

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

H. Yago
Kelvin M.
Paulo S.

Resumo da Disciplina de Física Quântica

Santo André – SP
2018.3

Resumo em andamento...

Sumário

1	Constantes e Fórmulas frequentes	1
1.1	Tabelas para consulta	1
2	As fórmulas	2
2.1	Radiação de Corpo Negro	2
2.1.1	Lei de Stefan-Boltzman	2
2.1.2	Lei de deslocamento de Wien	2
2.1.3	Lei de Rayleigh-Jeans	2
2.1.4	Lei de Planck	2
2.2	Efeito Fotoelétrico	2
2.2.1	Equação do efeito fotoelétrico	2
2.3	Energia de um fóton	3
2.4	Equação de Compton	3
2.5	Teoria de espalhamento de Rutherford	3
2.6	Rydberg	3
2.6.1	Fórmula de Rydberg-Ritz	3
2.7	Modelo de Bohr	3
2.7.1	Momento angular da n-ésima órbita	3
2.7.2	Raio da n-ésima órbita	4
2.7.3	Energia da n-ésima órbita	4
2.7.4	Elétrons internos em átomos pesados	4
2.8	Relações de De Broglie e consequências	4
2.8.1	Relação de Velocidade	4
2.8.2	Relação de Comprimento de Onda	4
2.9	Indeterminação, Função de Ondas e Normalização	5
2.9.1	Princípios de Indeterminação	5
2.9.2	Princípios de Indeterminação	5
2.9.3	Distribuição de Probabilidade da Função de Onda	5
2.9.4	Condição de normalização	5
3	Contexto Histórico	6
3.1	A descoberta da Estrutura Atômica	6
3.1.1	Thomson e Milikan	6
3.1.2	O átomo de Thomson - Pudim de Ameixas	7
3.1.3	O Experimento de Rutherford	7
3.1.4	O átomo de Rutherford	8
3.1.5	A descoberta do Próton	8
3.1.6	A descoberta do Nêutron	8
3.1.7	Radiações Clássicas	9

3.1.8	Espectro da radiação eletromagnética	9
3.2	O Efeito Compton	11
4	A dualidade Onda-Partícula e a física quântica	15
4.1	A "evolução" da Luz	15
4.1.1	A natureza Corpuscular da Luz: Fótons	15
5	Aplicações da equação de Schrödinger	17
5.1	A equação de Schrödinger	17
5.2	Poço quadrado infinito	19
5.3	Poço quadrado finito	20
5.4	Reflexão e Transmissão de Ondas	23
5.5	Oscilador Harmônico	25
5.6	Método Algébrico: Operador de Escala	26
5.7	Barreira de Potencial e Tunelamento	28
5.7.1	O microscópio de Tunelamento	28
5.7.2	Decaimento alfa	28
5.7.3	Fusão Nuclear	28
5.8	Equação de Schrödinger em 2 e 3 Dimensões	29
6	Os átomos	31
6.1	Radiação do Corpo Negro	31
6.2	Espectros Atômicos	33
6.3	Modelo Atômico de Bohr	33
6.3.1	Energia em uma órbita circular	34
6.3.2	Os postulados de Bohr	35
6.3.3	Níveis de Energia	36
7	Moléculas	37
8	Sólidos	37
9	Relatividade	37
10	Física Nuclear	37
11	Partículas elementares e o começo do universo	37
12	Exercícios resolvidos	38

1 Constantes e Fórmulas frequentes

1.1 Tabelas para consulta

Constantes físicas		
Constante de massa atômica	$m_u = \frac{1}{12}(^{12}\text{C})$	$1\text{ u} = 1,66053873(13) \times 10^{-27}\text{ kg}$
Constante de Avogrado	N_A	$6,02214199(47) \times 10^{23}$ partículas/mol
Constante de Boltzmann	$k = R/N_A$	$1,380658 \times 10^{23}\text{ J/K}$
Magnéton de Bohr	$\mu_B = e\hbar/(2m_e)$	$9,274 \times 10^{-24}\text{ J/T}$
Constante de Coulomb	$k = 1/(4\pi\epsilon_0)$	$8,99 \times 10^9\text{ Nm}^2/\text{C}^2$
Comprimento de onda de Compton	$\lambda_C = h/(m_e c)$	$2,43 \times 10^{-12}\text{ m}$
Carga elementar	e	$1,602177 \times 10^{-19}\text{ C}$
Constante universal dos gases perfeitos	R	$8,3144598\text{ J/Kmol}$
Raio de Bohr	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$	$5,29 \times 10^{-11}\text{ m}$
Constante de Rydberg	$R = m_e e^4 / 64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^3 c$	$1,097 \times 10^7\text{ 1/m}$
Massa do elétron	m_e	$9,10939 \times 10^{-31}\text{ kg}$
Massa do próton	m_p	$1,6726 \times 10^{-27}\text{ kg}$
Massa do nêutron	m_n	$1,6749 \times 10^{-27}\text{ kg}$
Permissividade elétrica do vácuo	ϵ_0	$8,8541878 \times 10^{-12}\text{ F/m}$
Permeabilidade magnética do vácuo	μ_0	$1,2566 \times 10^{-6}\text{ Tm/A}$
Constante de Planck	h	$6,626076 \times 10^{-34}\text{ Js}$
Constante de Planck reduzida	$\hbar = h/2\pi$	$1,05457 \times 10^{-34}\text{ Js}$
Energia de Bohn	$E_0 = m_e e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2$	$2,18 \times 10^{-18}\text{ J}$
Velocidade da Luz no Vácuo	c	$2,9979 \times 10^8\text{ m/s}$
Constante de Stefan	σ	$5,6705 \times 10^{-8}\text{ W/m}^2\text{K}^4$

Derivada e Integrais Definidas ¹

$\frac{d}{dx} \text{sen}(ax) = a \cos(ax)$	$\int_0^\infty e^{-ax} dx = \frac{1}{a}$	$\int_0^\infty x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$
$\frac{d}{dx} \cos(ax) = -a \text{sen}(ax)$	$\int_0^\infty e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_0^\infty x^3 e^{-ax^2} dx = \frac{4}{a^2}$
$\frac{d}{dx} e^{ax} = a e^{ax}$	$\int_0^\infty x e^{-ax^2} dx = \frac{2}{a}$	$\int_0^\infty x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$

¹Nas seis integrais a é uma constante positiva

2 As fórmulas

A maioria das fórmulas aqui inseridas estão presentes na folha de consulta fornecida pelo Professor Dr. Pieter Westera quando ele ministrou Física Quântica em 2016.3.

2.1 Radiação de Corpo Negro

2.1.1 Lei de Stefan-Boltzman

$R = \sigma T^4$, onde:

σ - Constante de Stefan ($\sigma = 5,6705 \times 10^{-8} [W/m^2 K^4]$)

R - Potência irradiada [W/m^2]

T - Temperatura [K]

2.1.2 Lei de deslocamento de Wien

$\lambda_{max} T = 2,898 \cdot 10^{-3} [mK]$, onde:

λ_{max} - Comprimento de onda [m]

T = Temperatura [K]

2.1.3 Lei de Rayleigh-Jeans

$\mu(\lambda) = 8\pi k T \lambda^{-4}$, onde:

λ - Comprimento de onda [m]

T - Temperatura [K]

k - Constante de Boltzmann ($1,380658 \times 10^{-23} J/K$)

2.1.4 Lei de Planck

$\mu(\lambda) = \frac{8\pi h c \lambda^{-5}}{e^{hc/kT\lambda} - 1}$, onde:

λ - Comprimento de onda [m]

T - Temperatura [K]

k - Constante de Boltzmann ($1,380658 \times 10^{-23} J/K$)

h - Constante de Planck ($6,626076 \times 10^{-34} Js$)

c - Velocidade da Luz no Vácuo ($2,9979 \times 10^9 m/s$)

2.2 Efeito Fotoelétrico

2.2.1 Equação do efeito fotoelétrico

$eV_0 = h\nu - \phi$, onde:

V_0 - Potência de Corte

ϕ - Função de Trabalho
 h - Constante de Planck ($6,626076 \times 10^{-34} Js$)
 v - Velocidade [m/s]
 e - Carga do elétron ($1,602177 \times 10^{-19} C$)

2.3 Energia de um fóton

$E = pc$, onde:

p - Módulo do momento linear

c - Velocidade da Luz no Vácuo ($2,9979 \times 10^9 m/s$)

2.4 Equação de Compton

$\lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_c(1 - \cos\theta)$, onde:

λ_c - Comprimento de Onda de Compton ($\lambda_c = h/(m_e c) = 2,43 \times 10^{-12} m$)

λ_2 e λ_1 - Comprimentos de Onda relativos ao elétron e ao fóton

θ - Ângulo entre o fóton e o elétron espalhados

2.5 Teoria de espalhamento de Rutherford

2.6 Rydberg

2.6.1 Fórmula de Rydberg-Ritz

$\frac{1}{\lambda_{mm}} = R(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2})$, onde:

R - Constante de Rydberg para o Hidrogênio ($1,097 \times 10^7 1/m$)

m, n - Valores inteiros pertencentes as séries (sendo $m < n$)

2.7 Modelo de Bohr

2.7.1 Momento angular da n-ésima órbita

$L_n = n\hbar$, onde:

L_n - Momento Angular [J.s]

n - Número quântico principal ($n \in \mathcal{I}$)

\hbar - Constante de Planck reduzida - $\hbar = h/2\pi$ ($1,05457 \times 10^{-34} Js$)

2.7.2 Raio da n-ésima órbita

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0, \text{ onde:}$$

r_n - Raio da órbita [m]

n - Número referente a órbita ($n \in \mathcal{I}$)

Z - Número Atômico do elemento

a_0 - Raio de Bohr ($5,29 \times 10^{-11} m$)

2.7.3 Energia da n-ésima órbita

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_0, \text{ onde:}$$

E_n - Energia de ionização na n-ésima órbita (eV)

Z - Número Atômico do elemento

n - Número referente a órbita ($n \in \mathcal{I}$)

E_0 - Energia de ionização do átomo de hidrogênio (13,6 eV)

2.7.4 Elétrons internos em átomos pesados

$$E_n = -\frac{(Z-b)^2}{n^2} E_0, \text{ onde:}$$

E_n - Energia de ionização na n-ésima órbita (eV)

Z - Número Atômico do elemento

b - Constante referente ao valor de n

n - Número referente a órbita

E_0 - Energia de ionização do átomo de hidrogênio (13,6 eV)

2.8 Relações de De Broglie e consequências

2.8.1 Relação de Velocidade

$$\nu = \frac{E}{h}, \text{ onde:}$$

ν - frequência [$\frac{1}{s}$ ou Hz]

E - Energia total [eV ou J]

h - Constante de Planck ($6,626076 \times 10^{-34} J s$)

2.8.2 Relação de Comprimento de Onda

$$\lambda = \frac{h}{p}, \text{ onde:}$$

λ - Comprimento de Onda [m]

h - Constante de Planck ($6,626076 \times 10^{-34} J s$)

p - Quantidade de movimento da partícula $\frac{kg \cdot m}{s}$

2.9 Indeterminação, Função de Ondas e Normalização

2.9.1 Princípios de Indeterminação

$$\Delta x * \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

- Δx : incerteza da posição
- Δp : incerteza do momento

2.9.2 Princípios de Indeterminação

$$\Delta E * \Delta t \geq \frac{1}{2}\hbar$$

- ΔE : incerteza da Energia
- Δt : incerteza do Tempo

2.9.3 Distribuição de Probabilidade da Função de Onda

$$\Psi(x, t) : P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$$

- $\Psi(x, t)$: função de onda qualquer
- $|\Psi(x, t)|^2$: densidade de probabilidade
- $\Psi(x, t)^*$: função de onda do complexo conjugado ²

2.9.4 Condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t)dx = 1$$

²O complexo conjugado de uma função de onda só é utilizado quando há uma parte complexa, desta forma o termo que acompanha i terá que ser multiplicado pelo mesmo termo mas com o sinal trocado $-i$

3 Contexto Histórico

Este capítulo tem como base o contexto apresentado em Estrutura da Matéria e Fenômenos Eletromagnéticos; se o leitor se sentir confortável e lembrar dos conceitos físicos que são passados nas disciplinas, pular este capítulo não irá prejudicá-lo no desenvolvimento dos assuntos abordados posteriormente.

3.1 A descoberta da Estrutura Atômica

A descoberta da estrutura atômica foi um dos primeiros passos para o estudo da física quântica e uma de suas motivações. Desde os primórdios o homem tentava imaginar qual a menor parte da matéria, daí o nome "Átomo", abaixo segue a explicação de forma superficial de alguns colaboradores e modelos para o descobrimento da estrutura atômica e que serviram de base para o átomo de Bohr (seção 6.3);

3.1.1 Thomson e Milikan

Em 1897, J.J. Thomson observou que os raios emitidos em altas voltagens, os "raios catódicos", são defletidos em campos elétricos e magnéticos. Thomson determinou que a proporção carga-massa de um elétron é $-1,76 \cdot 10^8 C/g$. Em muitos experimentos na época se media q/m . **Objetivo:** encontrar a carga do elétron para determinar sua massa (ou vice-versa). (As medidas de Thomson já indicavam que a massa do elétron era cerca de 2000 vezes menor do que a massa do átomo de H.)

Experiência de Millikan: A carga do elétron - Neste experimento, Millikan conseguiu medir a carga do elétron medindo o efeito de um campo elétrico sobre gotas de óleo carregadas por poucos elétrons. As gotas eram carregadas e descarregadas durante o experimento através de um feixe de raios-X. Desta maneira foi possível carregar as gotas por poucas elétrons. Através da fricção das gotas com o gás na câmara com o campo elétrico desligado, Millikan conseguiu medir os seus diâmetros e as suas massas. Quando a carga das gotas mudava, elas se movimentavam dentro do campo elétrico. A velocidade que a partícula ganha é proporcional a sua carga. E assim:

- Utilizando este experimento, Millikan determinou que a carga do elétron é $-1,602 \cdot 10^{-19} C$.
- Conhecendo a proporção carga-massa, $-1,76 \cdot 10^8 C/g$, Millikan calculou a massa do elétron: $9,10 \cdot 10^{-28} g$.
- Com números mais exatos, concluímos que a massa do elétron é $9,10939 \cdot 10^{-28} g$.

3.1.2 O átomo de Thomson - Pudim de Ameixas

A massa dos átomos era muito maior do que a soma das massas dos seus elétrons.

- Elétrons (cargas negativas),
- Mar de massa e carga positiva ou
- Elétrons em círculos concêntricos.

3.1.3 O Experimento de Rutherford

1908: O inglês Ernest Rutherford analisou a distribuição da carga positiva e da massa dentro dos átomos. Ele observou o espalhamento de partículas α , que basicamente são núcleos de átomos de He (dois prótons e dois nêutrons), pelos átomos de uma folha fina de ouro.

O que se esperava? R: Espalhamento das partículas α por pequenos ângulos.

O que se obteve? R: Espalhamento por ângulos grandes, até $> 90^\circ$.

“Foi o evento mais incrível da minha vida. Foi tão incrível quanto se você disparasse uma bala de canhão em um lenço de papel e ela voltasse para atingir você.” - Rutherford

A Explicação (mais de perto) Toda a massa e carga positiva são concentradas num espaço muito pequeno, o núcleo do átomo.

A nova expectativa: Supondo uma distribuição puntiforme de massa e carga positiva pode se calcular o número de partículas espalhadas em função do ângulo de espalhamento θ , ou seja a distribuição de ângulos de espalhamento:

$$\Delta N = \left(\frac{I_0 A_{ci} n t}{r^2} \right) \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2E_k} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (3.1)$$

O que foi confirmado no experimento. A hipótese do núcleo deu certo, e este é tão pequeno que ele parece puntiforme para as partículas α .

O Tamanho do núcleo:

Quanto maior é a energia cinética (velocidade) das partículas α , tanto mais fundo elas conseguem penetrar no campo elétrico do núcleo, ou seja, tanto mais perto do núcleo elas conseguem chegar. As partículas α que estão indo rumo colisão frontal chegam o mais perto. Elas chegam até a distância r_d do centro do núcleo.

$$r_d = \frac{kq_\alpha Q}{\frac{1}{2}m_\alpha v^2} \quad (3.2)$$

A partir de uma certa velocidade v das partículas α , a distribuição de ângulos de espalhamento começa a desviar da teoria, começando pelos ângulos grandes. Nesta velocidade, as partículas α conseguem chegar até o núcleo e bater nele. O r_d que corresponde a esta velocidade é o **raio do núcleo**. Rutherford encontrou, que o tamanho do núcleo é $\approx 10^{-14}m$, da ordem de cinco ordens de magnitude menor do que o átomo inteiro (“uma mosca no Maracanã”).

3.1.4 O átomo de Rutherford

- Núcleo de carga Ze rodeado por Z elétrons (modelo planetário).
- Z é chamado **número atômico** (H: $Z=1$, He: $Z=2$, etc.). O número atômico determina as propriedades físicas do átomo.
- Quase toda a massa é concentrada no núcleo
- Tamanho do núcleo $\approx 10^{-14}m$.

3.1.5 A descoberta do Próton

Rutherford verificou que um tipo de radiação originária do hidrogênio e descoberta pelo físico alemão Eugen Goldstein em 1886 era composta de partículas carregadas que possuíam a menor carga positiva conhecida até então (a mesma carga que o elétron, mas com sinal positivo, $+e$). A essa partícula deu-se o nome de **próton**. Ele identificou o próton como a partícula carregada que compõe os núcleos dos átomos. A massa do próton foi determinado em $m_p = 1,673 \cdot 10^{-27}kg = 1.007276u$, o que corresponde bem com a massa do átomo de hidrogênio.

3.1.6 A descoberta do Nêutron

No início do XX século inventaram o espectrômetro de massa. Numa câmara de gás do material a estudar, são removidos um ou mais elétrons dos átomos ou moléculas do material, assim criando íons positivos. Estes são acelerados por um campo elétrico e depois defletidos por um campo magnético. O ângulo de deflexão e, assim, a posição onde os íons batem nos detectores, depende da sua razão carga/massa, o que gera um espectro de massas.

Descobriu-se, que a massa de um íon de um átomo com número atômico Z não era simplesmente $Z \cdot m_p$, mas em torno de um múltiplo maior de massas do próton, $A \cdot m_p$, onde $A \geq Z$ é chamado número de massa. As vezes, até íons (átomos) do mesmo elemento têm várias (números de) massas possíveis. Existem outras partículas dentro do núcleo, que têm aproximadamente a mesma massa que o próton, mas não têm carga elétrica.

