

LISTA 1:

1. Baseado em conceitos físicos explique em detalhes a diferença entre uma estrutura sólido amorfa e uma cristalina.

Estrutura sólido amorfa se difere da estrutura cristalina no quesito de ordem espacial (em termos atômicos), na cristalina a ordem é de longo alcance, possuindo uma estrutura atômica bem definida, ao contrário da estrutura amorfa.

2. Baseado em conceitos físicos explique a diferença em detalhes de um material sólido monocristalino e policristalino.

Material monocristalino possui orientações de cristais em uma única direção, já o policristalino é constituído de pequenos monocristais orientados em diversas direções.

3. Explique o conceito de uma rede de Bravais e como pode ser utilizada para descrever um materiais na forma sólidos cristalina.

Uma rede de bravais é uma rede infinita de pontos, em que qualquer ponto da rede possui a mesma visão periférica. Além disso, podem ser definidos vetores primitivos que via combinação linear desses vetores, podemos representar qualquer ponto da rede.

Para que um material na forma sólido cristalina possa ser classificado como uma rede de Bravais é necessário que este material respeite cumulativamente às seguintes condições:

- A estrutura constitui uma célula unitária, sendo assim a menor subdivisão de uma rede cristalina que conserva as características gerais de todo o retículo, permitindo por simples replicação a reconstituição do sólido cristalino completo;(base)
- Planos que contenham pontos situados em faces opostas são paralelos;
- As arestas da célula unitária ligam pontos equivalentes na estrutura.

4. (a) Faça um desenho esquemático da um rede cúbica simples (SC), cúbica de corpo centrado(BCC) e hexagonal.



(b) defina os eixos de orientações. (Tem que desenhar isso nas figuras acima)

$$\bar{x} = (1, 0, 0)$$

$$\bar{y} = (0, 1, 0)$$

$$\bar{z} = (0, 0, 1)$$

No caso da rede hexagonal, podemos representá-la na forma de Miller Bravais, isto é, com 3 eixos $[uvtw]$. Onde u , v e t estão espaçados em 120° e w representa o eixo z .

$$u = \frac{1}{3} \cdot (2x - y)$$

$$v = \frac{1}{3} \cdot (2y - x)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = z$$

c) Escreva os vetores primitivos das redes acima.

Cúbica Simples (SC): (Distância entre primeiros vizinhos = a)

$$\bar{a}_1 = a(1, 0, 0)$$

$$\bar{a}_2 = a(0, 1, 0)$$

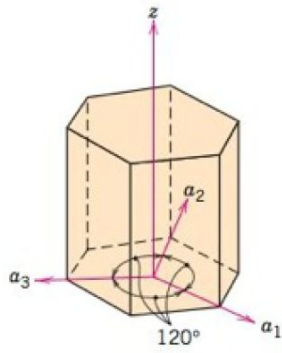
$$\bar{a}_3 = a(0, 0, 1)$$

Cúbica de corpo centrado (BCC): (Distância entre primeiros vizinhos = $\frac{a\sqrt{3}}{2}$)

$$\bar{a}_1 = a(1, 0, 0)$$

$$\bar{a}_2 = a(0, 1, 0)$$

$$\bar{a}_3 = (a/2)(1, 1, 1)$$



Hexagonal :

$$\overline{a_1} = a(1, 0, 0, 0)$$

$$\overline{a_2} = a(0, 1, 0, 0)$$

$$\overline{a_3} = a(0, 0, 1, 0)$$

$$\overline{z} = b(0, 0, 0, 1)$$

(d) Determine o número de coordenação das redes.

Número de coordenação é o número de primeiros vizinhos que cada ponto da rede possui, logo podemos concluir:

Cúbica Simples (SC): número de coordenação = 6

Cúbica de corpo centrado (BCC): número de coordenação = 8

Hexagonal: número de coordenação = 12

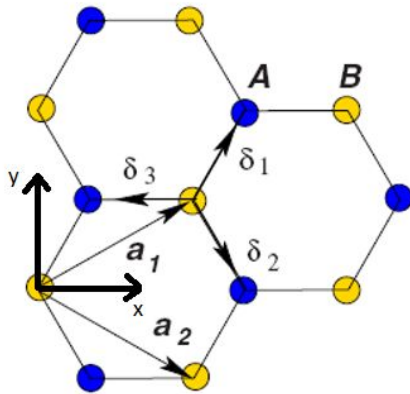
5. Defina o que é uma base numa estrutura cristalina sólida.

Base se constitui de uma célula unitária, sendo assim a menor subdivisão de uma rede cristalina que conserva as características gerais de todo o retículo, permitindo por simples replicação e translação por vetores primitivos a reconstituição do sólido cristalino completo;

A estrutura de um cristal pode ser descrita em termos de uma distribuição de pontos no espaço, a rede, em que cada ponto da rede tem associado um grupo de átomos ou moléculas, a base do cristal.

