seguinte experiência. Uma mancha de corante é injectada num canal estreito com um fluido em movimento. A mancha desloca-se e alarga-se. Cada partícula de corante tem um movimento errático que podemos representar por um passeio aleatório, com algumas das simplificações referidas nos início deste capítulo. O número de passos representa o tempo que decorreu desde a injeção. Há, obviamente, um grande número de partículas na mancha. Cada partícula corresponde a uma realização de um passeio aleatório e a fracção de partículas numa dada posição é a frequência relativa de ocorrência dessa posição. Isto significa que, a probabilidade $P_N(x)$ de o deslocamento de uma partícula ser x ao fim de N passos, deve ser próxima da fracção de partículas que ao fim de N passos tem posição x . Por outras palavras a distribuição de probabilidade $P_N(x)$ é a distribuição esperada de partículas de corante no canal. Na fig(4.5)

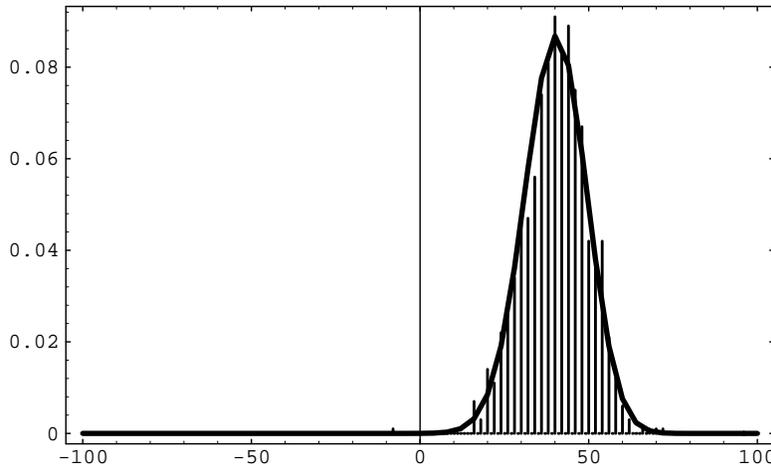


Figura 4.4: A distribuição de probabilidade da posição ao fim de 100 passos. As barras correspondem às frequências relativas obtidas numa simulação em que foram realizados 1000 passeios de 100 passos. Foi usado $p = 0.7$.

mostra-se a evolução desta distribuição em função do tempo (número de passos). O valor inicial $P_0(x)$ é nulo para todo o $x \neq 0$ sendo $P_0(0) = 1$. A evolução pode ser obtida através do cálculo explícito da fórmula da eq.(4.32) ou recursivamente, seguindo o método do problema 44.

Uma caracterização completa da distribuição de massa do corante exige o conhecimento de $P_N(x)$. Por outro lado parece possível definir uma *posição média* e uma *largura* para esta distribuição. Suponhamos que caracterizamos a posição média pelo centro de massa da mancha de corante. Designando por $n(x)$ o número de partículas com posição x , (e M o número total) teríamos

$$MX_{cm} = \sum_x xn(x) \quad (4.33)$$

(tendo todas as partículas a mesma massa, esta cancela nos dois membros desta equação), ou

$$X_{cm} = \sum_x x \frac{n(x)}{M} \quad (4.34)$$

$n(x)/M$ é a frequência relativa de ocorrência de uma posição x . O seu valor esperado é, por definição, $P_N(x)$. O valor esperado para a posição do centro de massa ao fim de N passos é, então

$$\langle X_N \rangle = \sum_x xP_N(x) \quad (4.35)$$

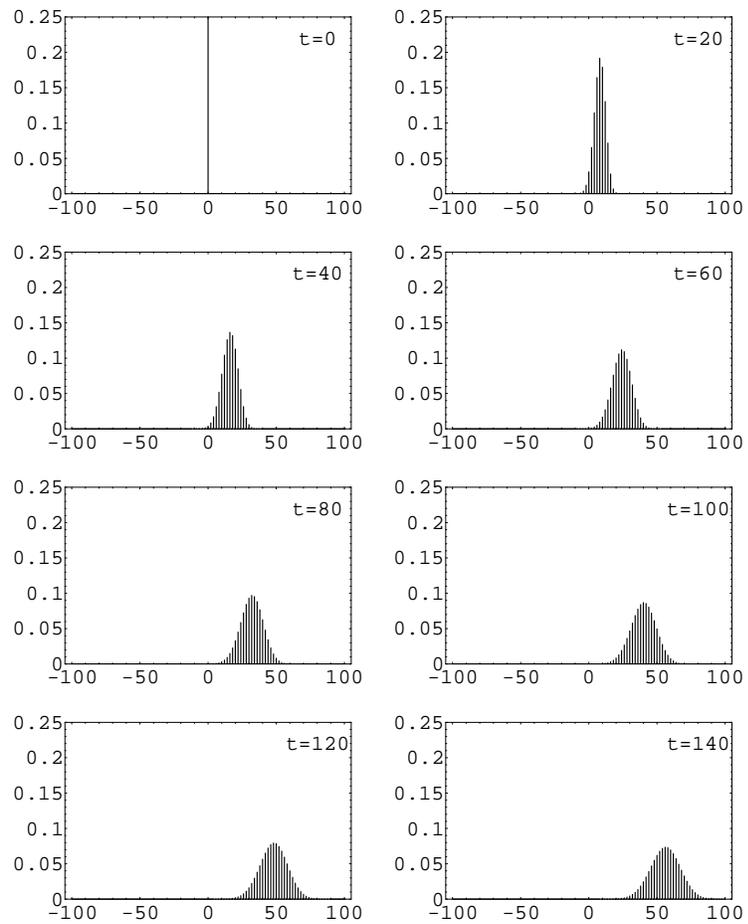


Figura 4.5: evolução temporal (com o número de passos) da distribuição de probabilidade da posição de uma partícula que realiza um passeio aleatório com $p=0.7$

Isto conduz-nos à definição geral de valor médio, ou valor esperado, de uma variável aleatória ξ com distribuição de probabilidade $P_\xi(x)$

$$\langle \xi \rangle \equiv \sum_x x P_\xi(x) \quad (4.36)$$

Note-se que esta definição também pode ser expressa através de uma soma sobre todos os elementos e_i do espaço de acontecimentos U

$$\langle \xi \rangle = \sum_{e_i \in U} \xi(e_i) p_i \quad (4.37)$$

Não é difícil transformar esta equação na anterior, se nos lembrarmos que $P_\xi(x)$ é a soma dos p_i 's sobre todos os acontecimentos para os quais $\xi(e_i) = x$.

Esta noção de valor médio está também relacionada com a noção corrente de média de um conjunto de valores. Supondo que há M partículas de corante a *média* das suas posições é

$$\bar{x} = \frac{x_1 + \dots + x_M}{M} \quad (4.38)$$

Mas, é claro que em vez de somar as posições de todas as partículas, podemos somar *sobre todos os valores possíveis de posição, x* , multiplicando cada um pelo número de vezes que ocorre na soma da eq.(4.38) isto, é pelo número de partículas com essa posição, $n(x)$. As eqs.(4.33) e (4.38) são equivalentes. O valor médio de X_N é o valor esperado para \bar{x} quando M é grande. No apêndice C juntam-se algumas propriedades de valores médios que são consequências quase directas da definição dada aqui.

