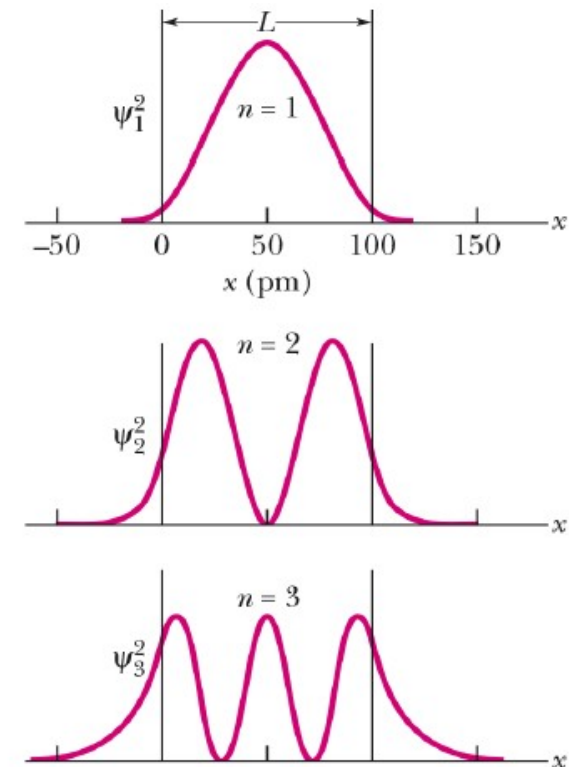
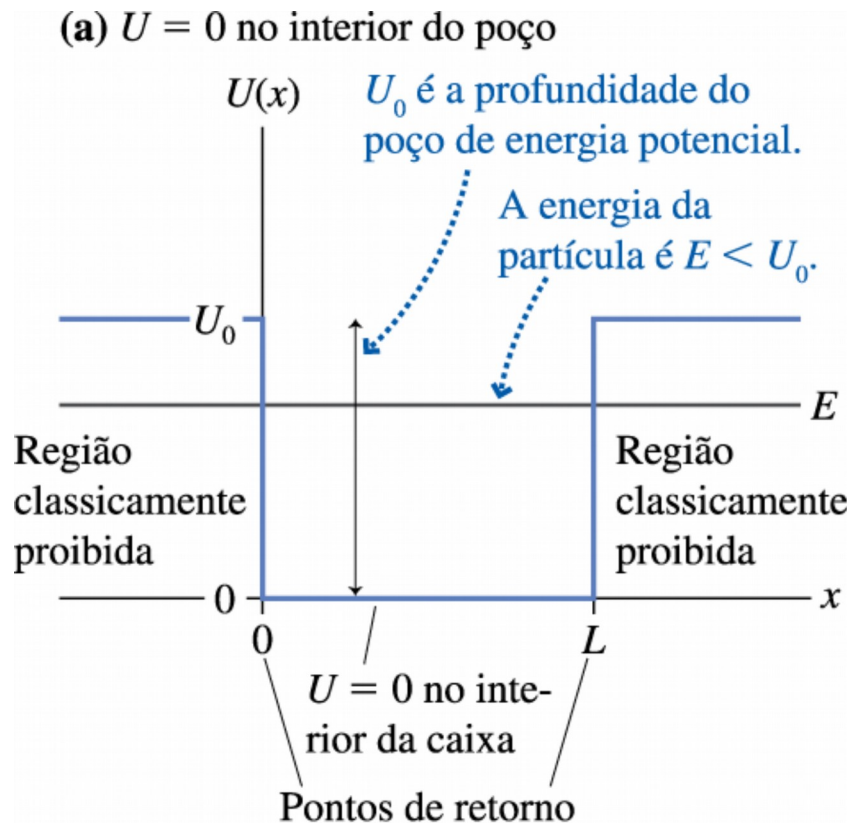


Aula 15 - Poço de Potencial Finito.