Estas partículas eletricamente neutras se chamam nêutrons. A massa do nêutron é $m_n = 1,675 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, (massa do próton: $1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$). Átomos com o mesmo número atômico, mas números de massas diferentes, ou seja diferentes números de nêutrons, se chamam de isótopos do elemento. Diferentes isótopos do mesmo elemento têm as mesmas propriedades físicas, mas massas diferentes. Exemplo: existem três isótopos do hidrogênio:

1. hidrogênio comum (símbolo H): núcleo feito de 1 próton $\Rightarrow Z = A = 1$, $m_H \approx 1 \text{ u}$
2. deutério (D): núcleo: 1 próton + 1 nêutron $\Rightarrow Z = 1$, $A = 2$, $m_D \approx 2 \text{ u}$
3. trítio (T): núcleo: 1 próton + 2 nêutrons $\Rightarrow Z = 1$, $A = 3$, $m_T \approx 3 \text{ u}$

3.1.7 Radiações Clássicas

1899-1900: Rutherford e Villard separaram a radiação em 3 tipos, alfa α , beta β e gama γ , além dessas há a eletromagnética:

1. **Raios α** (Os do experimento de Rutherford): Raios energéticos que não penetram muito fundo na matéria, surgem em certos processos de decaimento radioativo. Hoje sabemos que consistem de núcleos de hélio (2 prótons + 2 nêutrons).
2. **Raios β** (Os do experimento de Thomson): Menos energéticos do que os raios α , penetram mais fundo (por exemplo alguns dm no ar, alguns mm no plástico). Se trata de elétrons.
3. **Raios γ** : Penetram mais fundo ainda, são um tipo de radiação eletromagnética muito energética.
4. **Radiação eletromagnética**: Até o começo do século XIX, a maioria dos cientistas acreditava que a luz era um fluxo de partículas emitido por uma fonte luminosa. Com base neste modelo, as partículas de luz estimulavam a visão ao penetrar no olho. O principal idealizador deste modelo corpuscular da luz foi Isaac Newton, sendo que o modelo apresentava uma explicação simples para algumas observações experimentais já conhecidas na época sobre a natureza da luz. Voltaremos a falar da luz no capítulo 4.

3.1.8 Espectro da radiação eletromagnética

Costuma-se classificar a radiação eletromagnética pelo seu comprimento de onda. Quanto maior a frequência / menor o comprimento de onda, tanto mais energética é a radiação.

Aspectos do Espectro eletromagnético

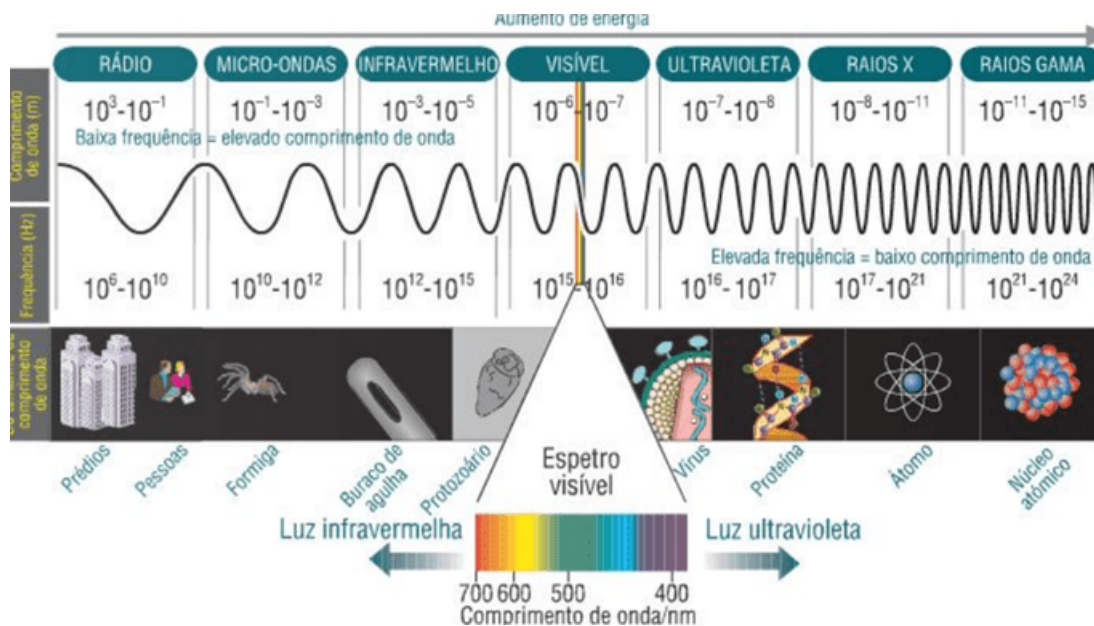


Figura 3.1: Espectro eletromagnético

- Materiais que são opacos para um certo comprimento de onda podem não ser para outro (saco de plástico).
- Materiais que são transparentes no espectro visível podem ser opacos em outra região do espectro (óculos)
- Seres humanos emitem radiação na região do infra-vermelho.

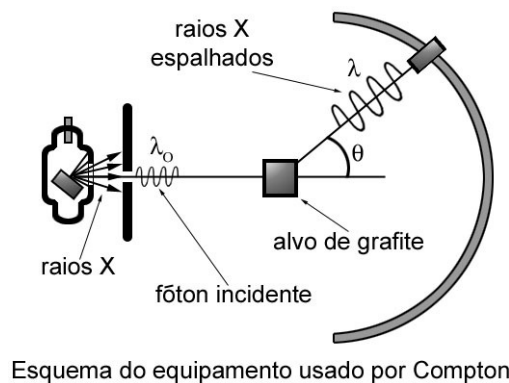
Linhas espectrais

William Hyde Wollaston (1766-1828): Em 1802, observou que passando a luz por uma fenda, e depois por um prisma, apareciam algumas linhas escuras no espectro, que ele interpretou como o limite das cores.

Joseph von Fraunhofer (1787-1826): Até 1826, esse fabricante de instrumentos de vidro, já havia contado 574 linhas escuras no espectro solar, chamadas depois de linhas de Fraunhofer (ou absorção). As Linhas de Fraunhofer é a denominação para certas frequências discretas, a luz do Sol é mais fraca do que em frequências vizinhas, devido à absorção nas camadas exteriores do Sol. Os comprimentos de onda das linhas de absorção trazem informações sobre a composição química da atmosfera do Sol. Cada elemento químico tem o seu próprio espectro de linhas de absorção.

3.2 O Efeito Compton

O estudo deste fenômeno começa com experimento em 1923 realizado pelo físico Arthur Holly Compton (1892 - 1962), tal experimento consiste na emissão de um feixe de raios X em um bloco de carbono e então mediu o ângulo de espalhamento e o comprimento de onda da radiação espalhada pelo carbono. Uma das observações feitas por Compton é a de que: Parte dos raios X passa pelo bloco de carbono sem ser espalhado, mas alguns são espalhados em algumas direções em alguns ângulos. Classificou-se tal fenômeno como a difração. Mas o esperado era algo como a interferência da radiação espalhada pelos átomos das diferentes camadas do carbono (caso consideremos os raios X como ondas), ocorre quando o comprimento de onda da luz incidente é da mesma ordem de tamanho do alvo, neste experimento temos: Raios X: $\lambda \approx 10^{-11}m$ e a estrutura cristalina: $\lambda \approx 10^{-10}m$.



Esquema do equipamento usado por Compton

Figura 3.2: Experimento de Compton

Neste mesmo experimento foi possível constatar mais um fenômeno: Uma relação de inversa proporcionalidade entre os comprimentos de onda dos raios espalhados (que são maiores) enquanto as frequências e energias destes mesmos raios são menores do que do raio incidente (antes de passar pelo carbono). Observou-se ainda que: quanto maior o ângulo de espalhamento, maior é o comprimento de onda e por consequência, menor a frequência. Vale ressaltar que naquela época com todo o conhecimento disponível tal constatação não concordava com princípios de ondas referentes à mecânica clássica, pois segundo a mesma a onda incidente agita o material com a frequência ν , e a radiação emitida teria a mesma frequência. Se tal fenômeno contraria o pensamento relativo à mecânica clássica, mostra-se necessário a elaboração de uma explicação válida. Partiu-se da consideração do espalhamento de duas partículas (como em física mecânica), no qual uma das partículas perde energia cinética (a que está em movimento) e a outra partícula ganha energia (a que estava anteriormente parada). Aplicando esse conceito no fenômeno estudado por Compton percebe-se que: raios X perdem energia para elétrons do material quando são espalhados por estes. Mas tal situação só é possível considerando os raios X como partículas (posteri-

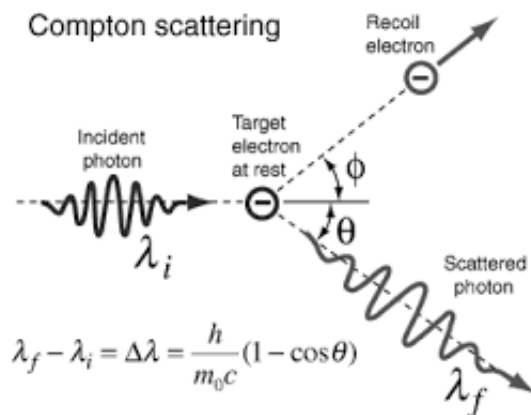


Figura 3.3: Ângulo de choque

ormente descritos como fótons).

Ainda considerando o fenômeno como o espalhamento de duas partículas também é possível verificar a conservação de momento linear, pelas concepções de mecânica clássica temos a transferência de momento linear de uma das partículas para a outra. Também é plausível aplicar este pensamento no experimento de Compton no qual o momento linear é transferido entre fótons e os elétrons do material.

Importante: Todo este experimento e os cálculos desenvolvidos partem do pressuposto que o raio X trata-se de uma partícula com energia cinética $h * \nu$ e momento linear ($E/c = h * \nu/c = h/\lambda$).

Por fim, vale ressaltar que os cálculos envolvendo o Efeito Compton requerem o uso de termos relativísticos uma vez que o elétron emitido atinge velocidades próximas à velocidade da luz. (Vide a dedução da fórmula abaixo)

Agora vamos deduzir a equação de Compton, primeiro assumiremos o momento do fóton junto com sua respectiva energia e a energia do elétron:

Momento do fóton: $p = \frac{h}{\lambda}$ Energia do fóton: $E = pc$

Energia do elétron: $E = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$

Agora vamos definir esse momento e energia em uma colisão conservativa.

No início (fóton):

Momento: $p_{\gamma i} = \frac{h}{\lambda_0}$

Energia: $E_{\gamma i} = p_{\gamma i}c$

No fim (fóton):

Momento: $p_{\gamma f} = \frac{h}{\lambda}$

Energia: $E_{\gamma f} = p_{\gamma f}c$

No início (elétron):

Momento: $p_{ei} = 0$

Energia: $E_{ei} = m_e c^2$

No fim (elétron):

Momento: $p_{ef} = ?$

$$\text{Energia: } E_{ef} = \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2}$$

Conservação de \vec{p} : $\vec{p}_{\gamma i} + 0 = \vec{p}_{\gamma f} + \vec{p}_{ef} \Rightarrow \vec{p}_{ef} = \vec{p}_{\gamma i} - \vec{p}_{\gamma f}$, usando propriedade de vetores podemos fazer: $p_{ef}^2 = p_{\gamma i}^2 + p_{\gamma f}^2 - 2\vec{p}_{\gamma i} \cdot \vec{p}_{\gamma f}$ e assim chegamos em:

$$p_{ef}^2 = p_{\gamma i}^2 + p_{\gamma f}^2 - 2\cos(\theta)p_{\gamma i} \cdot p_{\gamma f} \quad (3.3)$$

em que θ é o ângulo formado entre as partículas após o choque.

Conservação de E:

$$p_{\gamma i}c + m_e c^2 = p_{\gamma f}c + \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_{ef}c)^2}$$

$$\sqrt{m_e^2 c^4 + p_{ef}^2 c^2} = (p_{\gamma i} - p_{\gamma f})c + m_e c^2$$

elevando ambos os lados ao quadrado

$$m_e^2 c^4 + p_{ef}^2 c^2 = (p_{\gamma i} - p_{\gamma f})^2 c^2 + m_e^2 c^4 + 2(p_{\gamma i} - p_{\gamma f})m_e c^3$$

sumindo com os termos em comum e dividindo toda a expressão por c^2 temos:

$$p_{ef}^2 = (p_{\gamma i} - p_{\gamma f})^2 + 2(p_{\gamma i} - p_{\gamma f})m_e c$$

$$p_{ef}^2 = p_{\gamma i}^2 + p_{\gamma f}^2 - 2(p_{\gamma i} \cdot p_{\gamma f}) + 2(p_{\gamma i} - p_{\gamma f})m_e c \quad (3.4)$$

Igualando as equações 3.3 e 3.4 tem-se:

$$p_{\gamma i}^2 + p_{\gamma f}^2 - 2\cos(\theta)p_{\gamma i} \cdot p_{\gamma f} = p_{\gamma i}^2 + p_{\gamma f}^2 - 2(p_{\gamma i} \cdot p_{\gamma f}) + 2(p_{\gamma i} - p_{\gamma f})m_e c$$

sumindo com os termos semelhantes e dividindo tudo por 2 chega-se em:

$$(1 - \cos(\theta))(p_{\gamma i} \cdot p_{\gamma f}) = (p_{\gamma i} - p_{\gamma f})m_e c$$

dividindo esta expressão por

$$\frac{h}{m_e c p_{\gamma i} p_{\gamma f}}$$

Obtém-se:

$$\frac{h(1 - \cos(\theta))(p_{\gamma i} \cdot p_{\gamma f})}{m_e c p_{\gamma i} p_{\gamma f}} = \frac{h(p_{\gamma i} - p_{\gamma f})m_e c}{m_e c p_{\gamma i} p_{\gamma f}}$$

e assim:

$$\frac{h}{m_e c}(1 - \cos(\theta)) = h \frac{(p_{\gamma i} - p_{\gamma f})}{p_{\gamma i} p_{\gamma f}}$$

$$\frac{h}{m_e c}(1 - \cos(\theta)) = h \left(\frac{1}{p_{\gamma f}} - \frac{1}{p_{\gamma i}} \right)$$

e por fim usando a relação do momento do fóton:

$$\lambda - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos(\theta)) \quad (3.5)$$

A equação 3.5 é a equação de Compton em que λ_c é o comprimento de onda de Compton.

4 A dualidade Onda-Partícula e a física quântica

4.1 A "evolução" da Luz

Modelo corpuscular (1672)

Em 1665, Newton demonstrou que a luz branca, como a luz do Sol, ao passar por um prisma se decompõe em luz de diferentes cores, formando um espectro como o arco-íris. Usando a hipótese corpuscular e as leis da mecânica, ele conseguiu explicar:

- A reflexão
- A refração
- A dispersão (a decomposição da luz ao atravessar um prisma) da luz.

Tudo bem, mas houve outros fenômenos da luz que não podiam ser explicados pelo modelo corpuscular, a interferência e a difração.

Modelo ondulatório (1678)

Em 1678, o físico holandês Christiaan Huygens mostrou o modelo ondulatório: A luz como onda. O modelo ondulatório explica corretamente a dispersão, as leis de refração e reflexão, a interferência e a difração, então todas as propriedades da luz e fenômenos óticos conhecidos até então, inclusive aqueles que não podiam ser explicados pelo modelo corpuscular. A luz é uma onda (por enquanto).

A teoria ondulatória clássica da luz chegou ao auge em 1860, quando James Clerk Maxwell publicou a teoria matemática do eletromagnetismo. Esta teoria levava a uma equação de onda que previa a existência de ondas eletromagnéticas que se propagavam com uma velocidade que podia ser calculada pelas leis da eletricidade e do magnetismo. O fato de o resultado ser calculado ser $c \approx 3 \times 10^8 m/s$, igual a velocidade da luz, sugeriu a Maxwell que a luz era uma onda eletromagnética. A vista humana é sensível a ondas eletromagnéticas com comprimentos de onda no intervalo de aproximadamente 400 nm ($1nm = 10^{-9}$) até 700nm. Essa gama de valores corresponde à chamada *luz visível*. Outras ondas eletromagnéticas (por exemplo, micro-ondas, raios X e ondas de rádio e de televisão) só diferem da luz visível pelo comprimento de onda e pela frequência, veja a subseção 3.1.8.

4.1.1 A natureza Corpuscular da Luz: Fótons

A difração da luz e a existência de uma figura de interferência na experiência das duas fendas uma evidência clara das propriedades ondulatórias da luz. Porém, no início do século XX descobriu-se que a energia da luz é trocada em quantidades discretas.

O Efeito fotoelétrico

A natureza quântica da luz e a quantização da energia foram sugeridas por Albert Einstein em 1905, em sua explicação sobre o efeito fotoelétrico. O trabalho de Einstein marcou o início da teoria quântica. Devido a esse importante trabalho, Einstein recebeu o Prêmio Nobel de física. Após uma série de experimentações realizadas chegou-se a um resultado surpreendente, a energia cinética máxima dos elétrons que atingem determinadas placas metálicas é *independente da intensidade* da luz incidente. Essa energia dos elétrons emitidos é a mesma para um determinado comprimento de onda de luz incidente não importando a intensidade da luz. Einstein demonstrou que esse resultado experimental poderia ser explicado se a energia da luz fosse quantizada em pequenos pacotes chamados **fótons**. A energia E de cada fóton é dada por

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda} \quad (4.1)$$

Equação de Einstein para a Energia de um Fóton

onde f é a frequência e h é uma constante conhecida hoje como a **constante de Planck**. O valor numérico dessa constante é

$$h = 6,626 \times 10^{-34} J \cdot s = 4,136 \times 10^{-15} eV \cdot s \quad (4.2)$$

Constante de Planck

No nível fundamental, um feixe de luz consiste em um feixe de partículas – os fótons –, cada qual com a energia hf . A intensidade (potência por unidade de área) do feixe de luz monocromática é o número de fótons por unidade de área e por unidade de tempo vezes a energia de cada fóton. A interação do feixe de luz com a superfície de metal consiste em colisões entre fótons e elétrons. Nessas colisões os fótons desaparecem, cada qual cedendo toda a sua energia a um elétron. Assim, o elétron emitido pela superfície recebe a energia de um único fóton. Se a intensidade da luz for aumentada, mais fótons incidirão sobre a superfície por unidade de tempo, e mais elétrons serão arrancados do metal. Porém, cada fóton ainda terá a mesma energia hf , assim a energia absorvida por cada elétron não se altera.

Se ϕ for a energia mínima necessária para remover um elétron de uma superfície metálica, a energia cinética máxima dos elétrons emitidos é determinada por

$$K_{max} = \left(\frac{1}{2}mv^2 \right)_{max} = hf - \phi \quad (4.3)$$

5 Aplicações da equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger será discutida e aplicada ao problema da partícula em uma caixa e várias outras situações nas quais a partícula está confinada em uma região do espaço.