Quando medimos a posição de uma partícula que realiza um passeio aleatório, não *esperamos* encontrar o valor médio. Quando repetimos uma experiência e medimos uma variável aleatória, obtemos valores diferentes. É apenas a *média desses valores* que esperamos que seja próxima do valor médio da variável. Podemos definir uma nova variável aleatória que mede os desvios relativamente ao valor médio

$$\eta \equiv \xi - \langle \xi \rangle \quad (4.39)$$

$P_\xi(x)$, a probabilidade de ξ ter o valor x , é também a probabilidade de η ter o valor $x - \langle \xi \rangle$. O valor médio de η é

$$\langle \eta \rangle = \sum_x (x - \langle \xi \rangle) P_\xi(x) = \langle \xi \rangle - \langle \xi \rangle = 0 \quad (4.40)$$

A média de η é zero porque os respectivos valores podem ser positivos ou negativos. Para estimar a dispersão dos valores de ξ em torno do seu valor médio temos que usar $|\eta|$, ou (o que resulta ser mais conveniente do ponto de

vista analítico) η^2 . Define-se a *variância* de uma variável aleatória ξ , como o valor médio de $(\xi - \langle \xi \rangle)^2$

$$\Delta\xi^2 \equiv \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle \quad (4.41)$$

A grandeza $\Delta\xi \equiv \sqrt{\langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle}$ é designada por desvio padrão.

Voltando à fig.(4.5) os visíveis deslocamento e alargamento da distribuição de probabilidade com o número de passos dados, poderão ser caracterizados pelas dependências de $\langle X_N \rangle$ e ΔX_N em N . Usando o facto que

$$X_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N \quad (4.42)$$

e que os passos são acontecimentos independentes, é possível mostrar os seguintes resultados:

$$\langle X_N \rangle = N \langle \xi \rangle \quad (4.43)$$

$$\Delta X_N = \sqrt{N} \Delta\xi \quad (4.44)$$

em que ξ é o deslocamento num só passo (qualquer um). Vejamos como.

A eq.(4.43) resulta directamente do facto de X_N ser uma soma de variáveis com a mesma distribuição de probabilidade, e confere com a nossa noção intuitiva de média (para uma prova mais formal ver o Apêndice C). Se o deslocamento médio num passo é $\langle \xi \rangle$ o deslocamento médio em N deve ser $N \langle \xi \rangle$. Não penso que o segundo resultado seja tão intuitivo. Podemos escrever

$$X_N = X_{N-1} + \xi_N \quad (4.45)$$

Subtraindo o valor médio, usando a eq.(4.43) e quadrando vem

$$\begin{aligned} (X_N - \langle X_N \rangle)^2 &= (X_{N-1} - \langle X_{N-1} \rangle)^2 + (\xi_N - \langle \xi \rangle)^2 \\ &+ 2(X_{N-1} - \langle X_{N-1} \rangle)(\xi_N - \langle \xi \rangle) \end{aligned} \quad (4.46)$$

Tomando o valor médio

$$\Delta X_N^2 = \Delta X_{N-1}^2 + \Delta\xi^2 + 2 \langle (X_{N-1} - \langle X_{N-1} \rangle)(\xi_N - \langle \xi \rangle) \rangle \quad (4.47)$$

O último termo é nulo. Senão vejamos. Para o calcular temos que somar sobre todos os caminhos de N passos, Γ_N :

$$\begin{aligned} &\langle (X_{N-1} - \langle X_{N-1} \rangle)(\xi_N - \langle \xi \rangle) \rangle = \\ &\sum_{\Gamma_N} (X_{N-1} - \langle X_{N-1} \rangle)(\xi_N - \langle \xi \rangle) p(\Gamma_N) \end{aligned} \quad (4.48)$$

A soma pode ser feita somando sobre todos os caminhos possíveis de $N - 1$ passos Γ_{N-1} e sobre os dois valores possíveis do último passo. Como os

passos são independentes $p(\Gamma_N) = p(\Gamma_{N-1})p(\xi_N)$. A soma sobre os valores do último passo faz aparecer um factor

$$\sum_{\xi_N=\pm 1} (\xi_N - \langle \xi \rangle) p(\xi_N) \quad (4.49)$$

que não é mais do que $\langle (\xi_N - \langle \xi \rangle) \rangle = 0$. Podemos concluir

$$\Delta X_N^2 = \Delta X_{N-1}^2 + \Delta \xi^2 \quad (4.50)$$

Esta relação pode ser iterada para dar a variância de X_N como a soma das variâncias de cada passo

$$\Delta X_N^2 = \Delta \xi_1^2 + \dots + \Delta \xi_N^2 = N \Delta \xi \quad (4.51)$$

que é equivalente à eq.(4.44)

O aspecto mais interessante deste resultado é que, à medida que N aumenta X_N vai ficando cada vez mais bem definido, em certo sentido menos aleatório. Isto porque o desvio padrão, que é uma estimativa da flutuação de X_N , aumenta como \sqrt{N} , enquanto que os valores *típicos* de X_N , estimados por $\langle X_N \rangle$, aumentam como N . A *incerteza relativa* de X_N , $\Delta X_N / \langle X_N \rangle \sim 1/\sqrt{N}$, tende para zero quando $N \rightarrow \infty$. Este resultado, como vimos, é válido para qualquer variável que seja a soma de N variáveis independentes, com a mesma distribuição de probabilidade. É para variáveis como estas que a designação de *valor esperado*, para o valor médio parece mais apropriada. Com efeito, no limite $N \gg 1$ os desvios em torno do valor médio são muito menores que o próprio valor médio.

Flutuações em $1/\sqrt{N}$

O resultado deduzido na secção anterior têm uma importância que transcende largamente o âmbito do passeio aleatório. Para o compreender volte-mos aos dois exemplos com que iniciamos este capítulo.

Imaginemos uma região A de um recipiente com gás. Suponhamos que a probabilidade de uma partícula se encontrar em A é p . Para cada partícula podemos definir uma variável aleatória ξ_i que vale 1 se a partícula se encontrar em A e 0 se estiver no resto do recipiente. Facilmente se verifica que

$$\langle \xi \rangle = p \quad (4.52)$$

$$\Delta \xi^2 = p(1-p) \quad (4.53)$$

Excepto quando p é próximo de 1 ou de 0 será uma variável com flutuações (medidas por $\Delta \xi$) da ordem do respectivo valor médio. O número de partículas em A pode escrever-se como

$$N_A = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N \quad (4.54)$$

em que N é o número total de partículas (quando $\xi_i = 0$ a partícula i , que está fora de A , não contribui para a soma). Como as partículas são razoavelmente independentes num gás diluído, podemos aplicar o resultado da secção anterior para concluir

$$\langle N_A \rangle = N \langle \xi \rangle \quad (4.55)$$

$$\Delta N_A = \sqrt{N} \Delta \xi \quad (4.56)$$

ou seja,

$$\frac{\Delta N_A}{\langle N_A \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\Delta \xi}{\xi} \quad (4.57)$$

Para um valor típico de $N \sim 10^{23}$ o factor $1/\sqrt{N} \sim 3 \times 10^{-12}$. As variações esperadas de N_A (medidas por ΔN_A) são *doze ordens de grandeza* inferiores ao valor esperado para N_A . Por outras palavras, em circunstâncias normais, as flutuações aleatórias de N_A são indetectáveis. Por exemplo, se a probabilidade de encontrar uma molécula em A for $1/2$ ($\langle \xi \rangle = 1/2$) e $N = 6 \times 10^{23}$ podemos dizer que o número de partículas em A é 3×10^{23} visto que as flutuações de N_A são da ordem de 10^{12} , e só seriam visíveis se a precisão de medida de N_A tivesse cerca de 12 algarismos significativos!