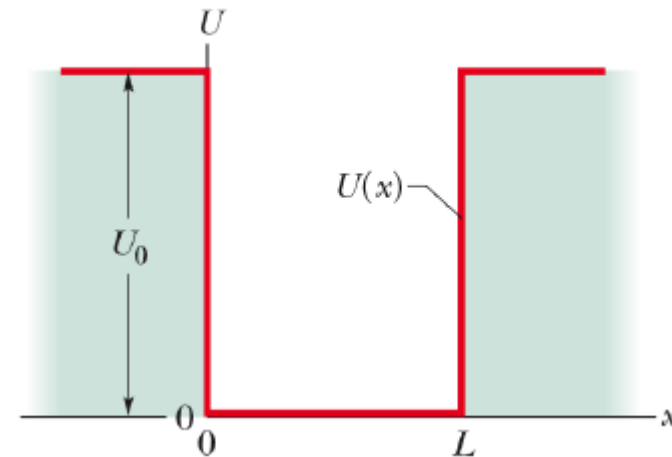
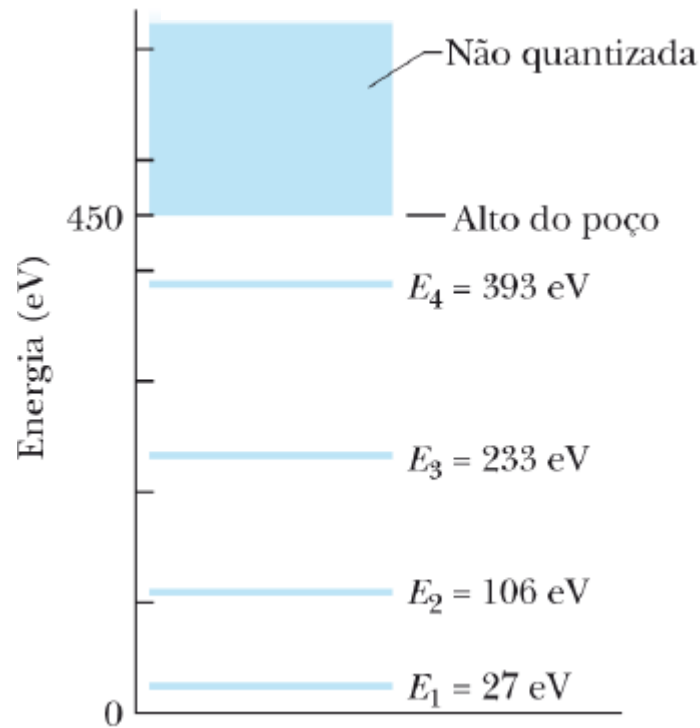
Um modelo mais realista para sistemas de aprisionamento quântico é o poço de potencial **finito**. Apesar de mais realista, é mais difícil de se equacionar, ou seja, resolver matematicamente. A figura abaixo ilustra tal poço, onde a energia potencial é dado por: $U(x) = 0$ para $0 < x < L$ e $U(x) = U_0$ para todo espaço restante.



Densidade de probabilidade $\psi_n^2(x)$ para os três estados de menor energia de um elétron confinado em um poço de potencial finito de profundidade $U_0 = 450$ eV e largura $L = 100$ pm.

Aula 15 - POCO de Potencial Finito.