Figura 5.1: Schrödinger's Cat

5.1 A equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger tem duas vertentes uma para partícula livre e outra para partículas com influência de um potencial U . Vamos agora deduzir de maneira breve as duas equações. Para deduzir as equações temos que ter em mente as fórmulas de Planck e Einstein.

A de Planck em 1900:

$$E = h\nu = h\frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (5.1)$$

A de Einstein da Teoria da Relatividade (1905):

$$p = \frac{E}{c} \quad (5.2)$$

Agora juntando as duas Equações:

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu}{\lambda\nu} = \frac{h}{\frac{2\pi}{K}} = \hbar K \Rightarrow K = \frac{p}{\hbar} \quad (5.3)$$

Onde c é a velocidade da luz, K é o número de ondas e \hbar é a constante de Planck.

Schrödinger em (1926) conseguiu relacionar através desses resultados e dos resultados de uma equação de onda chegar em sua famosa fórmula. De Equações diferenciais podemos chegar que a fórmula para uma onda que depende do tempo pode ser da forma:

$$\Psi(x, t) = Ae^{iKx} \cdot e^{-i\omega t}$$

substituindo ω da equação 5.1 ficamos com:

$$\Psi(x, t) = Ae^{iKx} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (5.4)$$

Derivando a equação 5.4 em relação ao tempo, depois em relação ao espaço duas vezes tem-se respectivamente:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\Psi \Rightarrow E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = iK\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -K^2\Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + K^2\Psi = 0$$

Disto Schrödinger propôs que a fórmula para uma partícula livre pode ser da forma:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + K^2\Psi = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \frac{2m}{2m}\Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 \quad (5.5)$$

Dividindo ambos os lados por $\hbar^2/2m$ e isolando $E\Psi$

$$E\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (5.6)$$

Está última é a **Equação de Schrödinger para uma partícula livre**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Para acharmos a segunda equação de Schrödinger é necessário fazer uma relação entre a mecânica clássica e a óptica caso que foi estudado por Hamilton a relação é:

$$n = \sqrt{1 - \frac{U}{E}} \quad e \quad K = nK_0$$

substituindo essa relação na segunda derivada da equação de onda em função do espaço temos:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + n^2 K_0^2 \Psi = 0 \quad (5.7)$$

fazendo as devidas substituições e multiplicando por $2m/2m$ e depois por $\hbar^2/2m$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left(1 - \frac{U}{E}\right) \frac{p^2}{\hbar^2} \frac{2m}{2m}\Psi = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E\Psi - \frac{U}{E} E\Psi = 0 \quad (5.8)$$

isolando $E\Psi$ e fazendo as devidas simplificações temos:

Equação de Schrödinger sobre influência de um potencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (5.9)$$

5.2 Poço quadrado infinito

Usaremos a Equação de Schrödinger independente do tempo para tratarmos de um assunto muito importante que é o poço quadrado infinito, a análise do comportamento da função de ondas em diferentes níveis dentro deste poço. Lembrando que a Equação independente do tempo é pode ser escrita da forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi = E\Psi$$

Iremos assumir a seguinte condição para $U(x)$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & \text{se não.} \end{cases}$$

IMAGEM DO POÇO 1

Desta forma a EDS³ fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2Em}{\hbar^2} \Psi$$

Assumindo $\frac{2mE}{\hbar^2}$ como k^2 teremos uma solução do tipo $\Psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

em que A e B são condições de contorno, e tanto $\Psi(x)$ quanto $\frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$ devem ser contínuas.

IMAGEM 2

$$\Psi(0) = 0 \Rightarrow \Psi(0) = A\sin(0) + B\cos(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \Rightarrow \Psi(x) = A\sin(kx)$$

$$\Psi(a) = 0 \Rightarrow \Psi(a) = A\sin(ka) = 0$$

A tem que ser diferente de 0 e desta forma $\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi \Rightarrow \Psi(x) = A\sin(kx)$, $K_n = n\pi/a \Rightarrow \Psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \forall n = 1, 2, 3, \dots$

Deixando a energia em função de n tem-se:

$$\frac{2Em}{\hbar^2} = k^2 \Rightarrow E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2 2m}$$

Agora iremos descobrir quem é A e para isto basta usarmos a condição de normalização, então:

$$\int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \Rightarrow A = \sqrt{2/a}$$

Portanto a função de onda em um poço quadrado infinito é da forma:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (5.10)$$

IMAGEM 3

Propriedades:

³Iremos usar essa abreviação para Equação de Schrödinger

1. Alternadamente as funções são "pares" ou "ímpares" em relação ao centro do potencial \Rightarrow Válida para todo $U(x)$ simétrico.
2. Na medida que a energia aumenta, o número de nós também aumenta \leftarrow Caso geral
3. Esses estados são mutuamente ortogonais ou seja:

$$\int \Psi_m(x)^* \Psi_n(x) dx = 0 \quad m \neq n \quad \text{e} \quad \int \Psi_m(x)^* \Psi_n(x) dx = 1 \quad m = n$$

Vamos demonstrar essa Ortogonalidade:

$$\begin{aligned} \int_0^a \Psi_m(x)^* \Psi_n(x) dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{\pi}{a}x(m-n)\right) - \cos\left(\frac{\pi}{a}x(m+n)\right) \right] dx =^4 \\ &= \frac{1}{a} \left[\frac{\sin\left(\frac{\pi}{a}x(m-n)\right)}{\frac{\pi}{a}(m-n)} - \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a}x(m+n)\right)}{\frac{\pi}{a}(m+n)} \right]_0^a \\ &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{\sin(\pi(m-n))}{m-n} - \frac{\sin(\pi(m+n))}{m+n} \right] \end{aligned}$$

como $m \neq n$ os termos zeram, então o resultado é 0. **CQD**

Podemos assumir então que:

$$\int_0^a \Psi_m(x)^* \Psi_n(x) dx = \delta_{mn}^5 \text{ em que:}$$

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n. \end{cases}$$

5.3 Poço quadrado finito

Seguindo a mesma ideia da seção anterior agora iremos analisar o comportamento da função de onda dentro de um poço finito, mas levando em consideração o $U(x)$.

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & -a \leq x \leq a, \\ 0, & \text{se não.} \end{cases}$$

IMAGEM 4

Vamos analisar primeiro quando a energia E é menor que zero ($E < 0$)

Temos que a EDS é da forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi = E\Psi$$

⁴ $2\sin(a)\sin(b) = \cos(a-b) - \cos(a+b)$

⁵ δ_{mn} é conhecido como delta de Kronecher

Vamos então resolver a equação para as três partes do poço.

Quando $x < -a \Rightarrow U(x) = 0$ então segue:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = k^2 \Psi \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$$

Em que $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$

E como $x \rightarrow -\infty$ o termo Ae^{-kx} diverge e não nos interessa logo $\Psi(x) = Be^{kx}$

Quando $-a < x < a \Rightarrow U(x) = -U_0$ então segue:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - U_0 \Psi = E\Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0) \Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -l^2 \Psi$$

Em que $l^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0)$ segue que:

$$\Psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx)$$

Quando $x > a \Rightarrow U(x) = 0$

Semelhante ao primeiro caso, a diferença é que agora $x \rightarrow +\infty$ então teremos $\Psi(x) = Fe^{-kx}$

Como temos três equações para $\Psi(x)$ devemos impor condições de contorno para que estas equações sejam satisfatórias, ou seja, $\Psi(x)$ e $\frac{d\Psi}{dx}$ devem ser contínuos em, $x = -a$ e $x = a$. Sabe-se que o potencial $U(x)$ é uma função par e que $\Psi(x)$ é par ou ímpar.

IMAGEM

Podemos resolver um lado, já que na figura acima é visto uma simetria, então definindo $\Psi(x)$

$$\Psi(x) = \begin{cases} Be^{-kx}, & x < -a, \\ C \sin(lx) + D \cos(lx), & -a < x < a \\ Fe^{-kx}, & x > a. \end{cases}$$

IMAGEM

Resolvendo para o caso em que Ψ é par

$$\Psi(x) = \begin{cases} Fe^{-kx}, & x > a, \\ D \cos(lx), & 0 < x < a \\ \varphi(-x), & x < 0. \end{cases}$$

$\Psi(x = a) \rightarrow$ contínua $Fe^{-ka} = D \cos(la)$ (I)

$\frac{d\Psi}{dx} \rightarrow$ contínua se:

$$\frac{d}{dx} F e^{-kx} = -k F e^{-kx} = \frac{d}{dx} D \cos(lx) = -D l \sin(lx) \quad (\text{II})$$

Dividindo (II) por (I) obtem-se:

$k = l \cdot \text{tg}(la) \Rightarrow \frac{k}{l} = \text{tg}(la)$, então seja $z = la$ e $z_0 = l_0 a$ e desta forma $\text{tg}(z_0) = l/a$ e $z_0/z = l_0/l$ agora guardamos essas relações.

Levando em conta que l depende da Energia como definido um pouco acima temos que:

$l(E) = \sqrt{2m(E + U_0)}/\hbar$ assumindo $E=0$ ficamos com:

$l_0 = \sqrt{2mU_0}/\hbar$. Somando $k^2 + l^2 = -2mE/\hbar^2 + 2m(E + U_0)/\hbar^2 = 2mU_0/\hbar^2 = l_0^2$ e portanto, usando as relações:

$$k^2 + l^2 = l_0^2 \quad \text{e} \quad \frac{k^2}{l^2} + 1 = \frac{l_0^2}{l^2} \Rightarrow \frac{k}{l} = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \Rightarrow \text{tg}(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \quad (5.11)$$

IMAGEM DO GRAFICO DE TG(Z)

Analizando o comportamento gráfico

1) Potencial Largo e Profundo, z_0 muito grande para a muito grande.

IMAGEM

$$z_n \approx n\pi/2 \quad n \text{ é ímpar} \quad l_n \cdot a \approx n\pi/2 \Rightarrow \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} \cdot a = \frac{n\pi}{2} \Rightarrow \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} a^2 = \frac{n^2 \pi^2}{4} \Rightarrow E_n + U_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}$$

está equação se assemelha ao de um poço infinito para uma largura de $2a$.

2) Potencial estreito e superficial, z_0 é pequeno e sempre haverá um Estado ligado.⁶

IMAGEM

Agora a análise para $E > 0$, que é comumente conhecida como estados espalhados, seguindo os mesmo procedimentos da dedução anterior, mas agora levando em consideração que:

- $k^2 = \frac{2Em}{\hbar^2}$
- O único termo que podemos desconsiderar é $G e^{-ikx}$ que ele vai no sentido contrário da Energia

⁶Estado ligado é:

Então vamos analisar a continuidade, igualando os Ψ e suas derivadas; para $x = -a$:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C\text{sen}(la) + D\cos(la) \text{ e } ik[Ae^{-ika} - Be^{ika}] = l[C\cos(la) + D\text{sen}(la)]$$

E para $x = a$

$$C\text{sen}(la) + D\cos(la) = Fe^{ika} \text{ e } l[C\cos(la) - D\text{sen}(la)] = ikFe^{ika}$$

Montando um sistema e resolvendo as 4 equações chega-se em:

$$B = \frac{i\text{sen}(2la)}{2kl}(l^2 - k^2)F \quad \text{e} \quad F = \frac{e^{-2ika}A}{\cos(2la) - i\frac{(k^2 + l^2)}{2kl}\text{sen}(2la)}$$

Então assumindo que o coeficiente de transmissão (T), da partícula é dado pelo os coeficientes de amplitude F que transpassa o poço e A da onda incidente na forma:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad (5.12)$$

E ela implica em

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{U_0^2}{4E(E + U_0)} \cdot \text{sen} \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + U_0)} \right)$$

Essa última nos dá a expressão da amplitude de transmissão.

IMAGEM DA FUNÇÃO DE T x E Pode-se perceber que em determinados momentos a função é igual a 1, isso só é possível quando o seno se iguala a 0 e isso implica que:

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + U_0)} = n\pi \Rightarrow E + U_0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2}$$

Similar ao resultado obtido para $E < 0$.

5.4 Reflexão e Transmissão de Ondas

Nota: Talvez na sessão anterior não tenha ficado claro o motivo de termos utilizado a fórmula da Transmissão de onda, até mesmo porque foi a primeira vez que ela tenha sido citada. Esta sessão tentará abordar de maneira breve e mais textual a definição tanto de reflexão quanto a de transmissão de ondas, não podemos, é claro, deixar a resolução e utilização de fórmulas de lado, mas pretendemos não apresentar um formalismo excessivo de conceitos matemáticos. Deixando claro que neste texto os coeficientes mostrados seguem similarmente com efeitos ópticos, já o citado na sessão anterior vem de uma abordagem sobre efeitos de tunelamento, que serão abordados posteriormente na sessão 5.7. Todavia será até meio que repetitivo determinadas soluções e passagens, esperamos que o leitor não se importe com estas e que desta forma fixe melhor a ideia do tema.

Um problema interessante é, ver como partículas em estado livre (elas podem “escapar” para o “infinito”: $E > U(x)$ para $x \rightarrow \infty$ ou $-\infty$ se comportam diante de um “obstáculo”. A partícula livre é deste tipo, com “obstáculo zero”. A energia não é quantizada e a função

de onda não cai exponencialmente e portanto, não é normalizável. Dá para torná-la normalizável fazendo um pacote de ondas (caso realista para partículas individuais), mas aqui faremos outra coisa: Interpretamos a função de onda como representação de um feixe de partículas, e normalizamos pela densidade de partículas ρ .

Para um caso quântico em que $E < U_0$ e $x < 0$ ou seja uma partícula livre, a função de onda pode ser denotada como:

IMAGEEM

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

na qual $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $|A|^2 = \rho$. A parte com o coeficiente A é a do feixe incidido e a do coeficiente B é da feixe refletido, assumindo agora $x > 0$ para uma equação da mesma forma temos:

$$\Psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

em que $k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$ e devemos desconsiderar o termo com coeficiente D, já que este faria com que a onda crescesse infinitamente. Desta maneira temos que ajustar valores para que $\Psi_1(x=0) = \Psi_2(x=0)$ e a derivada de ambos também sejam iguais.

Um pequeno comentário: Se $E < U_0$ ocorre reflexão total do feixe, igual ao caso clássico, resultando em uma onda estacionária em $x < 0$, mas ao contrário do caso clássica, a onda de partículas penetra um pouco na região "proibida". Parecido com a reflexão total de ondas eletromagnéticas (luz) na superfície entre dois meios com índices de refração diferentes (ótica). Neste caso, a onda que penetra um pouco no meio "proibido" é chamada onda evanescente.

Então já que $\Psi_1(x=0) = \Psi_2(x=0)$ então $A+B=C$ e das derivadas $k_1A - k_1B = k_2C$ então

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \cdot A$$

e

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \cdot A$$

Como a reflexão da óptica nos dá que uma relação de fluxo incidente com fluxo refletido, na forma:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[\frac{(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} \right]^2 \quad (5.13)$$

Já o coeficiente de transmissão seria a relação do fluxo transmitido com o fluxo refletido, na forma:

$$T = \frac{k_2|C|^2}{k_1|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (5.14)$$

5.5 Oscilador Harmônico

Lembrando a EDS:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi = E\Psi$$

Da Mecânica Clássica temos:

$$F = -kX = m \frac{d^2 x}{dt^2}$$

Em que

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow k = m\omega^2$$

FIGURA DO DESLOCAMENTO DE BLOCO

Para o potencial temos:

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Para podermos supor possíveis soluções usaremos a série de Taylor:

$$U(x) = U(x_0) + U'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} U''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

onde lê-se para todas as suas derivadas. $U(x_0) = 0$

FIGURA DO POTENCIAL GENÉRICO $U(X)$ E DE $U(X_0) = 0$

Sabendo-se da condição para $U(x_0) = U'(x_0) = 0$ podemos assumir:

$$U''(x_0) = k \Rightarrow V(x) = \frac{1}{2} V''(x_0) x^2$$

Logo, a EDS fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Psi = E\Psi$$

Usaremos apenas o método de escadas para resolver.

5.6 Método Algébrico: Operador de Escala

Tendo $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow p^2 = -i\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ então:

$$\frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2] \Psi = E\Psi$$

Definindo H (Hamiltoniano) $= \frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2]$

E $p^2 = v^2$ e $(m\omega x)^2 = u^2$ se fossem números $u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$, supondo:

$$a^- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(ip + m\omega x) \quad \text{e} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x)$$

$$a^- . a^+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} (ip + m\omega x)(-ip + m\omega x) = \frac{1}{2\hbar m\omega} (p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px))$$

$xp - px$ ⁷ são comutadores:

$$a^- . a^+ = \frac{1}{2m} \frac{1}{\hbar\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{1}{2m} \frac{1}{\hbar\omega} im\omega[x, p] = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{i}{2\hbar} [x, p]$$

Mas quem é $[x, p]$ afinal? Vamos supor que uma determinada função multiplique o termo e lembrando quem é p temos:

$$(xp - px)f = -i\hbar \left(x \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(xf) \right) = -i\hbar \left(x \frac{\partial f}{\partial x} - f - x \frac{\partial f}{\partial x} \right) = i\hbar f \Rightarrow [x, p] = i\hbar$$

Disso tiramos:

$$a^- . a^+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad a^+ . a^- = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$[a^-, a^+] = 1 \Rightarrow H = \hbar\omega[a^- a^+ - \frac{1}{2}] \quad \text{e} \quad H = \hbar\omega[a^+ a^- + \frac{1}{2}]$$

Tanto a^- quanto a^+ são valores que podem variar como descer ou subir uma escada, com o a^- podemos variar até um valor que nos de a Energia mínima para nossa EDS. Desta forma aplicando $a^- \Psi_0$ podemos chegar na energia mínima que é zero então descobrimos quem é Ψ_0 lembrando quem é a^- temos:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x} + m\omega x \right) \Psi_0 = 0 \Rightarrow \hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi_0 = -m\omega x \Psi_0 \Rightarrow$$

$$\frac{\partial \Psi_0}{\Psi_0} = -\frac{m\omega x}{\hbar} dx \Rightarrow \int \frac{\partial \Psi_0}{\Psi_0} = \int -\frac{m\omega x}{\hbar} dx$$

$$\ln \Psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + A \Rightarrow \Psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

⁷ $xp - px = [x, p]$

Para descobrir quem é A_0 basta fazermos a normalização e com isso chega-se em:

$$\Psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (5.15)$$

Para o n -ésimo estado tem-se como solução geral:

$$\Psi_n(x) = A_n (a^+)^n \Psi_0 \quad (5.16)$$

Com energia igual a

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar\omega$$

outra maneira de representar a equação geral já com o coeficiente explicito é:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \Psi_0 \quad (5.17)$$

5.7 Barreira de Potencial e Tunelamento

A ideia de barreira de potencial foi dada em subseções anteriores de forma matemática, quando mostramos o comportamento de uma partícula em um determinado poço dividido em três sessões e sofrendo a ação de um potencial, chegando a um determinado coeficiente de Transmissão dado por:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Em que no caso de F diferente de 0 parte das partículas passam pela barreira do poço, no qual esse fenômeno é chamado de **Efeito Túnel** ou **Tunelamento**. Segue abaixo aplicações desse efeito.