Uma situação inteiramente semelhante se verifica com o segundo exemplo que referimos, o do decaimento radioactivo de ^{13}N . Para cada núcleo definimos uma variável ξ_i que vale 1 se o núcleo decair em num certo intervalo e 0 se não decair. O número de decaimentos é $N_d = \xi_1 + \dots + \xi_N$ e por isso,

$$\frac{\Delta N_d}{\langle N_d \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (4.58)$$

Numa amostra com um número de núcleos macroscópico, para todos os efeitos, o valor médio $\langle N_d \rangle$ é o valor observado numa única experiência.

Creio que isto é suficiente para ver que este mecanismo é extremamente geral. Para variáveis extensivas, somas de um número, N , muito elevado de grandezas microscópicas, relativas a átomos ou moléculas individuais, (como são normalmente as grandezas macroscopicamente mensuráveis, número de partículas, massa, carga, energia, quantidade de movimento, etc) a desordem, a aleatoriedade, verificada ao nível molecular, não se manifesta a nível macroscópico. As flutuações dessas grandezas crescem como \sqrt{N} mas os respectivos valores crescem proporcionalmente a N . Os valores observados são, fundamentalmente, os respectivos valores médios.

Leituras Recomendadas

- *Feynman Lectures on Physics*, Feynman Leighton & Sands, vol I, cap. 6

Capítulo 5

Teoria cinética dos gases

O Estado Gasoso

As Interações num Gás Diluído

Na primeira parte do curso estimámos densidades de sólidos e líquidos e chegámos à conclusão que as distâncias entre átomos vizinhos são da ordem de grandeza dos tamanhos do átomos. A situação, no caso dos gases em condições normais de pressão e temperatura ($P = 1 \text{ atm}$, $T = 300 \text{ K}$), é muito diferente. Sabemos que uma mole de gás ocupa 22.3 litros. Isto é o volume por molécula ou átomo é:

$$v \approx \frac{22 \times 10^{-3}}{6 \times 10^{23}} \approx 4 \times 10^{-26} \text{ m}^3. \quad (5.1)$$

A distância típica entre partículas vizinhas é:

$$d \sim V^{1/3} \sim \sqrt[3]{40} \times 10^{-9} \sim 3.5 \times 10^{-9} \text{ m} \sim 35 \text{ \AA} \quad (5.2)$$

Um gás é então um sistema diluído em que as distâncias entre partículas são muito maiores que os respectivos tamanhos. Como as forças de interacção entre átomos ou moléculas decaem rapidamente com a distância é de esperar que nos gases o efeito destas forças seja muito mais reduzido que nos sólidos e líquidos.

Com efeito, existe ampla evidência que nos gases as partículas constituintes mantêm intactas, em grande parte, as propriedades que as caracterizam individualmente. Isso é particularmente evidente nos espectros de emissão. Os espectros atómicos, através dos quais identificamos as diferentes espécies atómicas, são, na realidade, espectros emitidos por átomos na fase gasosa. A razão porque cremos que são característicos dos átomos que compoem o gás resulta do facto de, no essencial, os espectros não dependerem do grau

de diluição ou temperatura do gás. Note-se que num sólido o espectro é radicalmente alterado relativamente ao dos átomos que o constituem.

Assim, somos levados a supor que uma boa parte do seu tempo as partículas de um gás não estão sujeitas a forças movendo-se com velocidade constante. Mas é óbvio que isto não pode ser a história completa. Se representarmos a energia de interacção entre dois átomos de He, por exemplo, em função da distância entre os átomos obtemos algo semelhante à fig.(5.1). Para grandes distâncias a interacção é atractiva (e fraca), mas é muito difícil comprimir a matéria a densidades que correspondem a distâncias interatómicas menores que o tamanho dos átomos. Os átomos são impenetráveis. A energia de interacção cresce rapidamente quando as distâncias dos centros dos átomos são menores que cerca um diâmetro atómico.

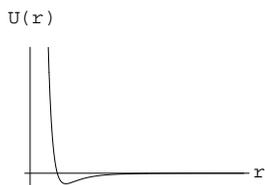


Figura 5.1: a interacção entre dois átomos é fortemente repulsiva a curtas distância e fracamente atractiva para distâncias grandes

Concluimos pois que o movimento uniforme das partículas é interrompido por eventos em que duas delas se aproximam entrando em acção as forças repulsivas. As duas partículas trocarão quantidades de movimento e energias e separar-se-ão retomando movimentos uniformes com velocidades diferentes das que tinham. Acabamos de descrever um processo de colisão!

Que numa colisão haja conservação de quantidade de movimento, não supreende pois quando duas partículas colidem só entram em jogo forças internas, e portanto é de esperar que haja conservação da quantidade de movimento. Mas vamos também supor que as colisões entre as moléculas de um gás são elásticas, isto é, há conservação da energia cinética. Para que não haja é necessário que uma das partículas que colide saia da colisão num estado interno excitado. A energia cinética disponível na colisão só desaparece se aparecer como energia interna dos corpos que colidem. Ora um átomo ou molécula tem um conjunto discreto de estados excitados bem definido. Acontece frequentemente que o estado final é o mesmo que o inicial, pois a energia do movimento das moléculas pode não ser suficiente para fazer uma delas transitar para um estado excitado. Nesse caso a colisão é rigorosamente elástica. Mesmo quando isso não acontece, a energia fica armazenada em graus de liberdade internos das moléculas (vibrações ou rotações). Noutras colisões pode acontecer que a energia de vibração de uma molécula se tranforme em energia de movimento de centro de massa. Numa situação de equilíbrio, em média, a energia cinética total em cada colisão não deve variar; a energia cinética total do gás deve manter-se constante no tempo (ao fim ao cabo sabemos da experiência que existem estados de equilíbrio, em que as propriedades do gás se mantêm constantes no tempo).

Concluindo, chegamos à imagem de um gás como um sistema diluído de partículas cujas interacções se reduzem a colisões que conservam a quantidade de movimento e a energia cinética total das partículas que colidem. A velocidade de cada partícula acaba por ser imprevisível quer devido à im-

possibilidade de prever exactamente o resultado de uma colisão, quer devido à impossibilidade de prever quais as colisões que vão ocorrer.

Vamos pois recorrer a uma descrição probabilística da velocidade das partículas do gás. Mas antes de prosseguirmos convém dizer algumas palavras sobre o modo de tratar variáveis aleatórias contínuas.