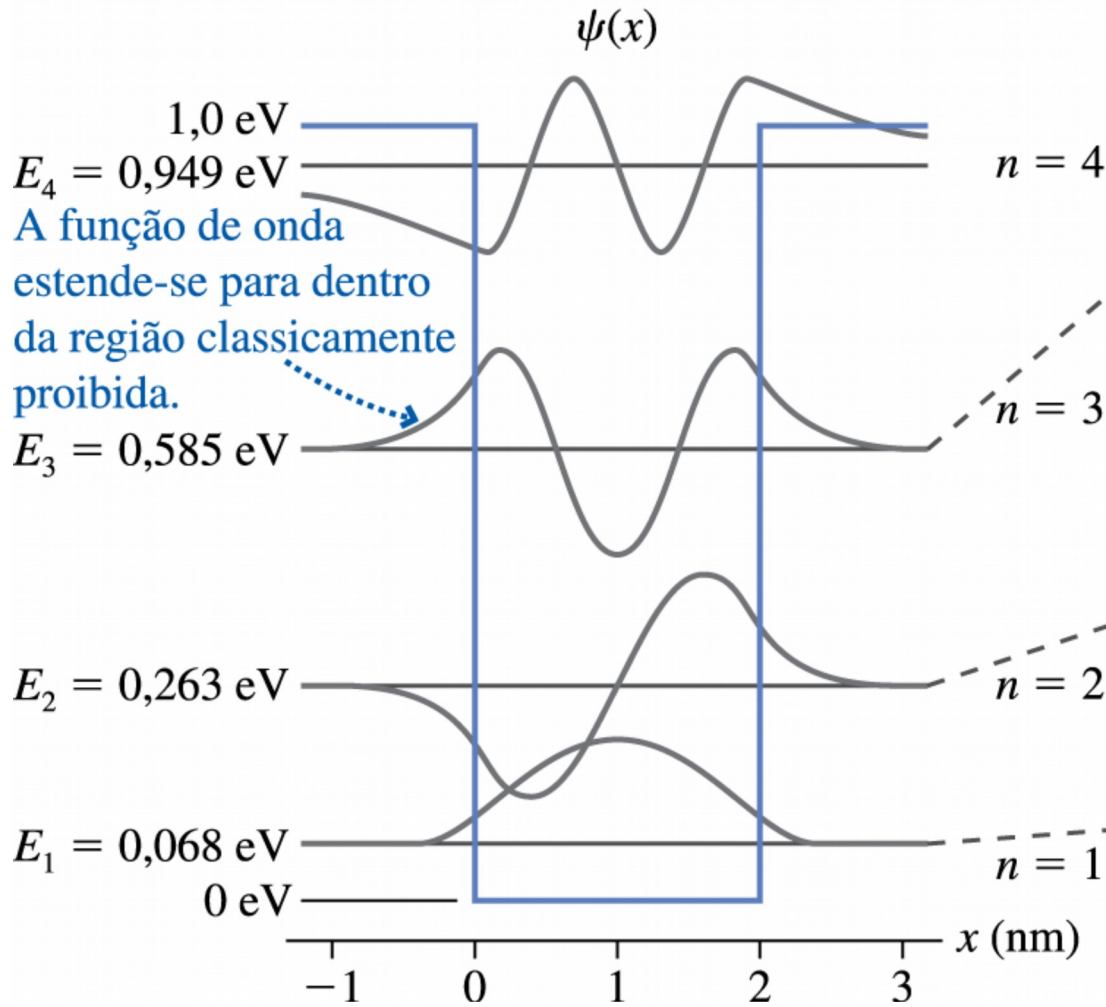
Diagrama de níveis de energia correspondente às densidades de probabilidade do poço finito ao lado. Quando confinado a este poço de potencial finito, um elétron pode possuir apenas as