5.7.1 O microscópio de Tunelamento

Uma agulha escaneia a superfície a ser examinada, movimentado por elementos piezoelétricos. Entre agulha e amostra é aplicada uma diferença de potencial, classicamente impassável pelos elétrons da agulha. Mas alguns passam pelo efeito túnel e constituem uma corrente que é medida. Já que a probabilidade de um elétron pular da agulha pra amostra é proporcional a $e^{-2\alpha a}$ (depende fortemente de a), a corrente também é.

- medida muito precisa de a
- resolução espacial do tamanho de um átomo!

IMAGEM

5.7.2 Decaimento alfa

Partículas α , $2p + 2n$ (vide experimento de Rutherford) são sub-entidades especialmente estáveis de núcleos atômicos. No decaimento α , os núcleos emitem estas partículas, assim ficando com 2 prótons e 2 nêutrons a menos.

Normalmente, as partículas α ficam presas no poço de potencial gerado pela força nuclear forte, que tem um alcance da ordem de $1fm = 10^{-15}m$, que pode ser considerado o raio do núcleo, R , viajando ido e volta pelo núcleo. Mas às vezes uma partícula α “tunela” até onde a repulsão de Coulomb devida ao resto do núcleo consegue ejetá-la, r_1 . IMAGEM

5.7.3 Fusão Nuclear

O mesmo potencial aparece na fusão nuclear, só que, neste caso, os núcleos que fazem a fusão vão ao encontro, sendo jogados um contra o outro com energia cinética que depende da temperatura $E = 3/2k_B.T$

Para que, classicamente, a fusão possa acontecer esta energia tem que superar a repulsão de Coulomb até onde a força forte toma conta: $3/2k_B.T \leq Z_1Z_2e^2/4\pi\epsilon_0R$ onde Z_1Z_2 são os números atômicos dos núcleos fusionando.

Para o principal processo de fusão nuclear que acontece no interior do Sol, a fusão de 4 núcleos de hidrogênio para 1 núcleo de hélio, processo que gera a energia que faz o Sol irradiar, a temperatura no seu interior teria que ser $\approx 10^{10}K$, bem mais que ela é, $\approx 1.6.10^7K$. A fusão acontece por que, às vezes, os núcleos passam a barreira de Coulomb com energia cinética bem mais baixa que $Z_1Z_2e^2/4\pi\epsilon_0R$, graças ao efeito túnel.

5.8 Equação de Schrödinger em 2 e 3 Dimensões

A Equação de Schrödinger em duas ou três dimensões segue de maneira análoga todas as ideias do caso unidimensional, a maior e evidente diferença é o fato de agora além de trabalharmos com a coordenada x , podemos ter as coordenadas y e z . No caso um problema bidimensional em que tem-se $U(x,y)$ o elétron tem dois graus de liberdade e se move em uma superfície. E a EDS correspondente é da forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right] + U(x,y)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (5.18)$$

Equação de Schrödinger em duas dimensões e dependente do tempo

Similarmente tem-se para três dimensões

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + U(x,y,z)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (5.19)$$

É importante considerarmos uma simbologia de FVV que é o operador Laplaciano ∇^2 que representa em \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3 respectivamente:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \\ \nabla^2 &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \end{aligned}$$

Desta maneira podemos representar a EDS bidimensional independente do tempo na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi \quad (5.20)$$

Na qual $\Psi(x,y)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ é uma solução. Como dito anteriormente as técnicas para resolução são as mesmas para o caso unidimensional, devemos achar equações que satisfaçam a EDS, achar coeficientes de normalização e a energia que também correspondente a EDS.

Problema da caixa rígida bidimensional

IMAGEM

A partícula é livre dentro do quadrado, então $U(x,y)$ é definido por:

$$U(x,y) = \begin{cases} 0, & x \in (0,a) \quad \text{e} \quad y \in (0,a), \\ \infty, & \text{se não} \end{cases}$$

Vamos buscar equações que solucionam a nossa função, usando a técnica de *soluções separáveis*.⁸ Relembrando as condições de contorno, a função deve ser igual a 0 na fronteira do quadrado, deve ser contínua e ter derivada. Do lado de fora também deve ser 0. Ou seja:

$$\Psi(x=0) = \Psi(x=a) = \Psi(y=0) = \Psi(y=a) = 0$$

Então supondo um $\Psi = XY$ em que X e Y são funções desconhecidas mas que dependam de x e y fazemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} XY + \frac{\partial^2}{\partial y^2} XY \right] = EXY \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} [\ddot{X}Y + X\ddot{Y}] = EXY \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\ddot{X}}{X} + \frac{\ddot{Y}}{Y} \right] = E$$

Disto podemos tirar que o termo entre colchetes deve ser negativo e como E é uma função constante logo a soma também é entre funções constantes;⁹ vamos assumir então:

$$\frac{\ddot{X}}{X} = -k_x^2 \quad \text{e} \quad \frac{\ddot{Y}}{Y} = -k_y^2$$

Resolvendo essas suposições chegamos em:

$$X(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x) \quad \text{e} \quad Y(y) = C \sin(k_y y) + D \cos(k_y y)$$

Obedecendo as soluções de contorno teremos as seguintes implicações:

$$\Psi(x=0) = X(x=0)Y(y) = 0 \Rightarrow X(x=0) = B = 0 \Rightarrow X(x) = A \sin(k_x x)$$

$$\Psi(x=a) = X(x=a)Y(y) = 0 \Rightarrow k_x a = n_x \pi \Rightarrow k_x = \frac{n_x \pi}{a}$$

O similar acontece para $Y(y)$ então a forma geral da função é:

$$\Psi(x,y) = A \sin k_x x \sin k_y y \tag{5.21}$$

E a energia será:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \Rightarrow E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) \tag{5.22}$$

Similar ao caso unidimensional como tinha-mos dito.

Nota: Resolvendo com os mesmo procedimentos para o caso de três dimensões chegamos também em funções similares.

⁸Solução separável são escritas da forma $\Psi(x,y) = X(x)Y(y)$

⁹ $f(x)+g(y)=C$

6 Os átomos

O estudo dos átomos será iniciado com a discussão do modelo de Bohr, um modelo semiclássico proposto por Niels Bohr, em 1913, para explicar o espectro das radiações emitidas por átomos de hidrogênio. Embora esse modelo anterior à *mecânica quântica* apresente muitas imperfeições, constitui um ponto de partida razoável para a discussão dos fenômenos atômicos. Por exemplo, sabe-se agora que os elétrons não giram em torno do núcleo em órbitas bem definidas, como no modelo de Bohr, mas em um movimento descrito por uma função de onda que satisfaz a equação de Schrödinger. Contudo, as distribuições de probabilidade calculadas a partir da teoria quântica realmente apresentam máximos nas posições das órbitas de Bohr.

Para entendermos o Átomo de Bohr será preciso relembrar o átomo de Rutheford (subseções 3.1.3 e 3.1.4) no qual a teoria será derrubada e aprendermos ou relembrarmos os conceitos de radiação do corpo negro (seção 6.1) e de espectros atômicos (seção 6.2).

6.1 Radiação do Corpo Negro

Toda matéria emite radiação eletromagnética. A faixa espectral da maior intensidade desta radiação depende da temperatura. Exemplos: seres humanos irradiam predominantemente no infravermelho, o Sol no ótico. Na física, um corpo negro é um corpo que absorve toda a radiação que nele incide: nenhuma luz o atravessa nem é refletida. Ele emite radiação térmica pura (ele não é negro!). Na prática, uma cavidade com uma pequena abertura na parede é uma boa aproximação para um corpo negro. Observa-se, que os espectros de corpos negros têm formas típicas.

Em 1879, Stefan descobriu, que a potência por área de superfície de qualquer corpo depende apenas da sua temperatura:

$$P = \sigma T^4 \quad (6.1)$$

onde σ é igual a $5,67 \cdot 10^{-8} \text{W/m}^2 \text{K}^4$. Em 1884, Boltzmann forneceu uma explicação teórica para esta lei, que passou a ser chamada Lei de Stefan-Boltzmann. Em 1893, Wien mostrou que o comprimento de onda do pico do espectro de um corpo negro é inversamente proporcional a sua temperatura, Lei de deslocamento de Wien:

$$\lambda_{max} = \frac{cte}{T} \quad (6.2)$$

em que cte é uma constante que equivale a $2,89 \cdot 10^{-3} \text{m.K}$. Quanto maior a temperatura, tanto mais intensa e energética é a radiação térmica.

1900 Rayleigh e Jeans

Desenvolveram uma teoria para prever o espectro do corpo negro $P(\lambda)$. Cabem mais ondas com curtos λ no corpo negro do que ondas com λ compridos. $P(\lambda)$ tem que aumentar, quando λ diminui. Obtém-se a Lei de Rayleigh-Jeans:

$$P(\lambda) \sim \frac{1}{\lambda^4} \quad (6.3)$$

Com isso puderam mostrar que o número de formas de uma onda eletromagnética numa cavidade é proporcional a frequência ao quadrado.

$$\frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad (6.4)$$

E ainda para grandes valores de λ , a lei prevê bem o espectro do corpo negro. Porém para $\lambda \rightarrow 0$, $P(\lambda)$ tende a infinito, e a potência total vira:

$$\int_0^\infty P(\lambda)d\lambda = \infty$$

Este resultado foi chamada de **catástrofe do ultravioleta** e estava em conflito com as observações.

1900 Planck

Hipótese: Quantização da energia dos átomos na parede: Planck sugeriu, que as ondas são emitidas por osciladores harmônicos (os átomos) nas paredes do corpo negro, e que as energias destes osciladores só podem assumir certos valores discretos $E_n = n\epsilon = nhf$, onde f é a frequência, $n = 1, 2, 3, \dots$ um número quântico e $h = 6,626 \cdot 10^{-34} J.s$ = constante de Planck.

Quando uma grandeza física só pode assumir certos valores discretos, se diz que ela é quantizada. Uma quantidade elementar de uma grandeza quantizada se chama um quantum (plural: quanta) da grandeza (neste caso ϵ). Já conhecemos outras grandezas quantizadas: A matéria (quantum: 1 átomo) e a carga elétrica (quantum: 1 carga elementar e).

Em um conjunto de objetos com energias quantizadas, os números de objetos por valor de energia segue a função de distribuição de Boltzmann:

$$f(E) = A.e^{-\frac{E}{kT}}$$

No caso do corpo negro: Tem muito menos átomos com energias altas (os que emitem radiação com curtos λ) do que átomos com energias baixas, o que evita a catástrofe do ultravioleta. Usando esta hipótese, Planck recalculou o espectro teórico do corpo negro em função da sua temperatura, chegando no que chamamos de **Lei de Planck**:

$$P_\lambda = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1)} \quad (6.5)$$

A hipótese de átomos com energias quantizadas consegue explicar os espectros dos corpos negros.

6.2 Espectros Atômicos

O estudo de átomos e moléculas muitas vezes é feito através da análise da radiação emitida ou absorvida pelos átomos (espectroscopia).

Emissão atômica: O espectro atômico é característico dos átomos envolvidos. Dessa forma, é razoável suspeitar que o espectro atômico depende da distribuição eletrônica do átomo. Cientistas buscavam encontrar um padrão nos comprimentos de onda (ou frequências) das linhas atômicas no espectro do hidrogênio.

Balmer (1885): Mostrou que a frequência da radiação emitida pelo átomo de hidrogênio na região do visível / ultravioleta, próximo depende de $1/n^2$.

Séries de Lyman (1906) e Paschen (1908): Entretanto, existem outras linhas no espectro do átomo de hidrogênio em outras regiões (Ultravioleta e Infravermelho).

Johannes Rydberg (1888): Generalizou a fórmula de Balmer para levar em consideração todas as linhas observadas no espectro do hidrogênio pelos outros pesquisadores.

$$\frac{1}{\lambda_{vac}} = R_H \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (6.6)$$

onde $n_1 > n_2$ e $R_H = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1}$ **Constante de Rydberg**

Nome	n_1	n_2	Região do Espectro
Lyman	1	2,3,4, ...	Ultravioleta
Balmer	2	3,4,5, ...	Visível
Paschen	3	4,5,6, ...	Infravermelho
Bracket	4	5,6,7, ...	Infravermelho
Pfund	5	6,7,8, ...	Infravermelho
Humphreys	6	7,8,9, ...	Infravermelho

Tabela 6.1: Níveis do Espectro

6.3 Modelo Atômico de Bohr

Niels Bohr, enquanto trabalhava no laboratório de Rutheford em 1912, propôs um modelo do átomo de hidrogênio que levava em conta o trabalho de Planck, Einstein e Rutheford e que previa com sucesso os espectros observados. Este modelo se baseia na atração de Coulomb para o elétron, respeitando a mecânica clássica as órbitas seriam em formato circular ou elíptico, Bohr optou por um modelo circular.

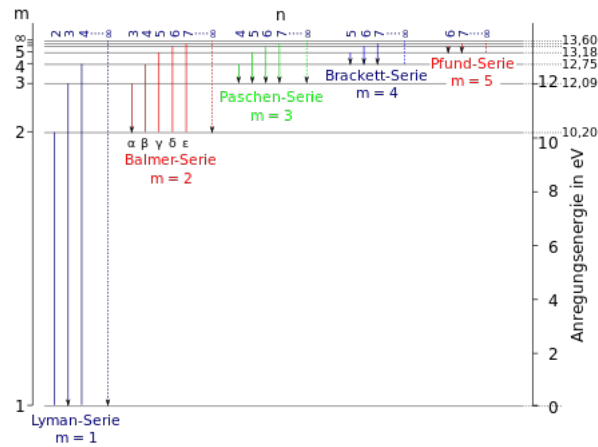


Figura 6.1: Séries relacionada a Tabela 6.1

6.3.1 Energia em uma órbita circular

Consideremos um elétron de carga $-e$, em uma órbita de raio r em torno de uma carga positiva Ze (Z = número atômico), sua energia potencial é:

$$U = \frac{kq_1q_2}{r} = \frac{k(Ze)(-e)}{r} = -\frac{kZe^2}{r} \quad (6.7)$$

sua energia cinética vem da segunda lei de Newton e usa a definição de aceleração centrípeta, tem-se:

$$\frac{kZe^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (6.8)$$

e multiplicando os dois lados por $r/2$, obtém-se:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r} \quad (6.9)$$

Podemos notar que,

$$U = -2K \quad (6.10)$$

A energia total é a soma da energia potencial e cinética, neste caso também conhecida como **Energia em uma Órbita Circular para uma Força do tipo $1/r^2$** :

$$E = K + U = \frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r} - \frac{kZe^2}{r} \quad (6.11)$$

ou

$$E = -\frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r} \quad (6.12)$$

6.3.2 Os postulados de Bohr

Primeiro postulado

O elétron do átomo de hidrogênio pode se mover apenas em certas órbitas circulares, chamadas de estados estacionários, nas quais não perde energia por radiação.

Segundo postulado

O segundo postulado relaciona a frequência da radiação às energias dos estados estacionários. Se E_i e E_f são as energias inicial e final do átomo, a frequência da radiação emitida durante uma transição é dada por:

$$f = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (6.13)$$

onde h é a constante de Planck. Esse postulado é equivalente à hipótese de conservação de energia com a de um fóton de energia hf . Combinando as equações 6.12 e 6.13, obtém-se a seguinte expressão para a frequência:

$$f = \frac{E_1 - E_2}{h} = \frac{1}{2} \frac{kZe^2}{h} \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) \quad (6.14)$$

onde r_1 e r_2 são os raios de órbitas inicial e final. Para que as frequências calculadas através da Equação 6.14 sejam as mesmas que resultam da fórmula de Rydberg,

$$f = \frac{c}{\lambda} = cR \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

é necessário que os raios das órbitas estáveis sejam proporcionais aos quadrados dos números inteiros. Depois de muita tentativa Bohr postulou que o momento angular do elétron em uma órbita estável era igual a um número inteiro vezes \hbar . A relação do momento angular de massa m , velocidade v e raio r é mvr ;

Terceiro postulado

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.15)$$

manipulando a equação 6.8 podemos obter:

$$v^2 = \frac{kZe^2}{mr} \quad (6.16)$$

isolando v na equação 6.15 e elevando ao quadrado

$$v^2 = n^2 \frac{\hbar^2}{m^2 r^2}$$

igualando e comparando os resultados obtém-se

$$n^2 \frac{\hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{kZe^2}{mr}$$

Ao explicitar r , tem-se o que chamamos de Raios das Órbitas de Bohr:

$$r = n^2 \frac{\hbar^2}{mrZe^2} = n^2 \frac{a_0}{Z} \quad (6.17)$$

onde a_0 é o chamado de **primeiro raio de Bohr**.

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2} \approx 0,0529nm \quad (6.18)$$

Substituindo na Equação 6.14 $r(n_1)$ e $r(n_2)$ por seus valores, dados pela equação 6.17 obtém-se:

$$f = \frac{1}{2} \frac{kZe^2}{h} \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) = Z^2 \frac{mk^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (6.19)$$

Fazendo $Z = 1$ e $f = c/\lambda$ podemos chegar que a constante de Rydberg é dada por:

$$R = \frac{mk^2e^4}{4\pi c\hbar^3} \quad (6.20)$$

6.3.3 Níveis de Energia

$$E_n = -Z^2 \frac{E_0}{n^2} \quad (6.21)$$

onde

$$E_0 = \frac{1}{2} \frac{ke^2}{a_0} \approx 13,6eV \quad (6.22)$$

As energias E_n com $Z=1$ são os níveis de energia permitidos para o elétron do átomo de hidrogênio.

Transições entre essas energias permitidas resultam na emissão ou absorção de um fóton, cuja frequência é dada por $f = (E_i - E_f)/h$ e cujo comprimento de onda é dado por

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{E_i - E_f}$$

essas transições são as mesmas apresentadas na seção de Espectros Atômicos de acordo com os valores de n ; para o átomo de Hidrogênio $E_1 = -13,6eV$. O processo de remover o elétron é chamado de ionização, e a energia necessária para removê-lo é a energia de ionização, no qual para o Hidrogênio equivale a 13,6 eV.