Variáveis aleatórias contínuas

Tomemos como exemplo uma variável aleatória que toma valores reais no intervalo $[0,1]$. Isto é, de cada vez que realizamos uma experiência obtemos um valor real para ξ neste intervalo. Vamos ver que não é possível definir uma probabilidade $P(x)$ de o valor de ξ ser x .

Com efeito imaginemos por simplicidade que todos os valores de ξ são igualmente prováveis. Suponhamos que realizamos N experiências com N muito grande. De acordo com a nossa interpretação de probabilidade, $P(x)$ deveria ser o valor esperado da frequência com que é observado o valor x para ξ , $N(x)/N$, em que $N(x)$ é o número de experiências em que ocorreu o valor $\xi = x$. Mas por maior que seja N , $N(x)$ é zero para quase todos os valores reais no intervalo $[0, 1]$. Isto porque não é possível numerar números reais. Há “muitos mais” números reais que naturais. Visto de outro modo, especificar um número real deste intervalo é indicar uma sequência infinita de números naturais, a sua expansão decimal. Se escolhermos os dígitos com igual probabilidade (desde 0 a 9), todas as sequências (todos os números reais do intervalo $[0, 1]$, $1 = .9999\dots$ se a expansão for infinita) são igualmente prováveis. É com probabilidade nula que geraremos duas sequências iguais (as sequências são infinitas). Em resumo, para N números reais teremos $N(x) = 1$ e para os outros (quase todos) $N(x) = 0$. Em qualquer caso no limite $N \rightarrow \infty$ teremos sempre

$$P(x) = 0 \quad (5.3)$$

Como podemos então descrever a probabilidade de ocorrência de uma variável contínua, como por exemplo uma componente da velocidade de um gás?

Consideremos o domínio de ξ dividido em vários intervalos, $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, 2, \dots$. Não há qualquer dificuldade em definir a probabilidade de ξ estar no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$. Se realizarmos um número suficientemente grande de experiências, as frequências relativas

$$\frac{N(x_i < \xi < x_{i+1})}{N} \quad (5.4)$$

deverão ser finitas, pelo menos para alguns dos intervalos pois,

$$\sum_i N(x_i < \xi < x_{i+1}) = N \quad (5.5)$$

($N(a < \xi < b)$ = número de vezes que ξ toma valores entre a e b) e portanto:

$$\sum_i \frac{N(x_i < \xi < x_{i+1})}{N} = 1 \quad (5.6)$$

Mas é óbvio que, se o número de intervalos aumentar e $\Delta x = x_{i+1} - x_i \rightarrow 0$, o número de termos nesta soma aumenta e, genericamente, cada termo deverá tender para zero proporcionalmente a Δx (pois $1/\Delta x$ é proporcional ao número de intervalos, isto é, de termos da soma). Assim quando:

$$P(x < \xi < x + \Delta x) = \rho(x)\Delta x \quad (\text{para } \Delta x \rightarrow 0) \quad (5.7)$$

chamamos a $\rho(x)$ a densidade de probabilidade da variável ξ . Para Δx pequeno $\rho(x)\Delta x$ é a probabilidade de a variável ξ tomar valores no intervalo $[x, x + \Delta x]$.

Para calcular $P(a < \xi < b)$ usamos o esquema habitual de dividir $[a, b]$ em intervalos Δx e somar $P(x < \xi < x + \Delta x)$ a todos os intervalos. No limite $\Delta x \rightarrow 0$ (número de intervalos $\rightarrow \infty$) obtemos:

$$P(a < \xi < b) = \int_a^b dx \rho(x) \quad (5.8)$$

Se ξ só toma valores no intervalo $[0, 1]$, devemos ter

$$P(0 \leq \xi \leq 1) = \int_0^1 dx \rho(x) = 1.$$

Em geral teremos sempre para cada variável real:

$$P(-\infty < \xi < \infty) = 1 \quad (5.9)$$

ou seja, a função $\rho(x)$ deverá obedecer à condição de normalização :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = 1. \quad (5.10)$$

Como o integral de $\rho(x)$ em qualquer intervalo é uma probabilidade, e por isso não negativo, devemos exigir

$$\rho(x) \geq 0. \quad (5.11)$$

A definição de valor médio é uma generalização do que foi feito para variáveis discretas:

$$\langle \xi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x \rho(x) \quad (5.12)$$

Genericamente, para qualquer função de ξ

$$\langle f(\xi) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \rho(x). \quad (5.13)$$

		DISCRETA	CONTÍNUA
Variável,	ξ	x_1, x_2, \dots	$-\infty < \xi < +\infty$
Probabilidade (Densidade)		$P(x_i)$	$\rho(x)$
Normalização		$\sum_i P(x_i) = 1$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho(x) = 1$
Valor médio,	$\langle \xi \rangle$	$\sum_i x_i P(x_i)$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x \rho(x)$
	$\langle f(\xi) \rangle$	$\sum_i f(x_i) P(x_i)$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \rho(x)$

Tabela 5.1: correspondências entre algumas definições relativas a variáveis aleatórias discretas e contínuas.

Intuitivamente, podemos pensar nesta expressão como uma soma a todos os intervalos infinitesimais $[x, x + dx]$ da respectiva probabilidade $\rho(x)dx$ vezes o valor que $f(\xi)$ toma quando ξ está nesse intervalo. Na tabela(5.1) escrevemos lado a lado alguns resultados para os casos de variáveis discretas e contínuas.

Densidade de probabilidade de velocidade

Dada uma molécula particular apenas podemos falar de probabilidade de uma dada componente da velocidade, v_z , estar num dado intervalo. Somos assim levados a definir a densidade de probabilidade de $f_z(v)$ como

$$f_z(v)dv = \begin{array}{l} \text{probabilidade de } v_z \text{ de uma molécula} \\ \text{estar no intervalo } [v, v + dv] \end{array}$$

Naturalmente dado o elevado número de moléculas, N , o número de moléculas com velocidade v_z nesse intervalo é $Nf_z(v)dv$ ou, por unidade de volume ($n \equiv N/V$):

$$nf_z(v)dv = \begin{array}{l} \text{número de moléculas com componente } z \text{ de } \mathbf{v} \\ \text{no intervalo } [v, v + dv], \text{ por unidade de volume.} \end{array}$$

Não discutiremos a forma explícita de $f(v)$ mas indicaremos algumas propriedades gerais.

1. Num gás em equilíbrio $f_z(v) = f_z(-v)$ e $\langle v_z \rangle = 0$.
2. Num gás em equilíbrio as densidades de probabilidade de qualquer componente da velocidade são iguais. Isto é $f_x(v) = f_y(v) = f_z(v)$.