6. Para uma rede favo de mel (honey-comb) com vetores primitivos $\overline{a_1}$ e $\overline{a_2}$ e com parâmetro de rede a .

(a) Faça um esboço dessa rede e defina os eixos de orientações.

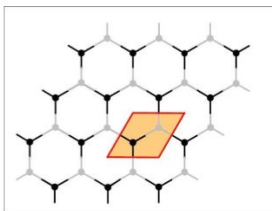


(b) Discuta porque essa rede não é uma rede de Bravais.

Se for considerar cada ponto dessa rede podemos ver que não possui simetria, é possível achar dois pontos dessa rede que não possui os vizinhos nas mesmas direções.

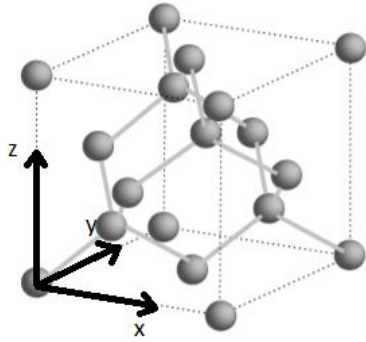
(c) O que é preciso fazer para torná-la rede de bravais.

Para torná-la uma rede de bravais é preciso determinar uma base constituída por exemplo de dois pontos mais próximos, com esses dois pontos eu posso aplicar operações de translação com os novos vetores primitivos e consigo descrever toda a rede.



7. Considere a estrutura cristalina do diamante.

(a) Faça um esboço dessa rede e defina os eixos de orientações.



(b) Escreva os vetores primitivos.

Como a estrutura cristalina é representada por uma rede cúbica de face centrada, podemos escrever os vetores primitivos como:

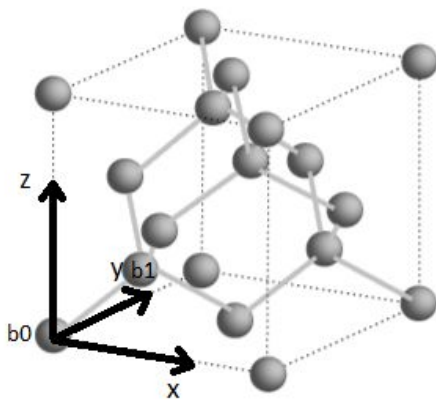
$$\vec{a}_1 = (a/2)(0, 1, 1)$$

$$\vec{a}_2 = (a/2)(1, 0, 1)$$

$$\vec{a}_3 = (a/2)(1, 1, 0)$$

(c) Escreva os vetores da base para essa estrutura cristalina.

Considerando os eixos de orientações de a) e os pontos \vec{b}_0 , \vec{b}_1 , como base da rede:



Teremos então os vetores:

$$\vec{b}_0 = (0, 0, 0)$$

$$\vec{b}_1 = (a/4)(1, 1, 1)$$

(d) Discuta porque essa rede não é uma rede de Bravais.

Uma vez que para diferentes átomos de carbono, há vizinhanças diferentes, ou seja, não há simetria, não se cumpre uma das condições para que seja considerada uma rede de Bravais. Mas se for considerando a base proposta na letra c), podemos construir toda a rede cristalina a partir dos vetores primitivos, possuindo sempre a mesma vizinhança vista de qualquer lugar da rede.

8. Mostre que a célula de Wigner-Seitz para qualquer rede de Bravais em duas dimensões é hexagonal ou retangular.

Para determinar a célula de Wigner-Seitz, adota-se esses procedimentos:

- Unimos com segmentos de retas um ponto da rede aos seus vizinhos mais próximos;
- Traça-se planos perpendiculares nas retas na metade da distância entre o ponto e seu vizinho;
- A região limitada pelos planos é a célula de Wigner-Seitz;