energias correspondentes aos estados $n = 1, 2, 3$ e 4. Um elétron com uma energia maior que 450 eV não está confinado e pode ter qualquer energia.



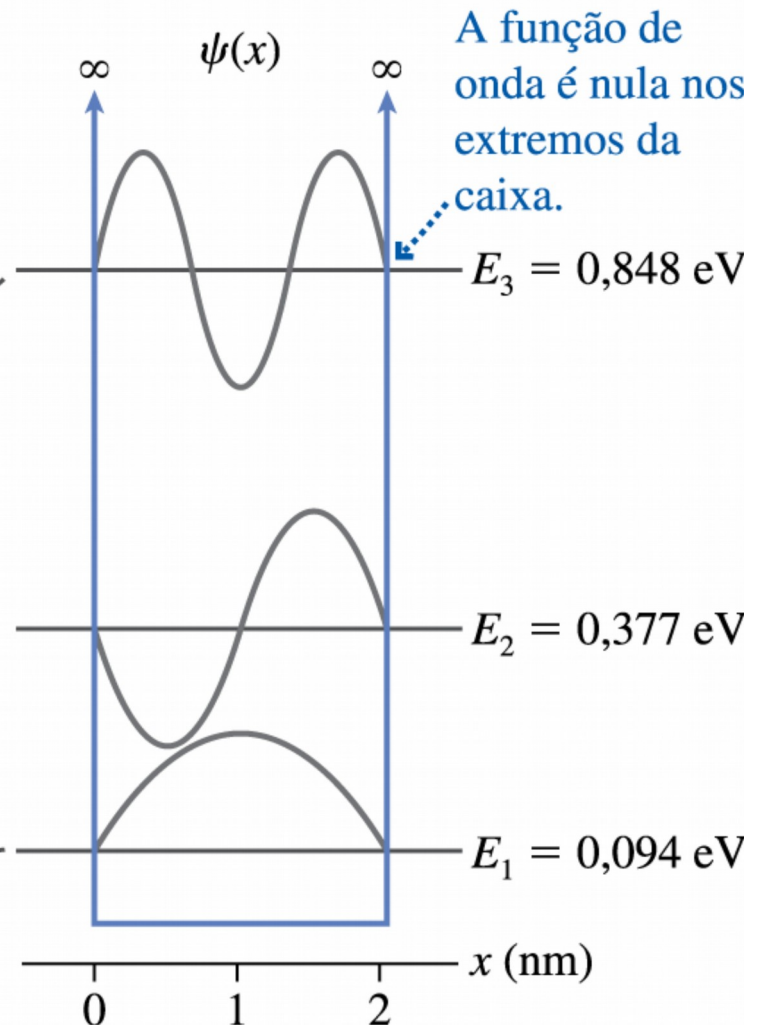
Aula 15 - Poço de Potencial Finito.