Como consequência

$$\begin{aligned}\langle v_x \rangle &= \langle v_x \rangle = \langle v_z \rangle = 0 \\ \langle v_x^2 \rangle &= \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle .\end{aligned}$$

Estas propriedades de $f(v)$ são claramente necessárias dadas as características macroscópicas de um estado de equilíbrio de um gás. Por exemplo, suponhamos que $\langle v_z \rangle \neq 0$. Calculemos a quantidade de movimento total do gás. Temos que somar mv_z a todas as moléculas do gás. Como há $n f_z(v) dv$ moléculas com v_z no intervalo $[v, v + dv]$, temos, por unidade de volume:

$$\begin{aligned}p_z &= n \int_{-\infty}^{\infty} dv m v f_z(v) \\ &= nm \langle v_z \rangle .\end{aligned}\tag{5.14}$$

Mas isso significa que um volume ΔV do gás tem uma quantidade de movimento $\Delta P_z = n \Delta V m \langle v_z \rangle$. Do ponto de vista macroscópico, ΔP_z é dado pelo produto da massa desse volume, $\Delta M = mn \Delta V$, pela velocidade macroscópica segundo z ,

$$\Delta P_z = mn \Delta V u_z .\tag{5.15}$$

Comparando estas duas equações, vemos que $\langle v_z \rangle$ não é mais que a velocidade macroscópica de escoamento do gás. Para um gás em equilíbrio, sem transporte de massa $\langle v_z \rangle$ (e $\langle v_x \rangle$ e $\langle v_y \rangle$) são nulos.

A propriedade (2) resulta da equivalência de todas as direcções no espaço no seio do gás (isotropia de propriedades).

Chamaremos de v_{rms} a raiz quadrada do valor médio de v^2 :

$$v_{rms}^2 \equiv \langle v^2 \rangle\tag{5.16}$$

Verifica-se que a distribuição de velocidades de um gás é caracterizada por uma única escala de velocidades, v_{rms} . Ou seja, todos os valores médios não nulos se podem exprimir em termos de $\langle v^2 \rangle$ (ou de v_{rms}),

$$\langle v_i^n \rangle = \alpha_n v_{rms}^n\tag{5.17}$$

em que $i = x, y, z$ e α_n é um parâmetro adimensional da ordem de 1 (que depende de n). Para n ímpar, como $f(v) = f(-v)$, $\langle v_i^n \rangle = 0$ (as contribuições de $v > 0$ cancelam as de $v < 0$ pois para n ímpar $v^n = -(-v)^n$).

Cálculo da Pressão. Fórmula de Bernoulli.

Suponha que desejava pôr a andar um vagão. Um vagão “académico”, isto é, sem atrito. Poderia colocar-se atrás dele e empurrá-lo com uma força, F , constante. De acordo com a lei de Newton, a aceleração seria $a = F/M$. O movimento seria uniformemente acelerado e ao fim de um tempo t ,

$$MV(t) = Ft \quad (5.18)$$

Mas poderia ser ainda mais imaginativo. E começar a disparar bolas de ténis contra o vagão. Supondo que as bolas eram arremessadas com velocidade v_b e reflectidas no choque com o vagão sem perdas de energia, a variação da quantidade de movimento de cada bola seria

$$m_b(-v_b) - m_bv = -2m_bv_b \quad (5.19)$$

Por cada colisão o vagão adquire então, por conservação de quantidade de movimento

$$\delta P = 2m_bv_b \quad (5.20)$$

Mantendo uma taxa de n arremessos por unidade de tempo, ao fim de um tempo t o vagão veria a sua quantidade de movimento alterada para

$$MV(t) = nt \times 2m_bv_b \quad (5.21)$$

Se representássemos a quantidade de movimento do vagão em função do tempo para as duas situações consideradas, teríamos algo como o que está representado na fig.(5-2). Como $m_b \ll M$ a variação de velocidade do vagão por cada colisão é muito pequena. Para um grande número de colisões a quantidade de movimento do vagão torna-se, contudo apreciável. No gráfico da fig.(5.2) conseguimos distinguir os impactos individuais, mas podemos facilmente imaginar uma situação em que a mesma velocidade fosse conseguida com muito mais colisões e menor variação por colisão.

A fórmula da eq.(5.21) corresponde à recta representada também na fig.(5.2) e só é válida para tempos muito superiores ao intervalo entre colisões, e quantidades de movimento transferidas muito superiores às de uma colisão. Neste limite o efeito das colisões é equivalente ao de uma força constante aplicada ao vagão e dada por (c.f eqs(5.21) e (5.18))

$$F = 2nmv_b \quad (5.22)$$

A nossa interpretação da pressão exercida por um gás nas paredes do recipiente que o contém, tem um paralelo muito directo com o efeito das bolas de ténis no vagão. Já tínhamos visto que um gás é um sistema diluído, em que, na maior parte do tempo, as forças sobre cada partícula são desprezáveis. As interações reduzem-se a colisões. É pois natural supor que a

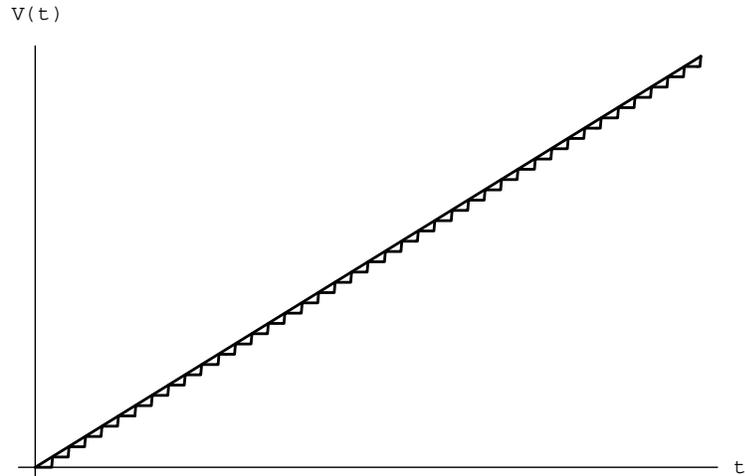


Figura 5.2: A velocidade do vagão para uma força constante (linha recta) e para uma sucessão de colisões com objectos com massa muito menor que a do vagão .

interacção do gás com as paredes é igualmente constituída pelas colisões das partículas do gás com as referidas paredes. Deste modo há uma transferência de quantidade de movimento permanente do gás para a parede. Dada a pequena massa das moléculas a quantidade de movimento em cada colisão é microscópica, extremamente pequena à nossa escala. Por isso essencialmente indetectável. Mas o resultado de uma acumulação de inúmeros choques é uma força macroscopicamente mensurável. Vamos agora calculá-la.

Tomemos como direcção do eixo dos zz a direcção perpendicular à parede com o sentido positivo do gás para a mesma. Por simetria (se não houver movimento macroscópico do gás paralelamente à parede) as forças segundo xx ou yy são nulas. Haverá, em média tantas colisões a transferir quantidade de movimento na direcção de x positivo como de x negativo e o efeito resultante será uma força nula segundo x . Um argumento semelhante pode ser aplicada a qualquer direcção paralela à parede. Por isso precisamos de nos preocupar apenas com o cálculo da força na direcção perpendicular à parede.