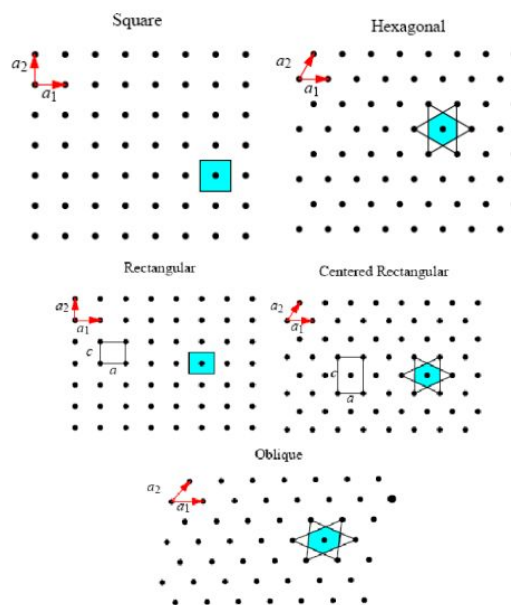
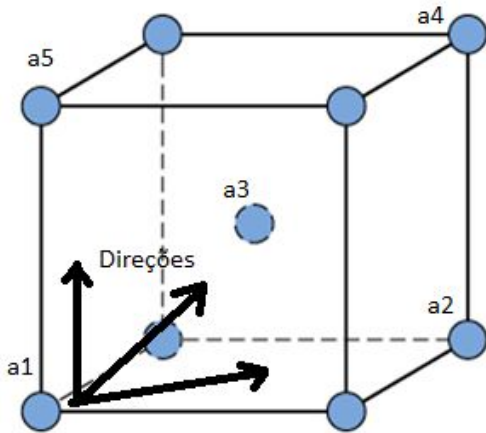


Figure 3: As cinco redes de Bravais bidimensionais. As respectivas partes sombreadas mostram as células primitivas de Wigner-Seitz e suas construções. Extraído da ref. 2.

Únicos casos possíveis são os mostrados acima, logo a célula é hexagonal ou retangular para qualquer rede de Bravais em duas dimensões.

9. Faça um esboço de uma rede cúbica de corpo centrado com parâmetro de rede “a” e determine as coordenadas dos átomos cujos centros são interceptados pelas direções [110], [111] e [001] de uma rede BCC.



Pela imagem podemos concluir, as coordenadas dos átomos cujos centros são interceptados pelas direções são: (Considerando eixos de orientações padrão)

$$\overline{a_1} = (0, 0, 0)$$

$$\overline{a_2} = a(1, 1, 0)$$

$$\overline{a_3} = (a/2)(1, 1, 1)$$

$$\overline{a_4} = a(1, 1, 1)$$

$$\overline{a_5} = (0, 0, 1)$$

10. Faça um esboço dos planos [100], [001], [110] [111] de uma rede cúbica simples com parâmetro de rede “a” e determine suas distâncias interplanares, respectivamente. (Para essa questão usar a fórmula da questão 11)b) Lista1) - Como faz o esboço dos planos se eu só tenho um ponto (isso não são pontos!!!)?

Para o plano [100] (intercepta o eixo x em x=1 e é paralelo aos eixos y e z), teremos:

$$d = a$$

Para o plano [001] (intercepta o eixo z em z=1 e é paralelo aos eixos y e x), teremos:

$$d = a$$

Para o plano [110] (intercepta o eixo x em x=1 e y em y=1 e é paralelo ao eixo z), teremos:

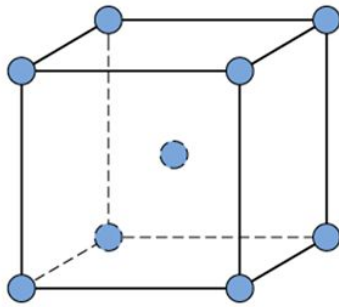
$$d = a / \sqrt{2}$$

Para o plano [111] (intercepta o eixo x em x=1 y em y=1 e z em z=1), teremos:

$$d = a / \sqrt{3}$$

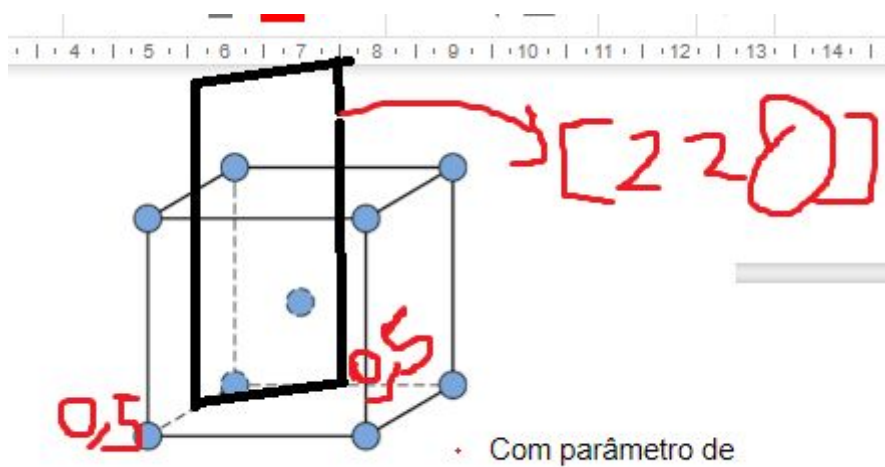
11. Considere a estrutura BCC para o ferro com parâmetro de rede 0,2866 nm.