7 Moléculas

8 Sólidos

9 Relatividade

10 Física Nuclear

11 Partículas elementares e o começo do universo

12 Exercícios resolvidos

Notas:

- Tente resolver as questões antes de olhar a resolução.
- Sempre consulte os capítulos de constantes e de fórmulas (cap 1 e 2) para auxílio.
- Faça análise dimensional nos exercícios para prever se as unidades estão de acordo.
- Tente manipular ao máximo as equações antes de substituir os valores.
- ν e f representam ambos o símbolo de frequência.
- O princípio da incerteza pode ser assumido de duas formas uma usando \hbar e outra $\hbar/2$, ambos estão corretos.

Exercício 01: A temperatura de sua pele é de aproximadamente 35°C. a) Considerando que a pele seja um corpo negro, qual é o comprimento de onda correspondente ao pico de emissão de radiação? b) Considerando uma área superficial total de $2m^2$, qual é a potência total emitida por sua pele? c) Baseado em sua resposta ao item anterior, por que você não brilha tão intensamente quanto uma lâmpada incandescente?

Resposta:

a) Convertendo a temperatura de °Celsius para Kelvin, temos: $35 + 273 = 308 \text{ K}$; Aplicando a lei de deslocamento de Wien: $\lambda * T = 2,898 \times 10^{-3}$, sendo $T = 308$; colocando λ em evidência obtemos: $\lambda = \frac{2,898 \times 10^{-3}}{308} = 9,41 \times 10^{-6} [m]$

b) Usando a seguinte fórmula $R = \sigma T^4$; sendo $T = 308 \text{ K}$ e $\sigma = 5,6705 \times 10^{-8} W/m^2 K^4$
 $R = 5,6705 \times 10^{-8} * 308^4 = 510,298$; Sendo a área = $2m^2$, temos
 $R = 510,298 * 2 = 1020W \approx 1kW$

c) A temperatura em questão só emite ondas na faixa do infravermelho. (Que no caso é imperceptível ao olho humano.

Exercício 02: Considere uma cavidade, mantida à temperatura de 2000 K, com um pequeno orifício através do qual a radiação eletromagnética em seu interior pode escapar. Em qual comprimento de onda a cavidade irradia com maior intensidade? Resposta:

Utilizando novamente a lei de deslocamento de Wien temos: $\lambda * T = 2,898 \times 10^{-3}$, sendo $T = 2000 \text{ K}$, colocando λ em evidência obtemos: $\lambda = \frac{2,898 \times 10^{-3} mK}{2000K} = 1449 \times 10^{-6} [m]$, ou $1449 [\mu m]$

Exercício 03: Considere que o Sol é um corpo negro de temperatura 5700 K. O diâmetro do Sol é aproximadamente $1,4 \times 10^9 m$ e sua massa é de $2,0 \times 10^{30} Kg$: a) Use a Lei de Stefan para calcular a energia total radiada pelo Sol em um ano. b) A fonte de energia solar são fusões termonucleares. Utilizando a expressão $E = mc^2$, calcule a massa transformada por segundo em radiação pelo Sol. c) Qual a fração da massa do Sol perdida a cada ano no processo de fusão? Resposta:

a) Utilizando-se da Lei de Stefan $R = \sigma T^4$, primeiro vamos descobrir a potência pela área;

$$R = 5,6705 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \cdot (5700 K)^4 = 59,878 \cdot 10^6 \frac{W}{m^2}$$

Assumindo que o Sol é uma esfera vamos calcular a potência por $P=R \cdot A$ onde A é área:

$$P = 59,8578 \cdot 10^6 \frac{W}{m^2} \cdot 4\pi (0,7 \cdot 10^9 m)^2 = 3,6857 \cdot 10^{26} W$$

Como potência é Energia/tempo (J/s) e queremos um ano ($31,536 \cdot 10^6$)s obtemos:

$$E = 3,685 \cdot 10^{26} \frac{J}{s} \cdot 31,536 \cdot 10^6 s = 1,2 \cdot 10^{34} J$$

$$b) E = mc^2 \Rightarrow m = \frac{E}{c^2} \Rightarrow m = \frac{3,6857 \cdot 10^{26} J s^{-1}}{(3 \cdot 10^8)^2 m^2 s^{-2}} = 4,1 \cdot 10^9 Kg$$

$$c) (m_{ano}/m_{Sol}) = \frac{E_{ano}}{c^2} \cdot \frac{1}{m_{Sol}} \Rightarrow \frac{1,2 \cdot 10^{34} J}{(2,9979 \cdot 10^8 m \cdot s^{-1})^2} \cdot \frac{1}{2 \cdot 10^{30} Kg} = 6,6 \cdot 10^{-14}$$

Exercício 04: O máximo da distribuição espectral da potência irradiada por uma certa cavidade ocorre para o comprimento de onda de $24,0 \mu m$ (na região do infravermelho). A temperatura da cavidade é aumentada até que a potência irradiada se torne duas vezes maior. a) Determine a nova temperatura da cavidade. b) Determine a nova posição do máximo da distribuição espectral. Resposta:

a) Para descobrirmos a nova temperatura devemos achar sua temperatura e potência atual, então usando as relações $\lambda = \frac{cte}{T}$ e $R = \sigma T^4$ fazemos:

$$T = \frac{cte}{\lambda} \Rightarrow T = \frac{2,898 \cdot 10^{-3} mK}{24 \cdot 10^{-6} m} = 120,75 K \quad \text{e}$$

$$R = 5,6705 \cdot 10^{-8} W m^{-2} K^{-4} \cdot (120,75 K)^4 = 12,05 \frac{W}{m^2} \quad \text{dobrando este valor temos}$$

$$2R = R_1 = 24,1 \frac{W}{m^2} \quad \text{aplicando este valor na fórmula de potência e isolando a temperatura:}$$

$$R_1 = \sigma T_1^4 \Rightarrow T_1 = \sqrt[4]{\frac{R_1}{\sigma}} = \sqrt[4]{\frac{24,1 W m^{-2}}{5,6705 \cdot 10^{-8} W m^{-2} K^{-4}}} = 143,6 K$$

$$b) \lambda_1 = \frac{cte}{T_1} = \frac{2,898 \cdot 10^{-3} mK}{143,6 K} = 20,2 \mu m$$

Exercício 05: A temperatura de um corpo negro diminui de 800 K para 650 K. Determine o quanto mudou o comprimento de onda que corresponde ao máximo de emissão do espectro de radiação deste corpo. Resposta:

Partindo da Lei de deslocamento de Wien, $\lambda_{max} T = 2,898 \times 10^{-3} [mK]$, devemos calcular o comprimento de onda correspondente as duas temperaturas (800 K e 650 K), sendo assim:

$$\lambda_1 = \frac{2,898 \times 10^{-3}}{800} = 3,6225 \times 10^{-6} [m]$$

$$\lambda_2 = \frac{2,898 \times 10^{-3}}{650} = 4,458 \times 10^{-6} [m]$$

Agora só é fazer a relação $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ e então

$$\frac{4,458 \cdot 10^{-6} m}{3,6225 \cdot 10^{-6} m} = 1,23 \quad \text{ou seja houve um aumento de 23\%}.$$

Exercício 06: Qual é o número aproximado de fótons emitidos por minuto por um pointer laser verde (532nm) de potência nominal 5,00 mW? Resposta:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \frac{1240 eV nm}{532 nm} = 2,33 eV = 3,73 \cdot 10^{-19} J$$

$$n = \frac{P}{E} = \frac{5 \cdot 10^{-3} W}{3,73 \cdot 10^{-19} J} = 1,34 \cdot 10^{16} / s \quad \text{ou seja passam } 8,04 \cdot 10^{17} \text{ elétrons por minuto.}$$

Exercício 07: Uma estação de rádio transmite em uma frequência de 1MHz (10^6 Hz) com uma potência radiada total de 5000W. a) Qual o comprimento de onda da radiação? b) Qual a energia de cada fóton individual sendo emitido? c) Quantos fótons são emitidos por segundos? d) A antena de um aparelho de rádio deve receber pelo menos $2\mu W$ ($2 \times 10^{-6} W$) de potência para conseguir funcionar corretamente. Qual o número mínimo de fótons a

antena deve receber por segundo em uma frequência de 1MHz? e) Os resultados das partes c) e d) indicam que o fenômeno de transmissão e recepção de rádio deve considerar a radiação como ondas ou partículas? Resposta:

$$a) \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \cdot 10^8 m/s}{10^5 s^{-1}} = 300m$$

$$b) E = h\nu = 4,135 \cdot 10^{-15} eV \cdot s \cdot 10^6 \approx 4,1 \cdot 10^{-9} eV$$

$$c) P = nE/t \Rightarrow n = Pt/E = \frac{5 \cdot 10^{-3} Js^{-1} \cdot 1s}{6,626 \cdot 10^{-34} Js \cdot 10^6 s^{-1}} \approx 7,5 \cdot 10^{30} \text{ fótons}$$

Exercício 08: O molibdênio metálico tem de absorver radiação com a frequência mínima de $1,09 \times 10^{15} s^{-1}$ antes que ele emita um elétron de sua superfície via efeito foto elétrico. a) Qual é a energia mínima necessária para produzir esse efeito? b) Qual comprimento de onda de radiação fornecerá um fóton com essa energia? c) Se o molibdênio é irradiado com luz com comprimento de onda de 120 nm, qual seria a energia cinética máxima dos elétrons emitidos? Resposta:

$$a) E = h\nu \Rightarrow E = 4,135 \cdot 10^{-15} eV \cdot s \cdot 1,09 \cdot 10^{15} Hz \approx 4,51 eV$$

$$b) \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \cdot 10^8 m \cdot s^{-1}}{1,09 \cdot 10^{15} s^{-1}} = 275 nm$$

$$c) E_{c_{max}} = h\nu - \phi \quad \phi = \nu_{min} h \Rightarrow \phi = \frac{c}{\lambda_{min}} \cdot h$$

$$E_{c_{max}} = h \frac{c}{\lambda} - h \frac{c}{\lambda_{min}} = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{min}} \right) \quad \text{substituindo os valores:}$$

$$E_{c_{max}} = 4,135 \cdot 10^{-15} eV \cdot s \cdot 3 \cdot 10^8 m \cdot s^{-1} \left(\frac{1}{120 \cdot 10^{-9} m} - \frac{1}{275 \cdot 10^{-9} m} \right) \approx 5,8 eV$$

Exercício 09: Ilumina-se uma superfície de alumínio com luz de comprimento de onda 2000 Å ($\text{\AA} = 10^{-10} m$). No alumínio são necessários 4,2 eV para remover um elétron. a) Qual a energia cinética do elétron mais rápido? b) Qual a energia cinética elétron mais lento? c) Qual o potencial de corte? d) Qual a frequência de corte para o alumínio? e) Se a intensidade da luz incidente for $2,0 W/m^2$, qual o número médio de fótons por unidade de tempo por unidade de área que atinge a superfície? Resposta:

a) $E_c = h\nu - \phi$ e $\nu = \frac{c}{\lambda}$ desta forma $E_c = \frac{hc}{\lambda} - \phi$ substituindo os determinados valores:
 $E_c = 4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} \cdot \frac{2,9979 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}}{2000 \cdot 10^{-10} \text{ m}} - 4,2 \text{ eV} = 2 \text{ eV}$

b) A menor energia pode ser 0 eV.

c) $E_c = eV_0 \Rightarrow 2 \text{ eV} = eV_0 \Rightarrow V_0 = 2 \text{ V}$

d) $\nu_0 = \frac{\phi}{h} \Rightarrow \nu_0 = \frac{4,2 \text{ eV}}{4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}} \approx 1,0 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$

e) $2,0 \text{ J} = n \left(\frac{6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 2,9979 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}}{2000 \cdot 10^{-10} \text{ m}} \right) \Rightarrow n = 2 \cdot 10^{18}$ portanto passam $2 \cdot 10^{18} \frac{\text{fótons}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$

Exercício 10: O potencial de corte para foto-elétrons emitidos por uma superfície iluminada por luz com $\lambda = 4910 \text{ Å}$ é 0,71 V. Quando o comprimento de luz é mudado para λ_1 , o potencial de corte passa a ser 1,43 V. Qual o valor de λ_1 ? Resposta:

$eV = h\nu - \phi$ fazendo duas equações para os dois potenciais:
 $eV_0 = h\frac{c}{\lambda_0} - \phi \quad eV_1 = h\frac{c}{\lambda_1} - \phi$
multiplicando a segunda equação por (-1), somando ambas e colocando os termos semelhantes em evidência:
 $e(V_0 - V_1) = hc \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda_1} \right) \Rightarrow \frac{e(V_0 - V_1)}{hc} = \frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda_1} \Rightarrow \lambda_1 = \left(\frac{e(V_1 - V_0)}{hc} - \frac{1}{\lambda_0} \right)$
 $\lambda_1 = \left(\frac{e(1,43 - 0,71) \text{ V}}{4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}} + \frac{1}{4910 \cdot 10^{-10} \text{ m}} \right) \approx 3821 \text{ Å}$

Exercício 11: Um aparelho de raio X funciona com uma tensão de 95 kV para aceleração dos elétrons emitidos por um cátodo. Suponha que os elétrons são emitidos com energia cinética inicial desprezível. Determine o comprimento de onda mínimo dos raios X produzidos por esse aparelho. Resposta:

Usando a fórmula: $\lambda = \frac{hc}{E} \Rightarrow \lambda = \frac{1240 \text{ eV nm}}{95 \cdot 10^3 \text{ eV}} = 0,013 \text{ nm} = 0,13 \text{ Å}$

Exercício 12: Fótons com $\lambda = 0,024 \text{ Å}$ incidem sobre elétrons livres. a) Encontre o comprimento de onda de um fóton espalhado a 30° em relação à direção de incidência e também a energia cinética transferida ao elétron. b) Faça o mesmo para a direção 120° . Resposta:

$$\begin{aligned}
\text{a) } \lambda_2 - \lambda_1 &= \lambda_c(1 - \cos\theta) \text{ e } \lambda_c = \frac{h}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m} \Rightarrow \\
\lambda_2 &= \lambda_c(1 - \cos\theta) + \lambda_1 = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}(1 - \cos(30^\circ)) + 0,024 \cdot 10^{-10} \text{ m} = \\
&= 0,0272 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,0272 \text{ \AA} \\
E_{if} &= E_{ff} + E_{fe} \Rightarrow E_{fe} = E_{if} - E_{ff} = h\nu_i - h\nu_f = hc \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) \Rightarrow \\
E_{fe} &= 4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} \left(\frac{1}{0,024 \cdot 10^{-10} \text{ m}} - \frac{1}{0,0272 \cdot 10^{-10} \text{ m}} \right) = 61 \text{ keV} \\
\\
\text{b) } \lambda_2 &= 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}(1 - \cos(120^\circ)) + 0,024 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,0604 \text{ \AA} \\
E_f &= 4,135 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} \left(\frac{1}{0,024 \cdot 10^{-10}} - \frac{1}{0,0604 \cdot 10^{-10}} \right) = 312 \text{ keV}
\end{aligned}$$

Exercício 13: Raios-X de comprimento de onda 0,25nm realizam espalhamento Compton com elétrons que podem ser considerados no estado inicial de repouso, em uma folha metálica. Para o feixe observado de raios-X espalhados um ângulo de 60.0° em relação ao feixe incidente determine: a) O comprimento de onda dos raios-X espalhados. b) A energia dos raios-X espalhados. c) A energia cinética dos elétrons espalhados. d) A direção de propagação dos elétrons espalhados. Resposta:

$$\begin{aligned}
\text{a) } \lambda_f &= \lambda_c(1 - \cos\theta) + \lambda_i = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}(1 - \cos 60^\circ) + 0,25 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 0,2512 \text{ nm} \\
\text{b) } E &= h\nu \Rightarrow E = h \frac{c}{\lambda} = \frac{4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}}{0,2512 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = 4935 \text{ eV}
\end{aligned}$$

Exercício 14: O comprimento de onda da radiação térmica que o Sol emite mais intensamente é aproximadamente 500nm. Supondo que o Sol é um corpo negro qual seria a temperatura em sua superfície? Resposta:

$$\lambda = \frac{cte}{T} \Rightarrow T = \frac{cte}{\lambda} = \frac{2,89 \cdot 10^{-3} \text{ mK}}{500 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = 5780 \text{ K}$$

Exercício 15: A medida do comprimento de onda para a qual a distribuição $R(\lambda)$ é máxima indica que a temperatura da superfície da estrela é 3000K. Se a potência irradiada pela estrela é 100 vezes maior que a potência irradiada pelo Sol, qual seria o tamanho da estrela? Dado: temperatura da superfície do Sol = 5800K. Dica: para um corpo negro $R=P/A$, onde R é a potência irradiada por unidade de área, P a potência total irradiada e A a área do corpo, e suponha que as estrelas são corpos negros. Resposta:

$$P_{Est} = 100P_{Sol} \Rightarrow R_{est} \cdot A_{est} = 100R_{Sol} \cdot A_{Sol} = R_{est} \cdot 4\pi r_{est}^2 = 100R_{Sol} \cdot 4\pi r_{Sol}^2 \Rightarrow$$

$$\sigma T_{est}^4 \cdot r_{est}^2 = 100\sigma T_{Sol}^4 r_{Sol}^2 \quad \text{simplicando os termos semelhantes e fazendo a raiz quadrada:}$$

$$T_{est}^2 r_{est} = 10T_{Sol}^2 r_{Sol} \Rightarrow r_{est} = 10 \left(\frac{T_{Sol}}{T_{est}} \right)^2 r_{Sol} = 10 \left(\frac{5800K}{3000K} \right)^2 r_{Sol} = 37,3r_{Sol}$$

Exercício 16: Um átomo de Hélio uma vez ionizado, He^+ , tem um espectro análogo ao do hidrogênio, mas seu núcleo tem o dobro da carga do de hidrogênio.