Em média, então, as componentes mv_x e mv_y da quantidade de movimento de uma molécula que colide com a parede não variam ($F_x = F_y = 0$). Por outro lado, numa situação de equilíbrio, a energia cinética das moléculas também não varia pois não há transferência líquida de energia entre as paredes e o gás. Se v_x e v_y e $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ não variam, concluímos que $|v_z|$ não

varia na colisão. Isto é, numa colisão, a componente z da velocidade troca de sinal, $v_z \rightarrow -v_z$. Cada colisão transfere uma quantidade de movimento para a parede de:

$$\delta P_{\text{parede}} = -\delta P_{\text{molécula}} = -(m(-v_z) - mv_z) = 2mv_z \quad (5.23)$$

em que m é a massa da molécula. Mas, numa área A de parede, quantas colisões há num intervalo de tempo Δt ? Uma molécula desloca-se, neste intervalo de tempo, de uma distância $v_z \Delta t$ na direcção da parede. Se a sua distância inicial à parede for superior a $v_z \Delta t$, a molécula não colide neste intervalo; se for inferior, há colisão. As moléculas que colidem são então as que estão num volume de base A e altura $v_z \Delta t$. Sendo n o número de moléculas por unidade de volume o número de colisões com a parede neste intervalo de tempo e na área A será $nv_z \Delta t A$ ($n \times$ volume em causa), e a quantidade de movimento transferida será

$$\Delta P = nv_z \Delta t \times 2mv_z = 2mnA\Delta tv_z^2 \quad (5.24)$$

Até ao momento temos ignorado um pequeno detalhe: nem todas as moléculas têm o mesmo valor de v_z . Como vimos atrás $nf_z(v)dv$ é o número de partículas, por unidade de volume com componente z da velocidade no intervalo $[v, v + dv]$. O raciocínio que fizemos pode ser aplicado a estas moléculas. Basta-nos adicionar o factor $f_z(v)dv$. A quantidade de movimento transferida por estas moléculas será

$$\Delta P = 2mnA\Delta tv^2 f_z(v)dv \quad (\text{moléculas com } v_z \in [v, v + dv]) \quad (5.25)$$

Para obter a quantidade de movimento total transferida por unidade de tempo e de área, isto é, a força por unidade de área, a Pressão, teremos que dividir por $A\Delta t$ e somar sobre todos os intervalos $[v, v + dv]$. Note-se que nestas equações está implícito o limite $dv \rightarrow 0$, ou seja a “soma” é, na realidade, um integral

$$\text{Pressão} = 2mn \int_0^\infty dv f_z(v) v^2 \quad (5.26)$$

Somamos apenas sobre $v > 0$ pois moléculas com $v_z < 0$ não colidem com a parede. Mas, como o número de moléculas com velocidade $v_z = -v$ é igual ao de moléculas com velocidade $v_z = v$ ($f_z(v) = f_z(-v)$) podemos somar sobre todos os valores de v_z e dividir por 2:

$$\text{Pressão} = mn \int_{-\infty}^\infty dv f_z(v) v^2 \quad (5.27)$$

O integral é a soma, sobre todos os valores v da variável v_z , da respectiva probabilidade $f_z(v)dv$ vezes o valor de $v_z^2 = v^2$; é pois o valor médio de v_z^2 (ver Tabela(5.1)).

$$\text{Pressão} = mn \langle v_z^2 \rangle \quad (5.28)$$

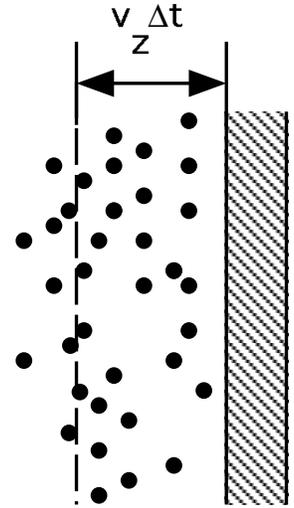


Figura 5.3: as moléculas com $v_z = v$, que colidem com a parede num intervalo Δt têm que estar a uma distância desta inferior a $v\Delta t$.

Como todas as direcções são equivalentes no gás, podemos escrever:

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle \quad (5.29)$$

Chegamos finalmente à equação de Bernoulli

$$P = \frac{1}{3} m n \langle v^2 \rangle \quad (5.30)$$

que relaciona uma propriedade macroscópica gás, a pressão, com propriedades microscópicas do conjunto de partículas que o constituem. Como a energia cinética de uma molécula é $\epsilon_c = mv^2/2$ esta fórmula pode ser reescrita na forma

$$P = \frac{2}{3} n \langle \epsilon_c \rangle \quad (5.31)$$

Interpretação Microscópica de Temperatura

Energia Cinética e Temperatura

A densidade de partículas, n que surge na equação de Bernoulli é $n = N/V$ em que N é o número de partículas e V o volume do gás. Podemos pois reescrever a equação como

$$PV = N \frac{2}{3} \langle \epsilon_c \rangle \quad (5.32)$$

Esta forma sugere uma comparação com a equação dos gases perfeitos, que resume as observações empíricas sobre o comportamento dos gases em gamas importantes de pressão, volume e temperatura:

$$PV = n_{moles} RT \quad (5.33)$$

Como o número de moles é $n_{moles} = N/N_a$ em que N_a é o número de Avogadro, obtemos:

$$PV = N k_B T \quad (5.34)$$

com $k_B \equiv R/N_a$, a constante de Boltzmann (no SI vale $1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$). A comparação destas duas equações sugere uma relação entre a grandeza macroscopicamente observável, temperatura, e a energia cinética média das partículas do gás:

$$\langle \epsilon_c \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (5.35)$$

ou, em termos de velocidade:

$$v_{rms}^2 = \frac{3k_B T}{m}. \quad (5.36)$$

Como exemplo, façamos uma estimativa para o oxigénio (O_2 , molécula com dois átomos de O e massa $m \approx 32$ u.m.a) em condições normais de pressão e temperatura ($P = 1 \text{ atm} = 10^5 \text{ Pa}$, $T = 300 \text{ K}$):

$$\begin{aligned} v_{rms} &= \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3 \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}{32m_p}} \\ &\approx 480 \text{ m s}^{-1} \end{aligned} \quad (5.37)$$

Do ponto de vista da teoria cinética o conceito de temperatura aparece associado à energia cinética das partículas que constituem o gás. Mas é importante salientar que este conceito é autónomo desta interpretação. O aspecto fundamental do conceito de temperatura a nível macroscópico é o de equilíbrio térmico. Dois sistemas em contacto terão, no estado de equilíbrio, a mesma temperatura. Quer isto dizer que dois gases em contacto terão a mesma energia cinética por partícula. Vamos seguidamente analisar uma situação muito particular, um modelo, que evidencia de um modo claro a relação entre o equilíbrio térmico e a energia cinética média. O modelo que vamos apresentar permite-nos deduzir de um modo relativamente simples um resultado que é um exemplo concreto de um teorema muito mais geral. Vai também permitir-nos compreender melhor a noção de calor como transferência de energia.

Equilíbrio entre um gás e um pistão móvel.

Tomemos um gás em contacto com um pistão móvel de massa M . O pistão está associado a uma mola que se contrai até que a força exercida sobre o pistão cancele as forças de pressão do gás. Mas é importante salientar que o pistão não fica em repouso. De cada vez que há uma colisão com uma molécula há uma transferência de quantidade de movimento para o pistão. A sua velocidade segundo z , que designaremos por V_z , é então também uma variável aleatória com uma densidade de probabilidade $g_z(V)$.