(a) Faça um esboço dessa estrutura do ferro.



Com parâmetro de rede de 0,2866 nm.

(b) A partir do item anterior, identifique o plano [2 2 0] e determine sua distância interplanar.



A distância interplanar é dada, em um sistema cúbico, por:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Com: a = Parâmetro da rede; h, k, l = coordenadas x, y, z do plano.

Logo d = 0,1013 nm

(c) Supondo uma radiação monocromática de comprimento de onda de 0,1790 nm num experimento de difração de raios-x, determine o ângulo de difração de primeira ordem (n=1) para o plano [2 2 0].

Pela relação abaixo teremos:

$$n\lambda = 2 d_{hkl} \cdot \sin\theta$$

λ É comprimento de onda

N é um número inteiro de ondas

d é a distância interplanar

θ O ângulo de incidência

Obs: ângulo de incidência = ângulo de difração.

Portanto $\theta = 62,07^\circ$

12. A interação de van der Waals é de curto ou longo alcance? Explique. **CONFERIR**

A interação de Van der Waals é atrativa de longo alcance e repulsiva de curto alcance.

Para dois corpos eletricamente neutros e não magnéticos, mantidos a distâncias entre uma e algumas dezenas de nanômetros, predominam estas forças de atração a "grandes" distâncias.

A interação repulsiva de distâncias curtas origina-se no princípio de exclusão de Pauli: dois férmions não podem estar no mesmo estado, isto é, com o mesmo spin, o mesmo momento angular, a mesma componente z do momento angular e a mesma localização espacial

.

13. Explique a principal diferença entre ligações covalentes e metálicas.

Nas ligações covalentes, ocorre o compartilhamento dos elétrons de valência entre dois átomos. A atração, nesse caso, é devida à presença de elétrons entre os átomos, que atraem simultaneamente átomos vizinhos que foram deixados positivos com sua ausência. Nas ligações metálicas, os elétrons da camada de valência estão fracamente ligados ao núcleo. Quando postos juntos, esses átomos liberam seus últimos elétrons, que ficam "passeando" livremente entre eles, formando um "mar de elétrons", o qual tende a manter juntos os íons positivos devido à atração eletrostática.

Na ligação covalente, as configurações eletrônicas estáveis são adquiridas pelo compartilhamento de elétrons entre átomos adjacentes, contribuindo, cada um, com pelo

menos um elétron para a ligação e os elétrons compartilhados podem ser considerados como pertencentes a ambos os átomos. Já na ligação metálica, os materiais metálicos possuem 1, 2 ou 3 elétrons de valência. Esses elétrons de valência não estão ligados a qualquer átomo em particular no sólido e estão mais ou menos livres para circularem ao longo de todo o metal - “mar de elétrons”. Os elétrons livres protegem os núcleos iônicos carregados positivamente das forças eletrostáticas mutuamente repulsivas que os núcleos iriam exercer uns sobre os outros.

LISTA 2:

1. Cite pelo menos dois exemplos de fenômenos físicos que alicerçaram a mecânica quântica.

O espectro de radiação de um corpo negro e o efeito fotoelétrico.

Efeito foto elétrico, (a intensidade do campo E obtido independe da intensidade da luz aplicada $K_{max} = eV_0$, a existência de uma frequência de corte, a não existência de tempo mensurável entre a absorção de um fóton e a emissão de um fóton-elétron)

E a quantização da energia proposta por plank

2. Discuta a Lei de Wien para a radiação térmica do corpo negro.

A lei de Wien é a lei da física que diz que o máximo do espectro de radiação eletromagnética sofre deslocamento para frequências maiores de maneira linear com o aumento da temperatura. Em outras palavras, relaciona o comprimento de onda onde se situa a máxima emissão de radiação eletromagnética, com maior intensidade, de um corpo negro em função de sua temperatura. $\lambda_{max} * T = Constante = 2.9 * 10^{-3} \text{ m.Kelvin}$

3. Explique qual foi a contribuição de Max Planck para o entendimento da radiação térmica do corpo negro?

O espectro de radiação do corpo negro consiste nos comprimentos de onda que esse corpo emite quando está em uma determinada temperatura. Cada temperatura corresponde a um espectro de radiação que possui uma radiação emitida com maior intensidade, no entanto, esse espectro engloba vários comprimentos de onda. Cada frequência emitida contribui na mistura em uma determinada proporção, fornecendo uma determinada parcela de energia à energia total irradiada pelo orifício. Essas proporções podem ser medidas experimentalmente.