- Desenvolva a teoria de Bohr para o He^+ , calculando os níveis de energia E_n em função das constantes físicas e, m_e, h, ϵ_0 .
- Qual é a previsão para a energia do fóton emitido numa transição de $n = 2$ para $n = 1$;
- Calcule a energia de ionização do He^+ .
- Obtenha uma estimativa da distância entre o núcleo e o elétron desse átomo calculando o raio da primeira órbita de Bohr. Resposta:

a) $m_{He} = 2m_H$ ou melhor $Z_{He} = 2u$, da definição de Bohr tem-se:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} \quad \text{isso implica em } -\frac{Z^2 m_e}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} = -2m_e \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

b) fóton $n = 2 \rightarrow n = 1$

$$E = -2m_e \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{1} \right] = \frac{3}{2} m_e \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 = 40,8 eV$$

c) Se a energia gasta foi 40,8 eV, e que em $n=1$ $E_0 = 13,6 eV$ então basta somarmos estes valores $13,6 eV + 40,8 eV = 54,4 eV$

d) $r = \frac{n^2}{Z} \cdot a_0 \Rightarrow r = \frac{1}{2} \cdot 5,29 \cdot 10^{-11} m = 0,2645 \text{ \AA}$

Exercício 17: Qual o comprimento de onda mais curto que pode ser emitido pelo Hélio uma vez ionizado? Resposta:

O comprimento de onda mais curto é obtido quando a frequência máxima:

$$\lambda_{min} = \frac{c}{\nu_{max}} = \frac{hc}{E_{max}} = \frac{hc}{E_{\infty} - E_1}, \quad \text{aqui utilizamos a relação de quando o elétron sai da } n\text{-ésima órbita e vai para a primeira, agora devemos usar a relação de Bohr para o cálculo da energia dependendo da massa atômica então:}$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_0 \quad \text{como } n=1 \text{ e } Z=2 \text{ temos } E_1 = -4E_0 \Rightarrow \lambda_{min} = \frac{hc}{0 - (-4E_0)} = \frac{hc}{4E_0} =$$

$$\frac{1240 eV nm}{4 \cdot 13,6 eV} = 23,1 nm$$

Exercício 18: A série de Pfund resulta da emissão/absorção de fótons em transições do elétron no hidrogênio de (ou para) os níveis mais altos para (ou do) nível $n = 5$. Quais são os comprimentos de onda mais curtos e mais longo dos fótons emitidos que correspondem

à série de Pfund? Resposta:

Basta utilizarmos a relação de Rydberg: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$

Para o comprimento mais curto assumimos $m \rightarrow \infty$ então:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{R}{25} \Rightarrow \lambda = \frac{25}{R} = 2279nm$$

Para o comprimento mais curto a transição vem de $m=6$ e então:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{6^2} \right) = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1} \cdot \left(\frac{1}{25} - \frac{1}{36} \right) \Rightarrow \lambda \approx 7460nm$$

Exercício 19: Numa experiência fotoelétrica na qual se usa luz monocromática e um fotocátodo de sódio, encontramos um potencial de corte de 1,85 V para $\lambda = 300nm$ e de 0,82 V para $\lambda = 400nm$. Destes dados, determine (a) o valor da constante de Planck, (b) a função trabalho do sódio em eV, e (c) o comprimento de onda limite para o sódio. Resposta:

Usando a relação $eV_0 = h\nu_0 - \phi$

a) $eV_1 = h\nu_1 - \phi$ e $eV_2 = h\nu_2 - \phi$ multiplicando está por (-1), somando e colocando termos em evidência

$$e(V_1 - V_2) = h(\nu_1 - \nu_2) \Rightarrow h = e \frac{(V_1 - V_2)}{(\nu_1 - \nu_2)} \Rightarrow h = \frac{e}{c} \frac{(V_1 - V_2)}{\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)}$$

$$h = \frac{e}{3 \cdot 10^8 ms^{-1}} \frac{(1,85 - 0,82)V}{\left(\frac{1}{300 \cdot 10^{-9}m} - \frac{1}{400 \cdot 10^{-9}m} \right)} = \frac{1,03eVs}{3 \cdot 10^{17} \cdot 8,3 \cdot 10^{-4}} = 4,12 \cdot 10^{-15}eVs$$

$$b) \phi = h\nu_1 - eV_1 = 4,12 \cdot 10^{-15}eVs \cdot \frac{3 \cdot 10^8 ms^{-1}}{300 \cdot 10^{-9}m} - 1,85eV \Rightarrow$$

$$\phi = 4,12 \cdot 10^{-15}eVs \cdot \frac{10^8}{10^{-7}} - 1,85eV = 2,27eV$$

$$c) \nu_{max} = \frac{\phi}{h} \Rightarrow \frac{c}{\lambda_{max}} = \frac{\phi}{h} \Rightarrow \lambda_{max} = \frac{hc}{\phi} = \frac{4,12 \cdot 10^{-15}eVs}{2,27eV} \cdot 3 \cdot 10^8 ms^{-1} = 544nm$$

Exercício 20: Um nêutron possui uma energia cinética de 10 MeV. Que tamanho de objeto é necessário para observar fechos de difração com nêutrons. Existe algo na natureza desse tamanho que pudesse servir como um alvo a fim de demonstrar a natureza ondulatória deste nêutron? Resposta:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_n E_c}} = \frac{6,626076 \cdot 10^{-34} Js}{\sqrt{2 \cdot 1,6749 \cdot 10^{-27} kg \cdot 10 \cdot 10^6 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} J}} = 9,0 \cdot 10^{-15}m = 9fm$$

Exercício 21: A radiância espectral $R_T(\nu)$ está relacionada com a densidade $\rho_T(\nu)$ da seguinte forma: $R_T(\nu) = \frac{c}{4} \cdot \rho_T(\nu)$. calcule a radiância $R_T = \int_0^\infty R_T(\nu) d\nu$ para mostrar a lei de Stefan-Boltzmann

$$R_T = \sigma T^4,$$

em que $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3}$. Dica: você pode extrair fatores da integral e usar o resultado $R_T = \int_0^\infty x^3/(e^x - 1) = \pi^4/15$. Use os valores das constantes h e k_B para mostrar que $\sigma = 5,6704 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ Resposta:

Devemos usar a Lei de Planck para a frequência

$$\rho_T(\nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad \text{Lei de Planck}$$

Substituindo esse termo na integral e usando a relação dada

$$R_T = \int_0^\infty \frac{c}{4} \cdot \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu \Rightarrow \frac{2\pi h}{c^2} \int_0^\infty \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu$$

Assumindo $x = \frac{h\nu}{k_B T} \Rightarrow \nu = \frac{k_B T}{h} x \Rightarrow d\nu = \frac{k_B T}{h} dx$ substituindo na integral

$$\frac{2\pi h}{c^2} \int_0^\infty \frac{\left(\frac{k_B T}{h} x\right)^3 \cdot \frac{k_B T}{h} dx}{e^x - 1} \quad \text{colocando os termos constantes para fora da integral}$$

$$\frac{2\pi h}{c^2} \cdot \left(\frac{k_B T}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \Rightarrow R_T = \frac{2\pi}{c^2} \frac{k_B^4 T^4}{h^3} \frac{\pi^4}{15} = \sigma T^4$$

Agora substituindo os valores em σ temos:

$$\sigma = \frac{2 \cdot (3,14159)^5}{15 \cdot (2,9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2} \cdot \frac{(1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1})^4}{(6,626076 \cdot 10^{-34} \text{ J s})^3} \quad \text{fazendo análise dimensional}$$

$$\left[\frac{\text{J}^4 \text{K}^{-4}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{J}^3 \cdot \text{s}^3} = \frac{\text{J}}{\text{sm}^2 \text{K}^4} = \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4} \right] \quad \text{portanto} \quad \sigma = 5,6705 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4}$$

Exercício 22: Num aparelho de televisão os elétrons são acelerados por um potencial de 20 kV. Qual é o comprimento de onda de Broglie desses elétrons? Se o potencial for duplicado, qual será o novo comprimento de onda? Resposta:

Vamos assumir algumas definições $\lambda = h/p \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{\sqrt{2E_0 E}}$ em que E_0 é a energia relativa do elétron e E é a energia de ddp proposta no enunciado, o valor de E_0 é 0,511 MeV e de hc é 1240 eVnm portanto:

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eVnm}}{\sqrt{2 \cdot 0,511 \cdot 10^6 \text{ eV} \cdot 23 \cdot 10^3}} = \frac{1240 \text{ eVnm}}{153 \cdot 10^3 \text{ eV}} = 8,1 \cdot 10^{-3} \text{ nm}$$

Exercício 23: (resolvido como 24 na lista 2013.3): Os núcleos atômicos são também sistemas quânticos com níveis de energia discretos. Um estado excitado de um certo núcleo tem uma meia vida de $0,7 \cdot 10^{-9} \text{ s}$. Considerando que este tempo é a incerteza Δt para a emissão de um fóton, use a relação $\Delta E \Delta t \approx h$ para calcular a incerteza da frequência, Δf , e calcule $\frac{\Delta f}{f}$ para $\lambda = 0,01 \text{ m}$. Resposta:

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\Delta t} \quad E = h\nu \Rightarrow \Delta E = h\Delta\nu \Rightarrow h\Delta\nu = \frac{h}{2\pi\Delta t} \Rightarrow$$

$$\Delta\nu = \frac{1}{2.3,1415.0,7.10^{-9}s} \approx 0,23.10^9 Hz$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \frac{\Delta\nu}{\nu} = \Delta\nu \frac{\lambda}{c} \Rightarrow \frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{0,23.10^9 s^{-1} . 0,01.10^{-9} m}{2,9979.10^8 ms^{-1}} = 7,7.10^{-12}$$

Exercício 24: Uma partícula de 50 kg tem um comprimento de onda de de Broglie de 20 cm. a) Com que velocidade a partícula se desloca? b) Qual é a incerteza mínima quanto à velocidade da partícula se a incerteza quanto à sua posição é de 20 cm? Resposta:

$$a) \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \Rightarrow v = \frac{h}{\lambda m} \Rightarrow v = \frac{6,626 \times 10^{-34} Js}{20.10^{-2} m . 50 kg} = 6,63 \times 10^{-35} \frac{m}{s}$$

$$b) \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \Rightarrow \Delta p \geq \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{1}{4\pi} \frac{h}{\Delta x} \Rightarrow v \geq \frac{h}{4\pi \lambda m} \Rightarrow v \geq \frac{6,626.10^{-34} Js}{4\pi . 2.10^{-2} m . 50 kg} = 5,25.10^{-26} m/s$$

Exercício 25: Considere um elétron livre com energia 0,5 keV que terá sua posição e momento determinados no mesmo instante. Se a posição for determinada com a precisão de 4Å, qual será a porcentagem de incerteza em seu momento? Resposta:

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2m_e E} = \sqrt{2.0.5.10^3 eV . 1,602.10^{-19} J eV^{-1}} = 1,21.10^{-23} kg m/s$$

$$\Delta p = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\Delta x} \Rightarrow \Delta p = 1,31.10^{-25} kg m/s$$

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{1,31.10^{-25} kg m/s}{1,21.10^{-23} kg m/s} = 0,011 \text{ ou seja } 1,1\%$$

Exercício 26: Qual o comprimento de onda de de Broglie para uma bola de futebol de massa m=0,5 Kg se movimentando com uma velocidade de 5m/s? E para um elétron com energia cinética de 100 eV? Resposta:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \lambda = \frac{6,626.10^{-34} Js}{0,5 Kg . 5 ms^{-1}} = 2,6504.10^{-34} m$$

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} = \frac{1240 eV nm}{100 eV} = 124 \text{Å}$$

Exercício 27: (Resolvido como 13 na lista 2013.3): O comprimento de onda de um linha de Balmer é 379.1 nm. A que transição corresponde essa linha? Resposta:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \text{sabe-se que a série de Balmer vai até } n = 2 \text{ e que a constante de Rydberg é } 1097.10^7 m^{-1} \text{ então manipulando a fórmula temos:}$$

$$\frac{1}{\lambda R} = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \Rightarrow \frac{1}{n^2} - \frac{1}{\lambda R} = \frac{1}{m^2} \Rightarrow \frac{1}{m^2} = \frac{1}{2^2} - \frac{1}{(379,1 \cdot 10^{-9} m)(1,097 \cdot 10^7 m^{-1})} =$$

$$9,5 \cdot 10^{-3} \Rightarrow m = \sqrt{\frac{1}{9,5 \cdot 10^{-3}}} = 10,2 \approx 10$$

Exercício 28: (Resolvido como 15 na lista 2013.3): O múon é uma partícula idêntica ao elétron exceto pela massa que é de $105.7 \text{ MeV}/c^2$ (cerca de 207 vezes a massa do elétron). Um múon pode ser capturado por um próton formando um átomo muônico. Calcule para este átomo:

a) O raio da primeira órbita de Bohr.

b) A energia do estado fundamental.

c) O comprimento de onda mais curto e o mais longo para a série de Balmer. Resposta:

$$\text{a) } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} m \Rightarrow \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{207m_e e^2} = \frac{5,29 \cdot 10^{-11} m}{207} = 2,55 \cdot 10^{-13} m$$

$$\text{b) } E_0 = \frac{mK^2 e^4}{2\hbar^2} = \frac{207m_e \cdot K^2}{2\hbar^2}$$

$$= \frac{207 \cdot 9,10939 \cdot 10^{-31} \text{ Kg} (9 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2 \text{C}^{-2})^2 \cdot (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C})^4}{2 \cdot (1,05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2} = \frac{1 \cdot 10^{-83}}{2,22 \cdot 10^{-68}} \text{ J} = -4,4959 \cdot 10^{-16} \text{ J}$$

c) Série de Balmer n vai de 6 a 2:

$$\lambda_{curto} \Rightarrow 6 \rightarrow 2 \Rightarrow \Delta E_{curto} = \left(\frac{-2806 \text{ eV}}{6^2} - \frac{(-2806 \text{ eV})}{2^2} \right) = 623,5 \text{ eV}$$

$$\lambda_{curto} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{623,5 \text{ eV}} = 1,98 \cdot 10^{-9} m$$

$$\lambda_{longo} \Rightarrow 3 \rightarrow 2 \Rightarrow \Delta E_{longo} = \left(\frac{-2806 \text{ eV}}{3^2} - \frac{(-2806 \text{ eV})}{2^2} \right) = 390 \text{ eV}$$

$$\lambda_{longo} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{390 \text{ eV}} = 3,2 \cdot 10^{-9} m$$

Exercício 29 (Resolvido como 21 na lista 2013.3): Para uma partícula cuja energia cinética é muito maior do que sua energia de repouso, vale a aproximação $E = pc$. Calcule o comprimento de onda de De Broglie de um elétron de 100 MeV de energia usando essa aproximação. Resposta:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \Rightarrow \lambda = \frac{1240 \text{ eV nm}}{100 \cdot 10^6 \text{ eV}} = 124 \cdot 10^{-3} \text{ nm}$$

Exercício 30 (Resolvido como 23 na lista 2013.3): Uma massa de 1 micrograma tem velocidade de 1 cm/s. Se a velocidade tem uma incerteza de 1%, qual é a ordem de grandeza mínima da incerteza na sua posição. Resposta:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

$$\Delta p = mv \Delta v = 1.10^{-6}g.1.10^{-2}ms^{-1}.0,01 \Rightarrow \Delta p = 10^{-12}Kgm s^{-1}$$

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p} = \frac{1,054.10^{-34}Js}{2.10^{-13}Kgm.s^{-1}} = 5,27.10^{-22}$$

Exercício 31 (Resolvido como 25 na lista 2013.3): A posição e o momento do elétron de 2 keV são determinados no mesmo instante. Se a posição é determinada com precisão de 1 Å, qual é a porcentagem de incerteza em seu momento? (Dica: 1 eV = 1.6·10⁻¹⁹ J e $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg).

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar, \quad p = \sqrt{2Em} \text{ e } \Delta p = p\% \cdot p \Rightarrow p\% \geq \frac{\hbar}{\Delta x \cdot p} = \frac{h}{2\pi \Delta x \sqrt{2Em}}$$

$$p\% \geq \frac{6,626.10^{-34}Js}{2\pi 1,10^{-10}m \cdot \sqrt{2.9,1.10^{-31}Kg \cdot (2.10^3.1,6.10^{-19}J)}} \Rightarrow p\% \geq 4,4\%$$

Exercício 32 (Resolvido como 26 na lista 2013.3): A energia de um certo estado nuclear pode ser medida com incerteza da ordem de 0,1 eV. Qual o mínimo tempo de vida desse estado?

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \Rightarrow \Delta t \geq \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{1,054.10^{-34}Js}{0,1.1,6.10^{-19}J} \approx 6,6.10^{-15}s$$

Exercício 33 (Resolvido como 16 na lista 2013.3): Considere um átomo de silício que foi ionizado de modo que somente um elétron resta para ocupar seus orbitais. Calcule, para este sistema: a) O raio da primeira órbita de Bohr, isto é $n = 1$. b) Determine o espectro de Energia E_n do sistema, e a energia estado fundamental (o estado fundamental é aquele que tem a menor energia). c) Qual seria a energia do fóton emitido numa transição do elétron no estado $n = 2$ para o estado fundamental do sistema. Compare com o caso do átomo de hidrogênio.

$$a) \quad r = \frac{n^2}{Z} \cdot a_0 \Rightarrow r = \frac{1^2 \cdot 5,29.10^{-11}}{14} m \approx 3,8.10^{-12}m = 0,038\text{Å}$$

$$b) \quad E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0 \Rightarrow E_n = -\frac{14^2 \cdot 2,18.10^{-8}}{n^2} J = -2667/n^2 eV$$

$$c) \approx 2000eV$$

Exercício 34: (Resolvido como 17 na lista 2013.3): a) Calcule a energia de um elétron na

órbita $n = 1$ do tungstênio, tomando $Z-1$ como carga efetiva do núcleo. b) O valor experimental dessa energia é 69.5 keV. Suponha que a carga nuclear efetiva é $(Z - \sigma)$, onde σ é a chamada *constante de blindagem*, e calcule o valor de σ a partir do resultado experimental.

a) $Z = 74$ para o tungstênio

$$E = \frac{(Z-1)^2}{n^2} E_0 = \frac{(73)^2}{1} \cdot 2,18 \cdot 10^{-18} J = 72,5 \text{ keV}$$

b) $E = \frac{(Z-\sigma)^2}{n^2} E_0 \Rightarrow \frac{E}{E_0} = (Z-\sigma)^2 \Rightarrow \frac{69,5 \text{ eV}}{13,6 \text{ eV}} = (74-\sigma)^2 \Rightarrow \sigma^2 - 148\sigma + 366 = 0$
resolvendo a equação do segundo grau chega-se em $\sigma = 2,5$

Exercício 35: (Resolvido como 14 na lista 2016.3): Usando o modelo de Bohr:

a) Mostre que a frequência de revolução de um elétron no átomo de hidrogênio é dada por $\nu = 2|E|/h$, onde E é a energia total do elétron no orbital n . b) Calcule a velocidade do elétron para $n = 1$ e mostre que ela pode ser escrita como:

$$\nu = \alpha c, \text{ onde } \alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$$

a) Momento angular é dado por $L = r.p.\text{sen}\theta$ mas como o ângulo entre r e p é de 90 graus fica-se $L = r.p$, pode-se assumir que o momento angular na n -ésima órbita é da forma $L = n.\hbar$.