Consideremos então uma colisão de uma molécula do gás (massa m) com o pistão. Sejam v_z e V_z as velocidades (componentes z) da molécula e do pistão antes da colisão e v'_z e V'_z os valores correspondentes após a colisão. A conservação da quantidade de movimento implica:

$$mv'_z + MV'_z = mv_z + MV_z. \quad (5.38)$$

Como o pistão só se move segundo z , para as componentes x e y temos apenas:

$$\begin{aligned} mv'_x &= mv_x \\ mv'_y &= mv_y \end{aligned} \quad (5.39)$$

e em consequência a conservação de energia cinética tem a forma:

$$\frac{1}{2}mv_z'^2 + \frac{1}{2}MV_z'^2 = \frac{1}{2}mv_z^2 + \frac{1}{2}MV_z^2 \quad (5.40)$$

O nosso objectivo é exprimir as velocidades após a colisão em termos das velocidades antes. Uma maneira expedita é a seguinte. A eq.(5.40) pode tomar a forma:

$$m(v_z'^2 - v_z^2) = -M(V_z'^2 - V_z^2)$$

ou

$$m(v_z' - v_z)(v_z' + v_z) = -M(V_z' - V_z)(V_z' + V_z). \quad (5.41)$$

A equação da quantidade de movimento (eq.(5.38)) implica $m(v_z' - v_z) = -M(V_z' - V_z)$, pelo que, em conjunto com esta, dá

$$\begin{aligned} m(v_z' - v_z) &= -M(V_z' - V_z) \\ v_z' + v_z &= V_z' + V_z. \end{aligned}$$

Nesta forma não é difícil determinar as velocidades finais em termos das iniciais. Por exemplo, a velocidade do pistão é dada por

$$V_z' = \frac{(1 - m/M)}{(1 + m/M)}V_z + \frac{2m/M}{1 + m/M}v_z \quad (5.42)$$

No lado direito estão as velocidades antes da colisão. Do lado esquerdo, as velocidades depois da colisão. Quadrando a equação obtemos ($\alpha \equiv m/M$):

$$V_z'^2 = \left(\frac{1 - \alpha}{1 + \alpha}\right)^2 V_z^2 + \left(\frac{2\alpha}{1 + \alpha}\right)^2 v_z^2 + \frac{4\alpha(1 - \alpha)}{(1 + \alpha)^2} V_z v_z. \quad (5.43)$$

Em cada colisão os valores iniciais de V_z e v_z são diferentes. Se tomarmos agora o valor médio do lado direito, relativamente às distribuições de velocidade de V_z e v_z , obtemos do lado esquerdo o valor médio de $V_z'^2$, o quadrado da velocidade após uma colisão. O ponto crucial do argumento é este: *numa situação de estacionaridade (equilíbrio) $\langle V_z^2 \rangle$ não varia*, isto é, $\langle V_z'^2 \rangle = \langle V_z^2 \rangle$. Por outro lado vamos admitir, que não há correlação entre v_z e V_z , isto é :

$$\langle v_z V_z \rangle = \langle v_z \rangle \langle V_z \rangle. \quad (5.44)$$

No fundo, estamos apenas a dizer que a densidade de probabilidade de V_z é independente do valor da velocidade da próxima molécula que vai chocar com a parede. Mas no estado de equilíbrio $\langle V_z \rangle = 0$ (note-se que $\langle v_z \rangle$ não é nulo pois trata-se duma média sobre as moléculas que vão chocar com a parede). Então obtemos $\langle v_z \rangle \langle V_z \rangle = 0$ e:

$$\langle V_z'^2 \rangle = \left(\frac{1 - \alpha}{1 + \alpha}\right)^2 \langle V_z^2 \rangle + \frac{4\alpha^2}{(1 + \alpha)^2} \langle v_z^2 \rangle. \quad (5.45)$$

com a condição de estacionaridade:

$$\langle V_z'^2 \rangle = \langle V_z^2 \rangle . \quad (5.46)$$

vem

$$\left(1 - \frac{(1 - \alpha)^2}{(1 + \alpha)^2} \right) \langle V_z^2 \rangle = \frac{4\alpha^2}{(1 + \alpha)^2} \langle v_z^2 \rangle \quad (5.47)$$

que conduz ao resultado:

$$\langle V_z^2 \rangle = \alpha \langle v_z^2 \rangle = \frac{m}{M} \langle v_z^2 \rangle \quad (5.48)$$

Em termos das energias cinéticas do pistão , E_c e partículas do gás, ϵ_c , obtemos como condição de equilíbrio:

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{3} \langle \epsilon_c \rangle \quad (5.49)$$

Antes de prosseguirmos convém referir um ponto. Aplicamos a lei da conservação da quantidade de movimento, que é válida apenas para sistemas isolados sem forças exteriores. Mas, na realidade, a mola que segura o pistão exerce sobre ele uma força. No intervalo de tempo Δt , que dura a colisão, essa força faz variar a quantidade de movimento do pistão de $F\Delta t$. Se o tempo de interação de uma molécula com o pistão for curto podemos, nesse intervalo, considerar o movimento do pistão como livre (aparte a colisão). Entre colisões esta força influenciará o movimento do pistão.

Mais importante que este detalhe é chamar a atenção para o resultado. O “equilíbrio” do pistão é na realidade caracterizado por uma flutuação contínua da sua posição e velocidade. Essa vibração do pistão não é observável macroscopicamente porque a energia cinética média do pistão é da ordem de grandeza da energia cinética média de *uma* molécula do gás (o factor 1/3 resulta da restrição do movimento do pistão a uma direcção apenas). Por exemplo, se $M = 100$ g e $v_{rms} \approx 480$ m s⁻¹ (condições normais de pressão e temperatura de O₂):

$$\begin{aligned} \sqrt{\langle V_z^2 \rangle} &\approx \sqrt{\frac{m \langle v^2 \rangle}{M \cdot 3}} \\ &\approx 0.28 \text{ \AA s}^{-1}!! \end{aligned} \quad (5.50)$$

A velocidade típica do pistão é inferior a um angstrom por segundo! Mas reparemos no que acontece se o pistão separar dois gases. Por um lado, para haver equilíbrio com o gás 1

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{3} \langle \epsilon_c \rangle_1 \quad (5.51)$$

e também com o gás 2

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{3} \langle \epsilon_c \rangle_2 \quad (5.52)$$

o que implica que só há equilíbrio quando as energias cinéticas médias por partícula de cada gás forem iguais!

Suponhamos que inicialmente um dos gases tem uma agitação menor, $\langle \epsilon_c \rangle_1 < \langle \epsilon_c \rangle_2$. As colisões do gás 2 com o pistão vão-lhe comunicar energia enquanto $\langle E_c \rangle < \langle \epsilon_c \rangle_2$. Mas isso significa que a energia média do pistão será superior à das moléculas do gás 1 e estas, nas colisões com o pistão, acabarão por receber energia. É pois através do movimento macroscopicamente imperceptível do pistão que a energia das moléculas de 2 se transfere lentamente para o gás 1. É a esta transferência de energia, não acompanhada de movimentos macroscopicamente detectáveis, que chamamos calor. O calor fluirá através do pistão até que as energias cinéticas médias dos gases – as suas temperaturas – sejam iguais! Esta situação é um pouco irrealista porque o pistão, um objecto macroscópico, foi tratado como um único grau de liberdade (movimento do seu centro de massa). Este resultado é um exemplo de um teorema geral da física estatística clássica (Teorema da Equipartição de energia) que afirma que, em cada grau de liberdade existe, em equilíbrio térmico, uma energia $k_B T/2$ (uma partícula em três dimensões têm três graus de liberdade de movimento de centro de massa).