No entanto, os cálculos dessa grandeza a partir das teorias clássicas eletromagnetismo, mecânica clássica e estatística fornecem resultados que não condizem com os dados empíricos. Essa discrepância constituiu um problema grave para a física do final do século passado.

Depois de várias tentativas fracassadas de obter os resultados experimentais corretos através de manipulações nas teorias clássicas, Planck percebeu que com a simples introdução da hipótese de que os osciladores eletrônicos, responsáveis pela emissão da radiação eletromagnética (luz), só podem vibrar com determinados valores de energia podia obter previsões teóricas em perfeito acordo com a experiência. A grosso modo, a energia é quantizada e não contínua como se acreditou por muito tempo.

4. Explique qual foi a “falha” da lei de Stefan-Boltzmann e Lei de Wien para explicar a radiação de corpo negro.

Essas leis são baseadas em ideias clássicas, que tinham como raciocínio que o aumento da temperatura iria aumentar a intensidade da radiação emitida. Esse fenômeno é conhecido como a catástrofe do ultravioleta, utilizando apenas conceitos clássicos esses físicos não conseguiram ajustar um modelo teórico aos resultados experimentais. Planck ao postular a discretização da energia obteve sucesso ao descrever o espectro de radiação de um corpo negro.

5. Explique em detalhes o experimento do efeito fotoelétrico.

O efeito fotoelétrico é a emissão de elétrons de uma superfície devido a incidência de luz sobre uma superfície.

A figura 2-1 mostra um aparelho usado para estudar o efeito fotoelétrico. Um invólucro de vidro encerra o aparelho em um ambiente no qual se faz vácuo. Luz monocromática, inci-

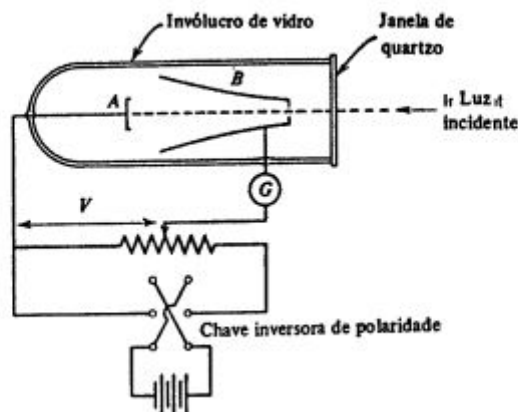


FIGURA 2-1. Aparelho usado para estudar o efeito fotoelétrico. A magnitude da voltagem V pode ser variada continuamente, e seu sinal pode ser trocado pela chave inversora.

dente através de uma janela de quartzo, cai sobre a placa de metal A e libera elétrons, chamados *fotodétons*. Os elétrons podem ser detectados sob a forma de uma corrente se forem atraídos para o coletor metálico B através de uma diferença de potencial V estabelecida entre A e B . O amperímetro G mede essa corrente fotoelétrica.

A curva a na figura 2-2 é um gráfico da corrente fotoelétrica, em um aparelho como o da figura 2-1, em função da diferença de potencial V . Se V é muito grande, a corrente fotoelétrica atinge um certo valor limite (ou de saturação) no qual todos os fotodétons emitidos por A são coletados por B .

Se o sinal de V é invertido, a corrente fotoelétrica não cai imediatamente a zero, o que sugere que os elétrons são emitidos de A com alguma energia cinética. Alguns alcançarão o coletor B apesar do campo elétrico opor-se ao seu movimento. Entretanto, se essa diferença de potencial torna-se suficientemente grande, um valor V_0 chamado *potencial limite* ou *de corte* é

atingido, e a corrente fotoelétrica cai a zero. Essa diferença de potencial V_0 , multiplicada pela carga do elétron, mede a energia cinética K_{\max} do mais rápido fotodéton emitido. Isto é,

$$K_{\max} = eV_0 \quad (2-1)$$

Experimentalmente nota-se que a quantidade K_{\max} é independente da intensidade da luz incidente, como é mostrado na curva b da figura 2-2, na qual a intensidade da luz foi reduzida à metade do valor usado para obter a curva a .

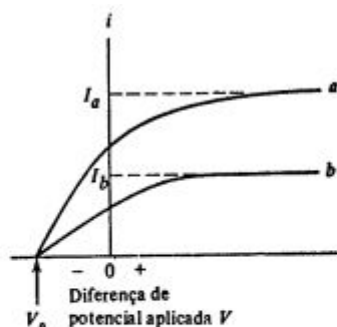


FIGURA 2-2. Gráficos da corrente i em função da voltagem V , de dados obtidos com o aparelho da figura 2-1. A diferença de potencial aplicada V é dita positiva quando o coletor B na figura 2-1 está a um potencial maior que a superfície fotoelétrica A . Na curva b a intensidade da luz incidente foi reduzida à metade daquela da curva a . O potencial limite V_0 é independente da intensidade da luz, mas as correntes de saturação I_a e I_b são diretamente proporcionais a ela.