Comparando soluções dos poços de potencial Finito e Infinito de mesma largura

(a) Poço de potencial finito

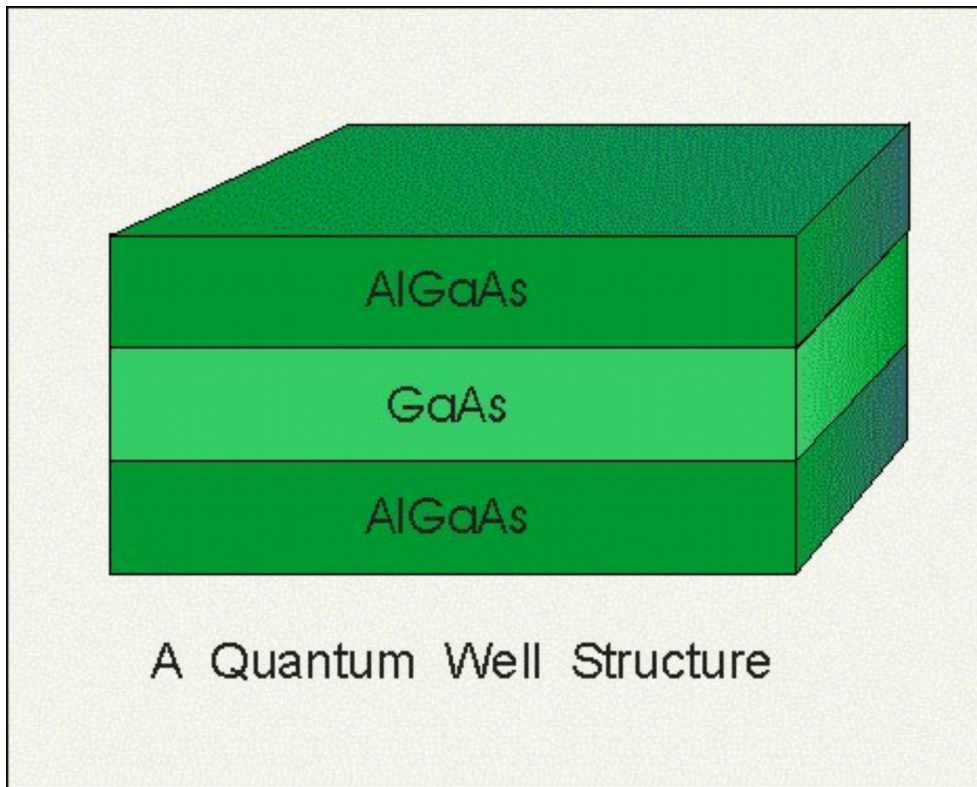


(b) Partícula em uma caixa rígida

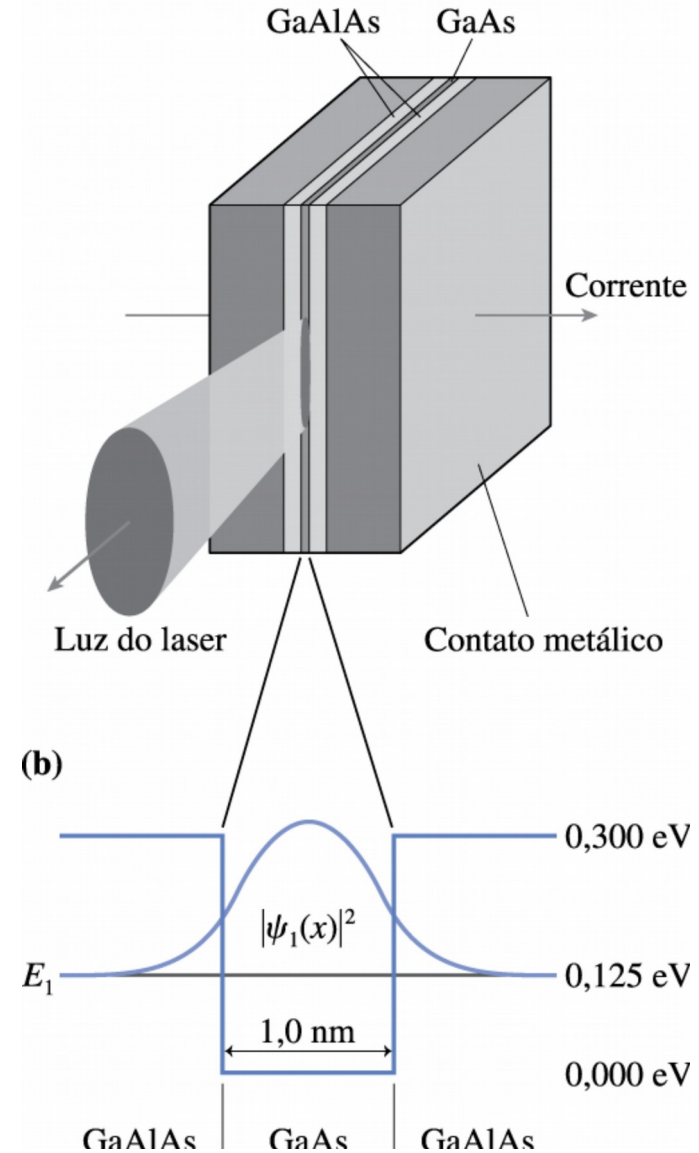


Aula 15 - Poço de Potencial Finito.