A energia cinética pode ser escrita da forma $E_c = \frac{pv}{2}$, a frequência $\nu = \frac{E}{h}$ e a velocidade circular $v = 2\pi r\nu \Rightarrow p = \frac{2E}{v} = \frac{2E}{2\pi\nu r} = \frac{L}{r} \Rightarrow L = \frac{2E}{2\pi\nu} = n\hbar \Rightarrow \frac{2E}{2\pi\nu} = \frac{n\hbar}{2\pi} \Rightarrow \frac{2E}{\nu} = nh \Rightarrow \nu = \frac{2E}{nh}$

b) Em $n=1$ $E_n = E_0$

$$E_0 = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = \frac{k^2me^4}{2\hbar^2} = \frac{mv^2}{2} \Rightarrow v = \frac{ke^2}{\hbar} \text{ mas se } v = \alpha c \Rightarrow \frac{ke^2}{\hbar} \frac{c}{c} = \alpha c$$

c) Basta substituir adequadamente os valores e chegará em $\alpha = 7,31 \cdot 10^{-3}$

Exercício 36: (Resolvido como 13 na lista 2015.1): O comprimento de onda de uma certa linha da série de Balmer é 434.2 nm. A que transição corresponde essa linha?

Na série de Balmer $n=2$. Usando a relação de Rydberg.

$$\frac{1}{m^2} = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{\lambda R} = \frac{1}{m^2} = \frac{1}{4} - \frac{1}{434,2 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}} \Rightarrow m = \sqrt{\frac{1}{40 \cdot 10^{-3}}} = 5$$

Exercício 37: (Resolvido como 14 na lista 2015.1): Um átomo de hélio uma vez ionizado, He^+ , tem um espectro análogo ao do hidrogênio, mas seu núcleo tem o dobro da

carga do de hidrogênio. a) descreva a teoria de Bohr para o He^+ , calculando os níveis de energia E_n em função das constantes físicas e, m_e, c, h, ϵ_0 . b) Qual é a previsão para a energia do fóton emitindo numa transição de $n=2$ para $n=1$. c) Calcule a energia de ionização do He^+ . d) Obtenha uma estimativa da distância entre o núcleo e o elétron desse átomo calculando o raio da primeira órbita de Bohr.

$$a) E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} = -\frac{2^2}{2 \cdot n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 = -2m_e \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$b) n = 2 \rightarrow n = 1$$

$$E = -2m_e \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 \left(\frac{1}{4} - 1 \right) = \frac{3}{2} m_e \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar} \right)^2 = 40,8 eV$$

c) Basta somar as energias do estado fundamental e a usada $13,6 eV + 40,8 eV = 54,4 eV$

$$d) r = \frac{n^2}{Z} \cdot a_0 = \frac{1}{2} \cdot 5,29 \cdot 10^{-11} m = 0,2645 \text{ \AA}$$

Exercício 38: (Resolvido como 16 na lista 2015.1): Determine o menor potencial que deve ser aplicado entre o cátodo e o alvo em um tubo de raios X para se observar: a) a linha K_α do molibdênio; b) a linha K_α do cobre e c) a linha L_α do cobre.

$$K_\alpha \Rightarrow E = \frac{3}{4} E_0 (Z - 1)^2 \text{ e } L_\alpha \Rightarrow E = \frac{5}{36} E_0 (Z - 7,4)^2$$

$$a) Z = 42 \Rightarrow E = 17,5 keV \Rightarrow p = 17,5 kV$$

$$b) Z = 28 \Rightarrow E = 8 keV \Rightarrow p = 8 kV$$

$$c) Z = 28 \Rightarrow E = 0,88 keV \Rightarrow p = 0,88 kV$$

Exercício 39: (Resolvido como 17 na lista 2015.1): Determine a energia, o momento e o comprimento de onda de um fóton emitido por um átomo de hidrogênio quando o elétron faz uma transição direta do estado $n = 4$ para o estado fundamental ($n = 1$). b) Obtenha a velocidade de recuo do átomo neste processo.

$$\text{Energia: } E = E_0 \left(1 - \frac{1}{16} \right) = 13,6 eV \frac{15}{16} = 12,75 eV$$

$$\text{Momento: } p = \frac{E}{c} = \frac{12,75 eV \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} J eV^{-1}}{2,9979 \cdot 10^8 m s^{-1}} = 6,8 \cdot 10^{-27} K g m / s$$

$$\text{Comprimento de onda: } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,626076 \cdot 10^{-34} J \cdot s}{6,8 \cdot 10^{-27} K g m / s} = 97 \cdot 10^{-9} m$$

$$b) v = p/m \Rightarrow v = \frac{6,8 \cdot 10^{-27} K g m / s}{1,67 \cdot 10^{-27} K g} = 4,07 m / s$$

Exercício 40: (Resolvido como 19 da lista 2016.3): Um critério aproximado para determinarmos quando a física clássica (newtoniana) pode ser usada é quando o comprimento de onda de de Broglie (λ) é muito menor que alguma dimensão típica (l) do seu experimento. Porém, quando l maior e aproximadamente λ devemos usar física quântica. Considere o elétron no primeiro nível de energia do átomo de hidrogênio.

a) Qual o comprimento de onda do elétron?

b) Qual a razão entre o comprimento de onda e o raio de sua órbita?

c) Baseado no resultado acima, devemos usar física quântica ou clássica para descrevermos o comportamento do elétron no átomo de hidrogênio.

<p>a) $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mc} = \frac{6,629076 \cdot 10^{-34} Js}{9,10929 \cdot 10^{-31} kg \cdot 2,9979 \cdot 10^8 ms^{-1}} = 2,43 \cdot 10^{-12} m$</p> <p>b) $r = \frac{\lambda}{a_0} = \frac{2,43 \cdot 10^{-12} m}{5,29 \cdot 10^{-11} m} = 46 \cdot 10^{-3}$</p> <p>c) Podemos usar aproximações da física clássica.</p>
--

Exercício 41: (Resolvido como 23 na lista 2016.3): O postulado de quantização de Bohr para seu modelo atômico pode ser derivado da hipótese de de Broglie. Considere um elétron no átomo de hidrogênio em uma órbita circular com um raio r qualquer. a) Calcule o momento do elétron em função de seu raio r . b) Calcule seu comprimento de onda (λ) em função de r . c) Se o elétron for considerado como uma onda, esta onda deve estar localizada em sua órbita. Considere que tamanho circular da órbita ($2\pi r$) seja igual a um múltiplo inteiro de λ d) Calcule os valores possíveis de r . Este valor concorda com os valores possíveis obtidos utilizando-se os postulados de Bohr?

<p>a) $p^2 = m_e^2 v^2 = m_e a_c r = m_e^2 \frac{F_e}{m_e} r = m_e \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} r \Rightarrow p = \sqrt{\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}$</p> <p>b) $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}} = \sqrt{\frac{h^2}{\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}} = \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r h^2}{m_e e^2}} = \frac{2\pi r}{n}$</p>

Exercício 42: (Resolvido como 25 na lista 2016.3): Os núcleos atômicos são também sistemas quânticos com níveis de energia discretos. Um estado excitado de um certo núcleo tem uma meia vida de $0,5 \times 10^{-9} s$, aproximadamente. Considerando que este tempo é a incerteza Δt para emissão de um fóton, use a relação $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ para calcular a menor incerteza na frequência, $\Delta \nu$ do fóton emitido. Calcule a incerteza relativa, $\Delta \nu / \nu$, quando o comprimento de onda dos fótons emitidos é $\lambda = 0.01 nm$.

$$E = h\nu \Rightarrow \Delta E = h\Delta\nu \text{ substituindo esta relação na fórmula da incerteza } h\Delta\nu \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \Rightarrow \Delta\nu \geq \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{\Delta t} \Rightarrow \Delta\nu = 1,6 \cdot 10^8 s^{-1}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \frac{\Delta\nu}{\nu} = \Delta\nu \cdot \frac{\lambda}{c} \Rightarrow \frac{\Delta\nu}{\nu} = 1,6 \cdot 10^8 s^{-1} \frac{0,01 \cdot 10^{-9} m}{2,9979 \cdot 10^8 m s^{-1}} = 5,3 \cdot 10^{-12}$$

Exercício 43: (Resolvido como 26 na lista 2016.3): Considere a função de onda:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-ax^2} e^{-ibt}$$

Onde $a = \frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar}$ e $b = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{C}{m}}$ a) Calcule a densidade de probabilidade, $|\Psi|^2$. Esta densidade depende do tempo? Onde esta densidade é máxima? b) Calcule $|A|$ para que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer lugar do espaço seja 1. *Dica :* Use $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\pi/\beta}$ c) A função de onda acima **não** é uma solução da equação de Schroedinger para a partícula livre. Para qual potencial $(V(x))\Psi$ satisfaz a equação de Schroedinger?

$$a) |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = Ae^{-ax^2} \cdot e^{-ibt} \cdot Ae^{-ax^2} \cdot e^{+ibt} = A^2 \cdot e^{-2ax^2}$$

Como observado ao calcularmos a densidade de probabilidade chegamos em uma função que independe do tempo. Para sabermos onde é o ponto máximo basta derivar a função em relação a x e igualar a zero, desta maneira pode-se concluir que o pico se encontra em $x=0$ ou seja, na origem.

b) $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A^2 \cdot e^{-2ax^2} dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx = 1$ assumindo $2a = \beta$ podemos usar a dica e chegar em:

$$A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\sqrt{Cm}}} = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\pi\sqrt{Cm}}} = A^2 \sqrt{\frac{h}{2\sqrt{Cm}}} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\sqrt{\frac{h}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{Cm}}}$$

Exercício 44: (Resolvido como 27 na lista 2016.3): Verifique que a função:

$$\Psi = \begin{cases} A \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar}, & \text{se } -a/2 \leq x \leq a/2, \\ 0, & \text{se } x < -a/2 \text{ ou } x > a/2. \end{cases}$$

é uma solução da equação de Schrödinger na região $-a/2 \leq x \leq a/2$ para uma partícula que se move livremente mas esta confinada nessa região. Determine a energia associada ao estado cuja a função de onda é $\Psi(x, t)$ acima. Encontre a constante de normalização.

Para uma partícula livre podemos assumir que a equação de Schrödinger tem $V(x) = 0$ dentro do intervalo e $V(x) = \infty$ fora do intervalo. Então utilizando a seguinte equação, poderemos verificar qual energia é associada:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Derivando em função do espaço:

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[A \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) e^{-iEt/\hbar} \right] = A e^{-iEt/\hbar} \cdot \frac{4\pi}{a} \cos \left(\frac{4\pi x}{a} \right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = A e^{-iEt/\hbar} \cdot \left(\frac{4\pi}{a} \right)^2 \cdot -\sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) = - \left(\frac{4\pi}{a} \right)^2 \Psi(x, t)$$

Derivando em função do tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left[A \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) e^{-iEt/\hbar} \right] = \frac{-iE}{\hbar} \Psi(x, t)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4\pi}{a} \right)^2 \Psi(x, t) = i\hbar \left(\frac{-iE}{\hbar} \right) \Psi(x, t)$$

simplificando os termos e isolando E chega-se que ele satisfaz a fórmula assumindo a seguinte forma:

$$E = \frac{\hbar^2 16\pi^2}{2ma^2} = \frac{8\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

Para normalizar basta integrar dentro do intervalo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx \int_{-a/2}^{a/2} A^2 \sin^2 \left(\frac{4\pi x}{a} \right) dx A^2 \int_{-a/2}^{a/2} \sin^2 \left(\frac{4\pi x}{a} \right) dx$$

resolvendo está integral chega-se em $A^2(a/2) = 1 \Rightarrow A = \sqrt{2/a}$

Exercício 45: (Questão 1.1 da P1 de 2015.1): Em 1911, Rutherford realizou experimentos para determinar a estrutura de átomos. Ele fez um feixe de partículas α incidir sobre uma folha fina de ouro e mediu os ângulos de deflexão das partículas α , ao atravessarem a folha. O que Rutherford esperava observar? Qual foi o resultado obtido por ele? Que conclusão pode ser tirada deste resultado?

- i - Rutherford esperava observar o espalhamento de partículas por pequenos ângulos.
- ii - Ele obteve espalhamentos por ângulos grandes de deflexão.
- iii - Toda a massa e carga positiva são concentradas em um espaço muito pequeno. (No caso, o núcleo do átomo)

Exercício 46: (Questão 1.2 da P1 de 2015.1): Em 1887, Hertz fez experimentos com fotoelétrons, elétrons ejetados de um material, quando radiação eletromagnética incide nele. Aplicando um potencial elétrico entre o material e um coletor, ele conseguiu medir, se

surgiam ou não fotoelétrons acima de uma certa energia (cinética). Variando frequência e intensidade da luz incidente no material, ele determinou, se existe uma intensidade ou frequência limite, a partir da qual estes elétrons eram detectados. O que Hertz esperava observar? Qual foi o resultado obtido por ele? Que conclusão pode ser tirada deste resultado?

- i - Hertz esperava que a luz esquentasse a placa com uma taxa dependente apenas da intensidade da luz (potência por unidade de área) da luz, e não da sua frequência.
- ii - O potencial de corte (V_0) não depende da intensidade da luz e sim de sua frequência.
- iii - A luz por sua vez é representada por feixes de fótons e que a energia depende de sua frequência.

Exercício 47: (Questão 2.1 da P1 de 2015.1): O íon de hélio, He^+ , consiste de um núcleo de He (que contém 2 prótons) e um único elétron. Partindo do modelo de Bohr compare: os raios, as energias e os momentos angulares das órbitas no íon de He^+ com aqueles do átomo de hidrogênio.

Comparação entre os raios de H e He^+ :

1. Raio do H = Por estarmos tratando do modelo de Bohr o raio do átomo de Hidrogênio será o valor de sua menor órbita, também conhecido com a_0 .
2. Raio do He^+ = Seguindo a fórmula para cálculo do valor relativo a n -ésima órbita de Bohr ($n^2 \cdot \frac{a_0}{Z}$), sendo que $Z = 2, n = 1$ obtemos: $Raio_{He^+} = \frac{1}{2}a_0$ Comparando os dois raios temos: $R_H = a_0$ e $R_{He^+} = \frac{1}{2}a_0$, logo $R_H = 2R_{He^+}$

Comparação entre as energias de H e He^+ :

Para o cálculo da energia temos o postulado de Bohr sobre a energia da n -ésima órbita ($E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0$).

1. Energia do Hidrogênio = A energia que diz respeito a primeira órbita do Hidrogênio trata-se da própria constante presente no postulado de Bohr ($-E_0$), já que tanto $Z = 1$ quanto $n = 1$
2. Energia de He^+ = Considerando $n = 1$ e $Z = 2$ ao substituirmos na fórmula de Energia obtemos: $E_{He^+} = -\frac{2^2}{1^2} \cdot E_0$, logo $E_{He^+} = -4 \cdot E_0$

Comparando as duas energias temos: $E_{He^+} = 4E_H$

Comparação entre os momentos angulares de H e He^+ :

Ainda utilizando um dos postulados de Bohr, temos que o momento angular é representado por $L = n\hbar$ e em nosso caso, tanto o H e He^+ possuem $n = 1$, logo o momento angular de H e He^+ é igual (\hbar).

Exercício 48: (Questão 2.2 da P1 de 2015.1): O íon de lítio duplamente ionizado, Li^{++} ,

consiste de um núcleo de Li (que contém 3 prótons) e um único elétron. Partindo do modelo de Bohr compare: os raios, as energias e os momentos angulares das órbitas no íon de Li^{++} com aqueles do átomo de hidrogênio.

Comparação entre os raios de H e Li^{++} :

1. Raio do H = Por estarmos tratando do modelo de Bohr o raio do átomo de Hidrogênio será o valor de sua menor órbita, também conhecido com a_0 .

2. Raio do Li^{++} = Seguindo a fórmula para cálculo do valor relativo a n-ésima órbita de Bohr ($n^2 \cdot \frac{a_0}{Z}$), sendo que $Z = 3, n = 1$ obtemos: $Raio_{Li^{++}} = \frac{1}{3}a_0$ Comparando os dois raios temos: $R_H = a_0$ e $R_{Li^{++}} = \frac{1}{3}a_0$, logo $R_H = 3R_{Li^{++}}$

Comparação entre as energias de H e Li^{++} :

Para o cálculo da energia temos o postulado de Bohr sobre a energia da n-ésima órbita ($E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0$).

1. Energia do Hidrogênio = A energia que diz respeito a primeira órbita do Hidrogênio trata-se da própria constante presente no postulado de Bohr ($-E_0$), já que tanto $Z = 1$ quanto $n = 1$

2. Energia de He^+ = Considerando $n = 1$ e $Z = 3$ ao substituirmos na fórmula de Energia obtemos: $E_{Li^{++}} = -\frac{3^2}{1^2} \cdot E_0$, logo $E_{Li^{++}} = -9 \cdot E_0$
Comparando as duas energias temos: $E_{Li^{++}} = 9E_H$

Comparação entre os momentos angulares de H e Li^{++} :

Ainda utilizando um dos postulados de Bohr, temos que o momento angular é representado por $L = n\hbar$ e em nosso caso, tanto o $HeLi^{++}$ possuem $n = 1$, logo o momento angular de H e Li^{++} é igual (\hbar).

Exercício 49: (Questão 3.1 da P1 de 2015.1): Em um experimento de difração de elétrons um feixe de elétrons incide em um cristal de Níquel, e produz um padrão de interferência. Qual a velocidade dos elétrons para que os máximos e mínimos no padrão de interferência sejam observados nos mesmos ângulos daqueles observados no experimento feito com raios X de frequência 2×10^{18} Hz.

O pensamento para resolver este exercício consiste em: $\lambda_\nu = \lambda_e$, ou seja o comprimento de onda do fóton igual ao do elétron. Para isso devemos lidar com as seguintes fórmulas

$$\lambda_\nu = \frac{c}{\nu} = c = \frac{\lambda}{T} \nu \text{ (Comprimento de Onda do Fóton)}$$

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v_e} \text{ (Comprimento de Onda do Elétron)}$$

Colocando a velocidade em evidência encontra-se:

$$v = \frac{h}{m_e \lambda} = \frac{h \nu}{m_e c} = \frac{6,626 \times 10^{-34} [Js] 2,0 \times 10^{18} [s^{-1}]}{9,108 \times 10^{-31} [kg] 3,0 \times 10^8 [ms^{-1}]} = 4,85 \times 10^6 \frac{m}{s}$$

Exercício 50: (Questão 3.2 da P1 de 2015.1): Em um experimento de difração de elétrons um feixe de elétrons incide em um cristal de Níquel, e produz um padrão de interferência. Qual a velocidade dos elétrons para que os máximos e mínimos no padrão de interferência sejam observados nos mesmos ângulos daqueles observados no experimento feito com raios X de frequência $1,5 \times 10^{18}$ Hz.