6. Explique qual foi a contribuição de Einstein para o entendimento desse fenômeno?

Einstein supôs que a energia inicialmente está localizada em um pequeno volume do espaço, fóton, onde a energia deste pacote está relacionada com sua frequência f e a constante de plank.

Em 1905, Einstein propôs a mesma quantização da energia da radiação eletromagnética para explicar o chamado efeito fotoelétrico. Por esse feito, Einstein ganharia o prêmio Nobel em 1921.

Einstein demonstrou que a energia do fotoelétron emitido era função da frequência da radiação eletromagnética incidente e da função trabalho, que depende de cada material utilizado. Matematicamente: $K = h \cdot f - W$, sendo K a energia cinética do fotoelétron, h a constante de plank, f a frequência e W a função trabalho do material, a energia necessária para liberar o fotoelétron.

acho que deveria falar da quantização da energia aqui.

7. A partir da equação fotoelétrica de Einstein, mostre que existe uma relação linear entre potencial de corte (V_0) e frequência da radiação incidente(f).

$$eV_0 = K = hf - w_0 = hf - h\nu_c$$

$$V_0 = h/e (\nu - \nu_c)$$

8. Por que as medidas fotoelétricas são tão sensíveis à natureza da superfície fotoelétrica?

Porque essa natureza estabelece os níveis de energia de excitação dos átomos do material da superfície, que estabelece que frequências de fótons serão capazes de ionizá-los. Diferentes elementos possuem diferentes potenciais de ionização e, portanto, só são capazes de se ionizarem pela absorção de fótons acima de certo limiar de frequência. Abaixo dele os fótons são refletidos ou transmitidos, mas não absorvidos.

LISTA 3:

1. Explique fisicamente a expressão dualidade onda-partícula.

A dualidade onda-partícula é um ponto fundamental na mecânica quântica. A expressão indica que os entes físicos, em dimensões atômicas (elétrons, fótons) ora se comportam como onda e ora como partícula.

A maior importância da dualidade onda partícula é que todo o comportamento de luz e a matéria pode ser explicada através da utilização de uma equação diferencial que representa uma função de onda, geralmente sob a forma da equação de Schrodinger. Esta capacidade de descrever a realidade na forma de ondas é o cerne da mecânica quântica.

2. Descreva a hipótese de de Broglie.

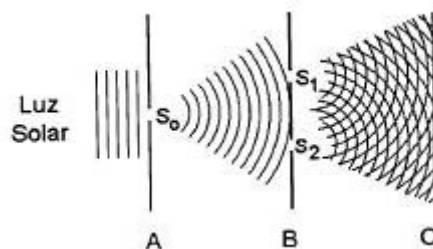
De Broglie propôs a hipótese da onda de matéria, ou seja, ele disse que o elétron pode ter comportamento de partícula e de onda, baseado no conceito já aceito na época de que a radiação eletromagnética tem comportamento tipo partícula. Ele postulou que o elétron é caracterizado por uma frequência ν e comprimento de onda λ , relacionados com a energia e o momentum exatamente do mesmo modo que para fótons.

Energia: $E = h\nu$

Momentum: $p = h/\lambda$

3. Explique o experimento de Young (difração em fenda dupla.)

Uma figura possível que representa a experiência da fenda dupla de Young, a partir da luz solar, encontra-se a seguir. Após o orifício S_0 verificamos o fenômeno da difração. A luz, ao atravessar os orifícios S_1 e S_2 , sofre interferência, podendo ser observadas franjas escuras no anteparo C. Esse experimento comprova que a luz pode se comportar como onda e na época em que foi realizado contribuiu para o ressurgimento da física ótica.