Física de materiais: modelo um pouco melhor para um poço quântico

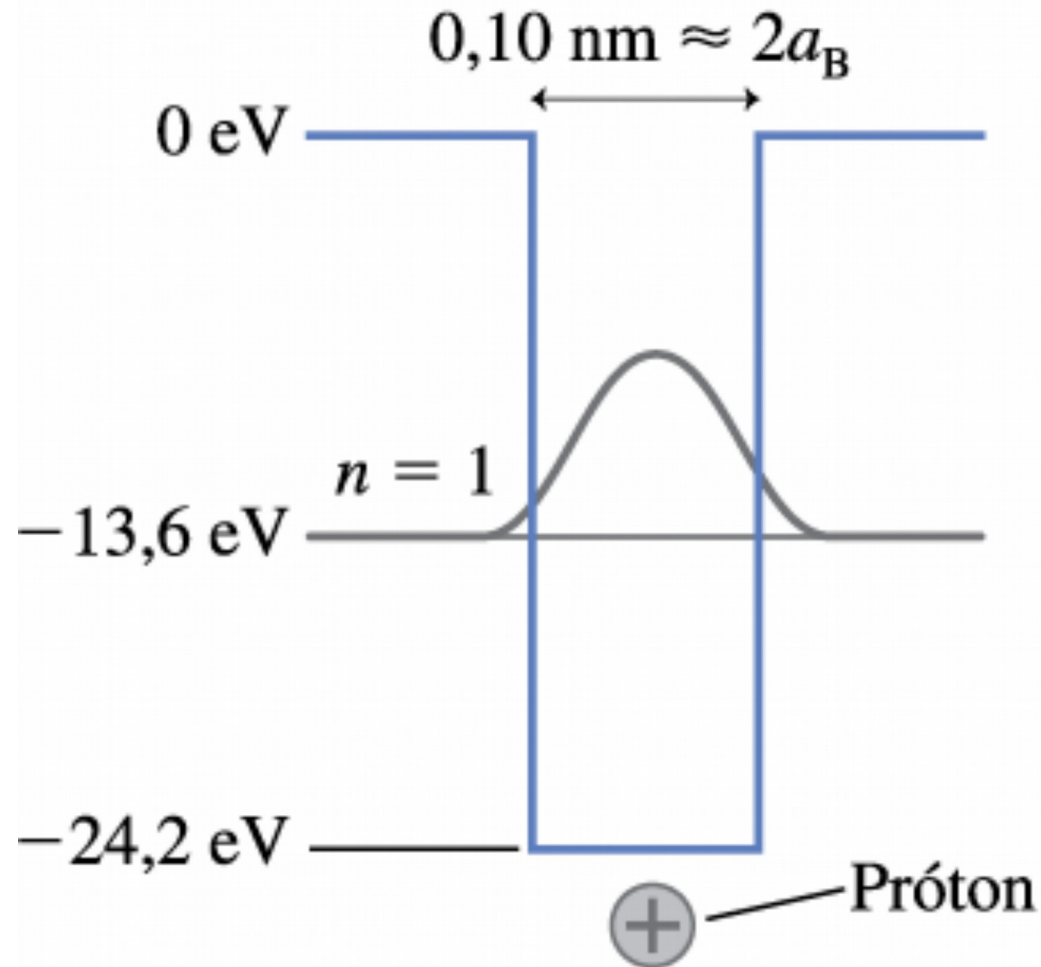


(a) Laser de poço quântico



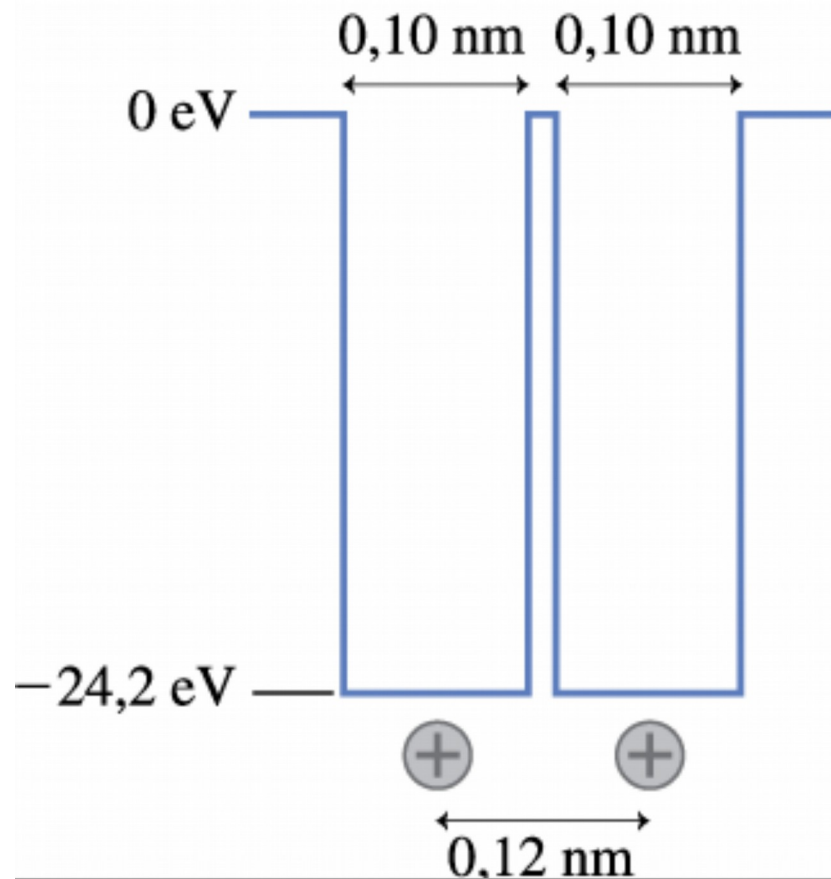
Aula 15 Átomo de Hidrogênio.