Leituras Recomendadas

- *Feynman Lectures on Physics*, Feynman Leighton & Sands, vol I, Cap. 39 a 43.
- *Introdução à Física da Matéria*, J. Bessa de Sousa. Estas notas podem ser encontradas na Biblioteca do Departamento de Física da Universidade do Porto.
- *Introdução à Física*, Jorge Dias de Deus, Mário Pimenta, Ana Noronha, Teresa Peña, Pedro Brogueira, McGraw-Hill, cap 6.

Apêndice A

Geometria da Elipse

A soma das distâncias um ponto da elipse a cada um focos, $d + d'$, é constante. A linha que passa pelos dois focos é um eixo de simetria da elipse. O segmento desta linha interior à elipse é o eixo maior e tem comprimento $2a$, em que a é o semi-eixo maior da elipse. O afastamento de cada foco do centro da elipse é naturalmente menor que a e vale ea o que define a excentricidade, e . Para o ponto A , sobre o semi-eixo maior

$$d = (1 - e)a \quad (\text{A.1})$$

$$d' = (1 + e)a \quad (\text{A.2})$$

o que dá, para todos os pontos da elipse, $d + d' = 2a$. Para o ponto B , sobre o semi-eixo menor

$$d = d' = \sqrt{b^2 + (ea)^2} \quad (\text{A.3})$$

ist é, $b^2 + (ea)^2 = a^2$ ou seja

$$b = a\sqrt{1 - e^2} \quad (\text{A.4})$$

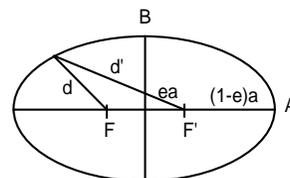


Figura A.1: uma elipse com focos F e F' .

Apêndice B

Área e Produto Vectorial

A área do paralelogramo definido por dois vectores \mathbf{a} e \mathbf{b} é dada por

$$\sigma = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\text{sen}\theta| \quad (\text{B.1})$$

(base = a , altura = $|\mathbf{b}||\text{sen}\theta|$ Mas:

$$|\text{sen}\theta| = \sqrt{1 - \cos^2\theta} = \sqrt{1 - \left(\frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{a}||\mathbf{b}|}\right)^2} \quad (\text{B.2})$$

isto é:

$$\sigma = |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\sqrt{1 - \frac{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2}{|\mathbf{a}|^2|\mathbf{b}|^2}} = \sqrt{|\mathbf{a}|^2|\mathbf{b}|^2 - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2} \quad (\text{B.3})$$

Desenvolvendo em componentes:

$$|\mathbf{a}|^2 = a_x^2 + a_y^2 \quad (\text{B.4})$$

$$|\mathbf{b}|^2 = b_x^2 + b_y^2 \quad (\text{B.5})$$

$$(\text{B.6})$$

obtém-se:

$$\sigma = \sqrt{a_x^2 b_y^2 + a_y^2 b_x^2 - 2a_x b_x a_y b_y} \quad (\text{B.7})$$

$$= \sqrt{(a_x b_y - a_y b_x)^2} \quad (\text{B.8})$$

$$\sigma = |a_x b_y - a_y b_x| \quad (\text{B.9})$$

Apêndice C

Valores Médios

Recordamos a definição de valor médio de uma variável aleatória:

$$\langle \xi \rangle = \sum_{e_i \in U} \xi(e_i) p_i \quad (\text{C.1})$$

expressa como soma sobre todos os acontecimentos do espaço U , ou, alternativamente, em termos da respectiva distribuição de probabilidade

$$\langle \xi \rangle = \sum_{x_\alpha} x_\alpha P_\xi(x_\alpha), \quad (\text{C.2})$$

em que a soma é sobre os valores possíveis da variável. A equivalência é consequência da definição

$$P_\xi(x_\alpha) = \sum_{\{e_i \in U: \xi(e_i) = x_\alpha\}} p_i \quad (\text{C.3})$$

Desta definição decorrem algumas propriedades mais ou menos imediatas.

- Valor médio de uma soma:

$$\langle \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n \rangle = \langle \xi_1 \rangle + \langle \xi_2 \rangle + \dots + \langle \xi_n \rangle \quad (\text{C.4})$$

Este resultado decorre imediatamente da eq.(C1), pois

$$\langle \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n \rangle = \sum_{e_i \in U} (\xi_1(e_i) + \xi_2(e_i) + \dots + \xi_n(e_i)) p_i \quad (\text{C.5})$$

- Valor médio de uma função de ξ :

$$\langle f(\xi) \rangle = \sum_{e_i \in U} f(\xi(e_i)) p_i = \sum_{x_\alpha} f(x_\alpha) P_\xi(x_\alpha) \quad (\text{C.6})$$

A primeira igualdade é aplicação imediata da definição da eq.(C.1). $f(\xi)$ é a variável aleatória definida no mesmo espaço de acontecimentos

que ξ e cujo valor, para um qualquer acontecimento e_i , é $f(\xi(e_i))$. Se nesta soma fizermos primeiro a soma sobre os acontecimentos com $\xi(e_i) = x_\alpha$ e depois somarmos sobre x_α , obtemos a segunda forma (ver eq.(C.3)).

- $\langle \xi^2 \rangle \geq \langle \xi \rangle^2$;
a igualdade só se verifica se ξ for uma constante (um único valor possível). Começemos por mostrar que:

$$\langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2 \quad (\text{C.7})$$

Expandindo o quadrado

$$\begin{aligned} \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle &= \langle \xi^2 - 2\xi \langle \xi \rangle + \langle \xi \rangle^2 \rangle \\ &= \langle \xi^2 \rangle - 2\langle \xi \rangle \langle \xi \rangle + \langle \xi \rangle^2 \\ &= \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2 \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Por outro lado, a variância $\langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle$ é dada por uma soma onde todos os termos são não negativos,

$$\langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \sum_{x_\alpha} (x_\alpha - \langle \xi \rangle)^2 P_\xi(x_\alpha) \quad (\text{C.9})$$

Por isso $\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2 \geq 0$, sendo nula apenas se todos os termos da soma da eq.(C.9) forem nulos. Isso implica que $x_\alpha = \langle \xi \rangle$ ou $P_\xi(x_\alpha) = 0$. Isto é, só há um valor possível para ξ ($P_\xi(x_\alpha) \neq 0$) que é, naturalmente, o seu valor médio.

Bibliografia

- [1] *Introdução à Física da Matéria*, J. Bessa de Sousa.
- [2] F. Quate, *Physics Today*, Agosto 1986 pag. 26
- [3] *Handbook of Physics* , Condon & Odishaw, McGraw-Hill, NY, 1958
- [4] *Science Data Book*, R. M. Tennent (ed) Oliver & Boyd, Edinburgh, 1979
- [5] *From Order to Chaos*, L. P. Kadanoff, World Scientific, Singapore, 1980