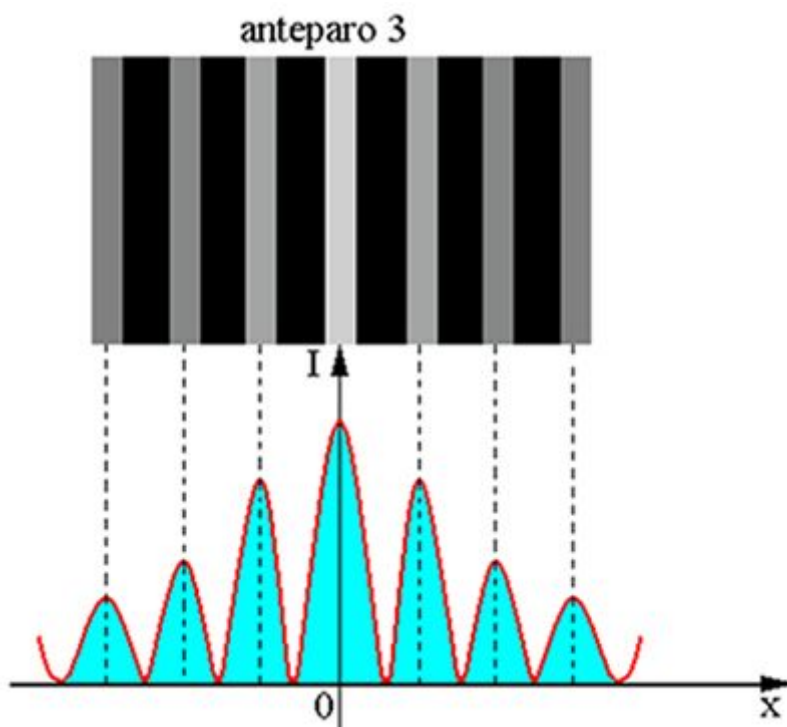


Thomas Young realizou um importante experimento para a teoria ondulatória, no qual foram usados três anteparos. No primeiro, havia um pequeno orifício em que ocorria a primeira difração da luz proveniente de uma fonte monocromática.

O orifício único no primeiro anteparo fazia a luz atingir os orifícios do segundo anteparo em fase, transformando-os em “fontes” coerentes, já que pertenciam a uma mesma fonte original de onda. No segundo anteparo havia dois orifícios colocados lado a lado, nos quais aconteciam novas difrações com a luz já difratada no primeiro orifício.

No último anteparo eram projetadas as manchas de interferência e podiam ser observados **máximos** (regiões mais bem iluminadas) e **mínimos** (regiões mal iluminadas) de intensidade (figura acima). Quando os orifícios eram substituídos por estreitas fendas, essas manchas tornavam-se franjas de interferência, que eram mais bem visualizadas.

Esse experimento permitiu que Young entendesse melhor a difração e a interferência, interpretando a simetria das franjas e a variação da intensidade da luz nelas obtida (figura abaixo).



- as franjas claras correspondem a regiões de interferência construtiva.
- as franjas escuras correspondem a regiões de interferência destrutiva.

4. Descreva o modelo de Niels Bohr.

O modelo atômico de Bohr diz que os elétrons se movem em órbitas fixas, circulares ao redor do núcleo, sob influência de atração coulombiana, obedecendo às leis da mecânica clássica.

Além disso, para Bohr, essas órbitas não podiam assumir qualquer nível de energia, e sim apenas aquelas em que o momento angular do elétron era um múltiplo inteiro de $h/(2\pi)$.

Ao estar em uma dessas órbitas, o elétron está estável e não irradia energia eletromagnética. No entanto, ao mudar de órbita o elétron emite um fóton com energia igual ao gap que sofreu. $E_{\text{inicial}} - E_{\text{final}} = h \cdot f$

5. Escreva e discuta o momento angular no Modelo de Niels Bohr.

Como descrito na questão anterior, para o modelo atômico de Bohr, o momento angular dos elétrons orbitando o núcleo só podiam ser múltiplos inteiros de $h/2\pi$. A fórmula é $L = (n \cdot h) / (2 \cdot \pi)$. Esse postulado do modelo de Bohr nos leva à quantização da energia das órbitas de um átomo: Cada átomo tem órbitas com energias bem definidas e entre órbitas não pode existir um estado com energia intermediária.

6. Explique fisicamente o que foi observado a partir dos experimentos de difração com elétrons.

Foi observado interferências no anteparo comparado ao feixe de elétrons incidente com o filme fino de metal, isto significa que os elétrons incidentes "sentem" a influência tanto dos núcleos atômicos carregados positivamente como dos elétrons ao seu redor. Comprovando um comportamento de onda.(n faço ideia)

Deivison e germer puderam comprovar em 1927 com seus experimentos de difração de elétrons que a hipótese de De Broglie era verdadeira, ou seja, a matéria também se comporta como onda, assim como as ondas eletromagnéticas se comportam como matéria.

