ondas de matéria

- equação de schrödinger

• $-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}}_{\text{operador energia cinética}} + \underbrace{U(x)}_{\text{energia potencial}}\psi(x) = \overbrace{E}^{\text{energia mecânica}}\psi(x) \longrightarrow \underbrace{(K(x)+U(x))\psi(x) = E\psi(x)}_{\text{conservação de energia}}$

• se a energia potencial for zero em toda parte $(U(x)=0) \rightarrow$ $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

• energia infinita → função de onda $=0$] → região proibida

• função de onda $\begin{cases} \text{deve ser contínua no espaço} \\ \text{deve ser zero quando } E=\infty \\ \text{é normalizada} \end{cases}$

- poço de potencial infinito

• $U(x) = \begin{cases} \infty, \text{ para } x<0 \\ 0, \text{ para } 0 \leq x \leq L \\ \infty, \text{ para } x>L \end{cases}$

• no interior da caixa, $\boxed{\psi(x) = A\sin(kx)}$

→ $+B\cos(kx)$, mas $B=0$ pela condição de contorno na borda

→ em $\psi(L)=0 \rightarrow A\sin(kL)=0 \rightarrow$ $\boxed{k_n = \frac{n\pi}{L}}$ e $\boxed{\lambda_n = \frac{2L}{n}}$

• $\psi(x) = \begin{cases} 0, \text{ para } x<0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \text{ para } 0\leq x\leq L \\ 0, \text{ para } x>L \end{cases}$

• número quântico principal → n → condições de fronteira nas funções forçam a existência de soluções que são quantizadas

- energia no poço

• $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\underbrace{a^2}_{a\,=\,L \text{ (largura do poço)}}}n^2$

• estados ligados → estados em que o valor da energia é menor do que a E necessária para escapar do poço

• estado fundamental → o estado de energia mais baixa

• $E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)n^2$ → estado ligado

• $h\overset{\text{frequência}}{\nu} = \Delta E = E_n - E_{n'}$

• absorver fóton → transição para um estado de energia maior

ondas de matéria

- princípio da correspondência

  - probabilidade de detecção da partícula entre x e $x+dx$ → $p(x) = \frac{2}{L} \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$

  - $$\int_{x_1}^{x_2} p(x) = \frac{1}{L}(x_2 - x_1) + \underbrace{\frac{\operatorname{sen}\left(\frac{2n\pi}{L}x_1\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{2n\pi}{L}x_2\right)}{2n\pi}}_{\text{quando } n \to \infty,\ = 0}$$

- partícula em um poço finito

  - as funções de onda não se anulam mais em $X=0$ ou $x=L$

  - $$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

- equação de schrödinger em 3D

  - $$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] + [E - U(x,y,z)]\psi = 0$$

  - caixa retangular → $\psi(x,y,z) = A \operatorname{sen}(k_1 x)\operatorname{sen}(k_2 y)\operatorname{sen}(k_3 z)$

    $k_1 = \frac{n_1\pi}{L_x}$ $k_2 = \frac{n_2\pi}{L_y}$ $k_3 = \frac{n_3\pi}{L_z}$

  - nível de energia → $E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2}\right)$

densidade de probabilidade → $p(x,y) = \frac{P}{A} = \frac{4}{L^2}\operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\operatorname{sen}^2\left(\frac{y\pi}{L}\right)$

ondas de matéria

- linhas espectrais

- sólidos incandescentes e líquidos emitem uma distribuição contínua de comprimento de onda
- curva universal do corpo negro → λ x intensidade → pico se move para $-\lambda$ quando $T+$
- um átomo não só emite luz, como também absorve fótons da mesma energia
- 4 emissões visíveis do átomo de hidrogênio → $\boxed{\lambda = (364{,}56\,nm)\frac{n^2}{n^2-4}}$ sendo $n = \ldots, 3, 4, 5 \ldots$

  ↳ $\boxed{\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right),\ \text{onde } n_1 < n_2}$

- modelo atômico de Bohr

- momento angular L quantizado → $\boxed{L = n\hbar}$
- radiação emitida (fóton) → $f = (E_a - E_b)/h$

  a para b
- força elétrica no elétron → $F = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2}$

  ↳ órbita circular → $F = \frac{mv^2}{r}$ e $v = \frac{n\hbar}{rm}$
- quantização das órbitas → $r_n = \frac{h^2\varepsilon_0}{\pi m e^2} n^2$

  raio **a0**
- $E = \frac{-e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$
- $E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{13{,}6}{n^2}\,eV$
- $f_{n\to n'} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right)$
- $\frac{1}{\lambda_{n\to n'}} = R_H\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, sendo $R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}$

- potencial de coulomb

- $U(\vec{r}) = -\frac{ke^2}{r}$

- Série de Lyman: n1 = 1
- Série de Balmer: n1 = 2
- Série de Paschen: n1 = 3
- Série de Brackett: n1 = 4

ondas de matéria

- equação de Schrödinger para H

  - $-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi$, sendo $\nabla^2 = \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\psi \end{cases}$

  - $-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi(r)) - K\frac{e^2}{r}\psi(r) = E\psi(r)$

- soluções esféricas

  - funções de onda dos menores números quânticos $\begin{cases} \psi_1(r) = A e^{-r/a_0} \\ \psi_2(r) = A_2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0} \\ \psi_3(r) = A_3\left(1 - \frac{2r}{3a_0} - \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)e^{-r/3a_0} \end{cases}$

  - <u>equação de normalização</u> → $\int |\psi_n(r)|^2 d^3r = \int_0^\infty 4\pi r^2 |\psi_n(r)|^2 dr = 1$

- solução completa

  - $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$
    - <u>m</u> → nº quântico magnético → orientação do momento angular orbital ([-l, l])
    - l → nº quântico orbital → módulo do momento angular orbital (s, p, d, f, g) — 0 1 2 3 4
    - n → nº quântico principal → energia

- densidade de probabilidade em todo espaço

  - $\iiint \psi^*(r,\theta,\phi)\,\psi(r,\theta,\phi)\,dV = 1$

- densidade de probabilidade radial

  - $\int_0^\infty P(r)\,dr = 1$, sendo $P(r) = \frac{4}{r_0^3} r^2 e^{-2r/r_0}$