O pensamento para resolver este exercício consiste em: $\lambda_\nu = \lambda_e$, ou seja o comprimento de onda do fóton igual ao do elétron. Para isso devemos lidar com as seguintes fórmulas

$$\lambda_\nu = \frac{c}{\nu} = c = \frac{\lambda}{T} \nu \text{ (Comprimento de Onda do Fóton)}$$

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v_e} \text{ (Comprimento de Onda do Elétron)}$$

Colocando a velocidade em evidência encontra-se:

$$v = \frac{h}{m_e \lambda} = \frac{h \nu}{m_e c} = \frac{6,626 \times 10^{-34} [Js] 1,5 \times 10^{18} [s^{-1}]}{9,108 \times 10^{-31} [kg] 3,0 \times 10^8 [ms^{-1}]} = 3,64 \times 10^6 \frac{m}{s}$$

Exercício 51: (Questão 4.1 da P1 de 2015.1): A função de onda de uma partícula é $\Psi(x) = A \cdot (2x + 3)$ no intervalo $x = 0$ a $x = 1$ e zero fora deste intervalo. Determine a constante para A para que a função Ψ seja normalizada. Qual a probabilidade de encontrar a partícula entre $x = 0$ e $x = 0,5$?

Condição de Normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) dx = 1$.

Em nosso exercício temos: $\int_0^1 |\Psi(x)|^2 dx = 1$, substituindo por nossa função $A \cdot (2x + 3)$, temos:

$\int_0^1 A^2(2x + 3)^2 dx = A^2 \int_0^1 (4x^2 + 12x + 9) dx$ integrando e substituindo encontramos $A^2 = \frac{3}{49} = \sqrt{\frac{3}{49}} = 0,247$, temos então $A = 0,247$.

Agora devemos encontrar o valor de $P(x)$ no intervalo 0 até 0,5 \Rightarrow

$P(x) = \int_0^{0,5} |\Psi|^2 dx = \int_0^{0,5} A^2(2x + 3)^2 dx = 0,247^2 \int_0^{0,5} (4x^2 + 12x + 9) dx$
integrando e substituindo encontramos $P = 0,247^2[0,167 + 4,5 + 1,5] = 0,376$.

Exercício 52: (Questão 4.2 da P1 de 2015.1): A função de onda de uma partícula é $\Psi(x) = A \cdot (x + 5)$ no intervalo $x = 0$ a $x = 1$ e zero fora deste intervalo. Determine a constante para A para que a função Ψ seja normalizada. Qual a probabilidade de encontrar a partícula entre $x = 0$ e $x = 0,5$?

Condição de Normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) dx = 1$, em nosso exercício temos: $\int_0^1 |\Psi(x)|^2 dx = 1$, substituindo por nossa função $A \cdot (x + 5)$, temos: $\int_0^1 A^2(x + 5)^2 dx = A^2 \int_0^1 (x^2 + 10x + 25) dx =$ integrando e substituindo encontramos $A^2 = \frac{3}{91} = \sqrt{\frac{3}{91}} = 0,182$, temos então $A = 0,182$.

Agora devemos encontrar o valor de $P(x)$ no intervalo 0 até 0,5 $P(x) = \int_0^{0,5} |\Psi|^2 dx = \int_0^{0,5} A^2(x + 5)^2 dx = 0,182^2 \int_0^{0,5} (x^2 + 10x + 25) dx$ integrando e substituindo encontramos $P = 0,182^2[0,0417 + 1,25 + 12,5] = 0,456$.

Exercício 53: (Questão 5 da P1 de 2015.1): Considere um elétron do átomo de hidrogênio de Bohr no estado fundamental. Considerando que não é possível determinar a posição e a direção de movimento do elétron na órbita com precisão absolutas, assumo o raio da órbita como a medida de indeterminação de sua posição e o módulo do seu momento linear como a indeterminação do próprio momento. Dica: Não esqueça que, no átomo de Bohr, a velocidade orbital de um elétron é $v = \sqrt{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}}$. Partindo destas condições, calcule o produto das indeterminações na posição e no momento linear do elétron. Comente o resultado.

Para resolver este exercício devemos nos atentar ao enunciado que diz "... Elétron do átomo de Hidrogênio de Bohr no estado fundamental...", com isto podemos considerar $n = 1$ e $Z = 1$, ainda envolvendo o enunciado, podemos assumir $\Delta x = r = a_0$ e $\Delta p = p$.

Considerando ainda a_0 como $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$

Partindo de tais considerações, devemos descobrir o valor de p .

$$p^2 = m_e^2 v^2 = m_e^2 a_c r = m_e^2 \frac{F}{m_e} r = m_e Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Rightarrow p^2 = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = p = \sqrt{\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}.$$

Como dito anteriormente, $\Delta p = p$ e $\Delta x = r$, substituindo no princípio de incerteza temos: $\Delta x \Delta p = r \sqrt{\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}$, considerando r como a_0 e substituindo na equação:

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{m_e e^2 r^2}{4\pi\epsilon_0 r}} = \sqrt{\frac{m_e e^2 r}{4\pi\epsilon_0}}, \text{ substituindo } r \text{ por } a_0, \Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{m_e e^2 4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{4\pi\epsilon_0 m_e e^2}} \text{ cancelando os termos semelhantes encontramos: } \Delta x \Delta p = \sqrt{\hbar^2}, \text{ portanto } \Delta x \Delta p = \hbar.$$

Os exercícios abaixo pertencem a algumas P2's encontradas em sites de vários professores

Exercício 54: (Questão 1 da P2 de 2011): Para a partícula livre, $V(x) = 0$, mostre que $\Psi(x) = A \cdot \sin kx$ satisfaz a Equação de Schrödinger independente do tempo. Quanto é a energia que corresponde a esta solução?

A EDS para uma partícula livre é: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$

$$\Psi' = \frac{d}{dx} (A \sin(kx)) = A k \cos(kx)$$

$$\Psi'' = \frac{d^2}{dx^2} (A \sin(kx)) = -A k^2 \sin(kx) = -k^2 \Psi(x)$$

Substituindo na EDS:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} (-k^2 \Psi(x)) + 0 * \Psi(x) = E \Psi(x) \text{ então é satisfeita para } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Exercício 55: (Questão 2 da P2 de 2011): Faça um desenho do seguinte potencial: $V(x) = 2V_0$ para $x < -a$ e $x > a$, $V(x) = V_0$ para $-a < x < 0$, $V(x) = 0$ para $0 < x < a$. Desenhe também esquematicamente as funções de onda para um estado que tem energia entre 0 e V_0 , para um estado com energia entre V_0 e $2V_0$ e para um estado com energia em cima de $2V_0$.

Para resolver este exercício precisamos entender o que se pede, analisar cuidadosamente os intervalos e aos poucos ir montando o nosso desenho.

Não necessários três passos sendo que assumimos que o leitor entenda como funciona os intervalos dados, porém para aqueles com um pouco de dificuldade deixaremos explícito:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ V_0, & -a < x < 0 \\ 2V_0, & x < -a \quad \text{e} \quad x > a \end{cases}$$

No passo (I) desenhamos os eixos e definimos o intervalo de -a até a;

No passo (II) traçamos em laranja os intervalos para cada potencial;

No terceiro (III) e último passo é necessário desenhar uma linha imaginária (linha em verde) para garantir que a sua função de onda tenha um potencial maior do que o do poço a cada nível, por fim desenha-se a função de onda, para o primeiro nível apenas uma gaussiana, no segundo, temos um pico e um vale acima do poço infinitos picos e vales.

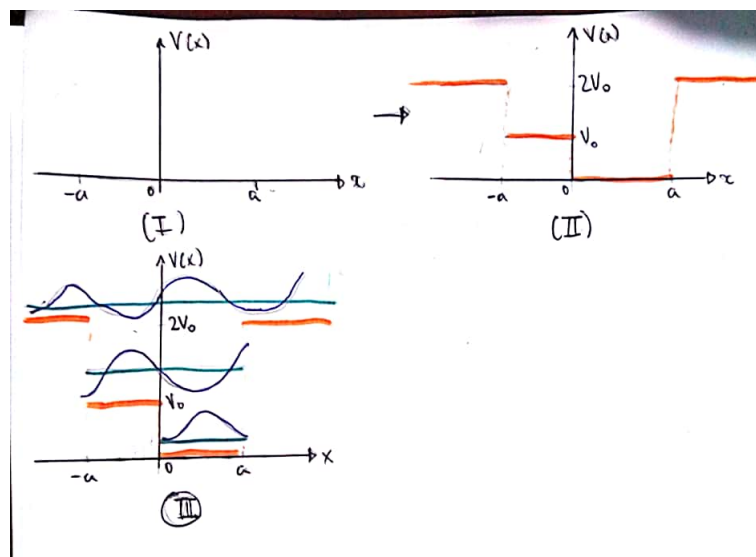


Figura 12.1: Barreira de Potencial

Exercício 56: (Questão 3 da P2 de 2011): Um feixe de 1000 elétrons com energia cinética de 10^{-20} J é lançado rumo a uma barreira de potencial de $2,5 \times 10^{-20}$ J de "altura" e 1 nm de largura. Quantos elétrons passarão a barreira?

A quantidade de elétrons que passa é: $Q_p = Q_t * T$.

Sendo:

Q_p = quantidade de elétrons que passa;

Q_t = quantidade total;

T = Transmissão

$$T = 16 * \frac{E}{V_0} (1 - E/V_0) e^{-2\alpha a} \text{ e } \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Substituindo pelos valores:

$$\alpha = \frac{\sqrt{2 * 9,109 \times 10^{-31} * (2,5 \times 10^{-20} - 10^{-20})}}{1,05457 \times 10^{-34}} = 1,57 \times 10^9, \text{ então:}$$

$$\alpha = 1,57 \times 10^9.$$

$$\text{Calculando } E/V_0 = \frac{10^{-20}}{2,5 \times 10^{-20}} = 0,4$$

Calculando em T:

$$T = 16 * 0,4 * (1 - 0,4) * e^{-2 * 1,57 \times 10^9 * 10^{-9}} =$$

$$T = 3,84 * e^{-3,14} =$$

$$T = 3,84 * 0,04 =$$

$$T = 0,166$$

Multiplicando T por 1000 (número de elétrons que passam pelo feixe), concluímos que **166** elétrons passaram pela barreira de potencial.

Exercício 57: (Questão 4 da P2 de 2011): A função de onda de um elétron no primeiro estado excitado em um poço infinito é $\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$. (a) Qual a probabilidade de encontrá-lo na região $0 < x < \frac{2L}{5}$? (b) Quanto é o momento linear do elétron?

$$\begin{aligned} \text{a) } P(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^{2L/5} \left| \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right|^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^{2L/5} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \\ &= \frac{2}{L} \int_0^{2L/5} \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2 * 2\pi x}{L}\right) \right) dx = \frac{1}{L} * \left(\frac{2L}{5} - \left[\frac{L}{4\pi} \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right) \right]_0^{2L/5} \right) = \\ &= \frac{1}{L} \left(\frac{2L}{5} + 0,0757L \right) = \frac{1}{L} * 0,4757L \approx 0,48 \end{aligned}$$

Exercício 58: (Questão 5 da P2 de 2011): Qual o momento angular orbital de um elétron nos seguintes orbitais: (a) 3d, (b) 4s e (c) 4d?

Dado $\hbar = 1,05457 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Código para $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ corresponde ao s, p, d, f, g, h, ...

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

a) Para 3d temos: $L = \sqrt{2 * (2 + 1)} * \hbar = 2,58 \times 10^{-34} \text{ Js}$

b) Para 4s temos: $L = \sqrt{0 * (0 + 1)} * \hbar = 0$

c) Para 4d temos: $L = \sqrt{2 * (2 + 1)} * \hbar = 2,58 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Exercício 59: (Questão 6 da P2 de 2011): O átomo de gálio tem 31 elétrons, Ga^{31} . (a) Faça a distribuição eletrônica; (b) Quais são os números quânticos do último elétron na distribuição que você acabou de fazer.

a) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^1$

b) $n = 4; l = 1$

Exercício 60: (Questão 2 da P2 de 2015): Para a função de onda de uma partícula com massa m dada por: $\Psi(x) = A * \text{sen}\left(\frac{3\pi x}{L}\right)$ para $0 < x < L$ e $\Psi(x) = 0$ para $x < 0$ e $x > L$, calcule:

a) A constante de normalização A .

b) o valor esperado para energia cinética da partícula.

a) A constante de normalização é dada por $\int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1$

$$\int_0^L \left| A * \text{sen}\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \right|^2 dx = A^2 \int_0^L \text{sen}^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right) dx =$$

$$A^2 * \left[\frac{x}{2} \right]_0^L - \frac{1}{2} \text{sen}\left(\frac{6\pi x}{L}\right) \frac{L}{6\pi} \left[\frac{L}{6\pi} \right] = 1 \Rightarrow A^2 * \frac{1}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

b) $E_k = -\frac{\hbar^2}{2m} * \Psi''(x); (\Psi(x))' = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \right)' \Rightarrow \sqrt{\frac{2}{L}} * \cos\left(\frac{3\pi x}{L} * \frac{3\pi}{L}\right) =$

$$(\Psi(x))'' = -\sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\left(\frac{3\pi x}{L}\right) * \frac{9\pi^2}{L^2} = \frac{-L^2}{9\pi^2} * \Psi(x)$$

$$E_k = \frac{-L^2}{9\pi^2} \Psi(x) \Rightarrow E_k = \frac{\hbar^2}{2m} * \frac{9\pi^2}{L}$$

Exercício 61: (Questão 4 da P2 de 2013): Mostre que a função de onda $\Psi(x) = A_0 * e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ resolve a equação de Schrödinger de uma partícula no potencial do oscilador harmônico, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Qual a energia total da partícula?

Derivado a EDS:

$$\Psi(x)' = A_0 * \left(\frac{-xm\omega}{\hbar} \right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

$$\Psi(x)'' = -A_0 \frac{m\omega}{\hbar} e^{-m\omega x^2/2\hbar} + A_0 * \left(\frac{x^2 m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

$$\text{Ou seja, } \Psi(x)'' = \left(\frac{x^2 m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right) * \Psi(x) - \Psi(x) \frac{\omega m}{\hbar}$$

Encontrando a Energia:

$$E\Psi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{x^2 m^2 \omega^2}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} \right) \Psi(x) + 1/2 m \omega^2 x^2 \Psi(x)$$

$$\text{Simplificando todos os } \Psi \Rightarrow \frac{-1\omega^2 x^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{\omega\hbar}{2} = E \Rightarrow E = \frac{\omega\hbar}{2}$$

Exercício 62: (Questão 4 da P2 de 2015): Um feixe de partículas está se propagando na direção $+x$, vindo de $x = -\infty$, rumo a um degrau de potencial da forma $V(x) = 0$ para $x < 0$ e $V(x) = V_0$ para $x > 0$.

Supondo que a energia das partículas é maior que V_0 , descreva em palavras, sem fórmulas ou cálculos:

- Qual seria o comportamento das partículas segundo a física clássica?
- Qual é o comportamento das partículas segundo a física quântica?

Qual fenômeno na ótica é semelhante?

- O que aconteceria na física clássica: Como $E < V$ todas as partículas seriam refletidas de volta de onde vieram.
- Como acontece na física quântica: Parte das partículas passa.
- Semelhante ao efeito túnel ou tunelamento.

Exercício 63: (Questão 5 da P2 de 2015): A parte radial da função de onda do estado

fundamental do átomo hidrogênio é $R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$. Calcule a distância do elétron até o núcleo, na qual ele tem maior probabilidade de ser encontrado.

Dica: A probabilidade de encontrar o elétron a uma distância r do núcleo é proporcional a $r^2 R^2(r)$.

Vale ressaltar que: $r^2 R^2(r)$ é a probabilidade de encontrar o elétron.

Temos: $r^2 \left(\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \right)^2 = p(r)$

Sabendo que: $p_{max} \Rightarrow p' = 0$

Resolvemos: $r^2 \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} = p(r) \Rightarrow p(r)' = 2r \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} + r^2 \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(\frac{-2}{a_0} \right) = 0$

$2r * R_{10} - \frac{r^2 R_{10} 2}{a_0} \Rightarrow a_0 = r$

Exercício 64: (Questão 2 da P2 de 2014): A função de onda de uma partícula é $\Psi(x) = A \cdot (-x^2 + Lx)$ para $0 < x < L$ e $\Psi(x) = 0$ fora dessa faixa. Supondo que $L = 2\text{nm}$, quanto é a constante A?

$\inf_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 = 1 \Rightarrow \int_0^2 |A(-x^2 + 2x)|^2 dx = A^2 \int_0^2 (x^4 - 4x^3 + 4x^2) dx = 1$

$A^2 \left(\frac{x^5}{5} \Big|_0^2 - \frac{4x^4}{4} \Big|_0^2 + \frac{4x^3}{3} \Big|_0^2 \right) = 1$

$A^2 \left[\frac{3 * 32 - 15 * 16 + 20 * 8}{15} \right] = 1 \Rightarrow A = \frac{\sqrt{15}}{4}$

Exercício 65: (Questão 3 da P2 de 2014): A função de onda de um elétron é $\psi = \sqrt{30} * (x^2 - x)$ para $-1 < x < 0$ e $\psi(x) = 0$ fora dessa faixa.

Qual é o valor esperado para a energia cinética deste elétron?

Dica: O operador energia cinética é o operador sem a parte da energia potencial

$\psi' = \sqrt{30}(-2x + 1); \psi = -2\sqrt{30}$

$\frac{-\hbar^2}{2m} * (-2\sqrt{30}) = E_k * (\sqrt{30} * (-x^2 + x)) \Rightarrow E_k = \frac{\hbar^2}{m(x - x^2)}$

Exercício 66: (Questão 6 da P2 de 2014): O elétron de um átomo de hidrogênio está na subcamada $4p$ e tem $m_l = -1$ e $m_s = +0.5$. Quais são a energia, o momento angular orbital e as componentes z do momento angular orbital e do spin deste elétron?

Energia: $-\frac{1^2}{4^2} * E_0 = -\frac{1}{16} E_0$ (energia)

Momento Angular Orbital: $\sqrt{1 + (1 + 1)} * \hbar = \sqrt{2}\hbar \approx 1,5 \times 10^{-34} J.s$

Componente Z do Momento Angular: Comp Z = $L_z = -1 * \hbar = -1,0546 \times 10^{-34} J.s$;
 $S_z = 1/2\hbar = 0,53 \times 10^{-34} J.s$