7. Escreva a equação de Schroedinger em 3 dimensões e 1 dimensão.

3 dimensões:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + E_p\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Uma dimensão:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

8. Discuta esquematicamente a interpretação probabilística da equação de Schroedinger.

a função de onda de um sistema nada mais é do que uma representação matemática abstrata do estado do sistema.

probabilidade $p(x,t)$ de se encontrar a partícula na posição x , no instante t , poderia ser

obtida a partir da função de onda pela relação: $p(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$, de modo que a probabilidade de encontrarmos a partícula em uma região no instante t é dada por:

$$P[a,b] = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx.$$

9. Escreva a função de onda a partir da separação de variáveis $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \times \Phi(t)$ e $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$ e mostre que o estados de onda equação de Schroedinger independente do tempo e mostre que o estado associado é estacionário.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})\phi(t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\phi(t) = i\hbar\frac{\partial\phi(t)}{\partial t}\psi(\vec{r})$$

10. Escreva a função de onda para uma partícula livre.

Tomando $V = 0$ (condição para uma partícula livre) na equação de Schroedinger de uma dimensão, obtemos a seguinte função de onda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad .$$

A solução desta equação pode ser escrita na forma

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad .$$

11. A partir do item anterior e supondo $V(\sim r) = 0$ encontre a relação de dispersão $E(\sim k)$.

12. Descreva o tunelamento eletrônico e explique a técnica de microscopia de tunelamento (STM).

Efeito túnel ou tunelamento Quando uma onda encontra no seu percurso um obstáculo, a intensidade ou amplitude desta não termina imediatamente no obstáculo, mas decresce exponencialmente após o contato.

O tunelamento eletrônico pode ser entendido como a probabilidade que uma partícula quântica tem de superar uma barreira de potencial maior que a energia que ela possui. Classicamente essa possibilidade não existe, no entanto, na mecânica quântica é possível que isso ocorra, sendo um evento probabilístico.

A técnica de microscopia se baseia nesse princípio do tunelamento do elétron: Uma ponta carregada com elétrons é aproximada da superfície que se quer analisar, ao aproximar, esses elétrons interagem com a superfície e tunelam para ela, como nessa superfície eles estarão em um estado de **menor (acho que seria MAIOR) ((acho que n é maior nem menor rrsrrsrrs))**(entao escreve o certo ai po rrsrrsrrs)(kkkkkkk amo vcs velho) energia, eles tendem a retornar, e aí o equipamento detecta uma variação na sua função de onda, podendo mapear assim a superfície.

13. Discuta a quantização eletrônica de uma partícula num poço de potencial infinito.

Ao contrário do elétron livre, o elétron no poço de potencial infinito não pode ter um valor qualquer de energia. As energias possíveis são dadas por $E = (hk)^2/2m$, ou seja, E só pode assumir valores discretos,

$$E_n = \frac{h^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad (3.44)$$

onde n é chamado um número quântico, pois corresponde a valores quantizados da energia.

Assim,

Partículas cujo movimento é confinado a uma região limitada do espaço só podem ocupar estados (estacionários) de energia discreta, ou seja, têm **energia quantizada**. Matematicamente isto decorre das condições de contorno impostas às funções de onda nos limites da região. Esta é a mesma razão pela qual uma corda presa nas extremidades só pode vibrar em certas frequências discretas. O estado de menor energia é chamado **estado fundamental**.

14. Escreva a expressão para energia do átomo de hidrogênio e discuta os níveis de energia. A partir valor do estado fundamental de energia, explique o que a energia de ionização.

$E_n = -13,6/n^2$ eV, que corresponde às energias quantizadas para cada valor de n , sendo $n=1,2,3,\dots$, ou seja, são os níveis de energia.

Energia de ionização é quando $n=1$, que é a mínima necessária para retirar o elétron totalmente da sua camada.

15. Explique o números quânticos (n, l, m).

Número quântico principal, n . Este é o mesmo n de Bohr. Tem valores $n= 1, 2, 3, 4$, Representa fisicamente o nível (camada) principal em que o elétron se encontra.

O número quântico azimutal ou de momento angular, l . Pode assumir os valores: $l = 0, 1, 2, 3, (n-1)$ Normalmente utilizamos letras para l (s, p, d, f) Representam fisicamente o sub-nível do elétron e sua forma geométrica no espaço. Como o próprio nome indica, o valor de l define o momento angular do elétron, sendo que o aumento do seu valor implica o aumento correspondente do valor do momento angular.

O número quântico magnético, m . Tem os valores: $m = -l, 0, +l$ Representa fisicamente a orientação espacial do orbital do elétron, a quantidade de valores possíveis para l determina o número de orbitais existentes em um sub número de orbitais existentes em um sub -nível l . O número quântico magnético especifica a orientação permitida para uma

nuvem eletrônica no espaço, sendo que o número de orientações permitidas está diretamente relacionado à forma da nuvem (designada pelo valor de l). Dessa forma, este número quântico pode assumir valores inteiros de $-l$, passando por zero, até $+l$.

O número quântico de spin são os autovalores possíveis do operador que indica a orientação da fonte extra de momento angular, sem analogia na mecânica clássica, relativa aos elétrons. Existem apenas dois valores possíveis para este número quântico, $-1/2$ e $+1/2$.