(a) Modelo unidimensional simples de um átomo de hidrogênio

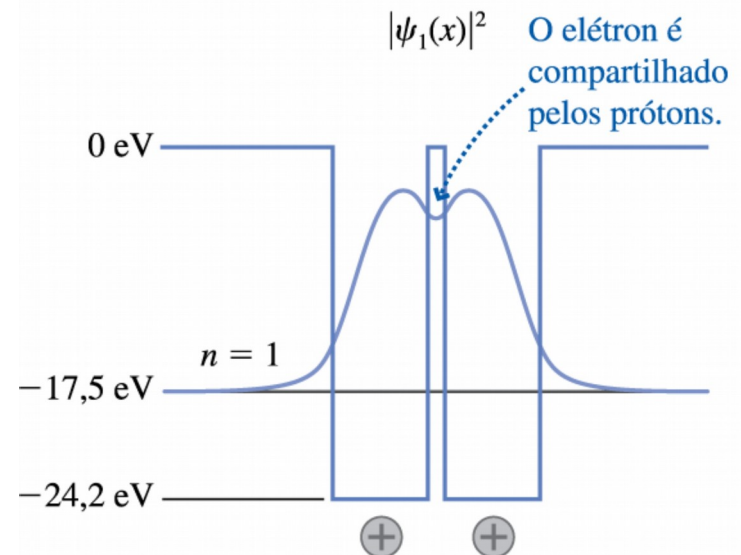
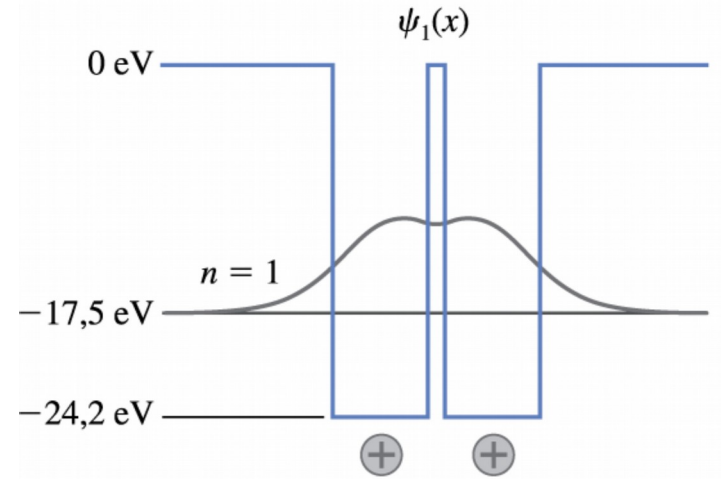


Aula 15 Átomo de Hidrogênio.

(b) Modelo da molécula de H_2^+ considerada como um elétron ligado a dois prótons separados por 0,12 nm

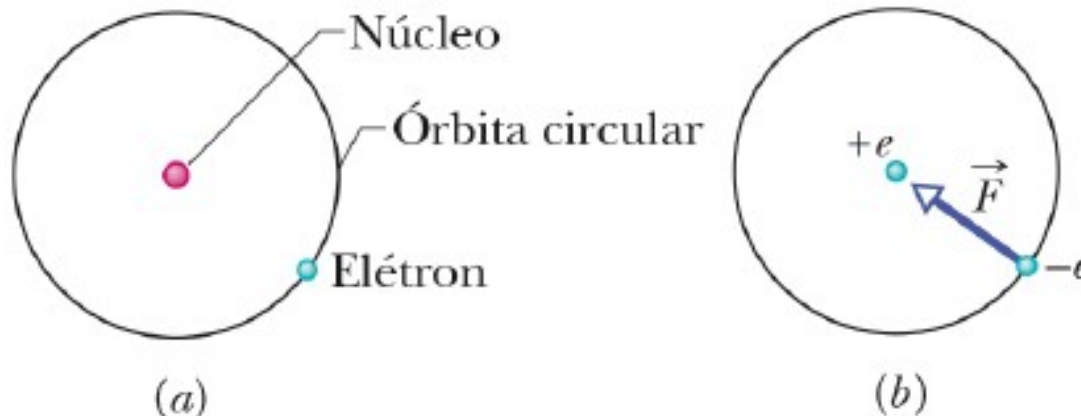


(a) Orbital ligante



Aula 15 Átomo de Bohr revisitado.

Vamos retomar a discussão sobre a estrutura de níveis energéticos dos átomos, inicialmente lembrando o modelo atômico de Rutherford, que sobreviveu a experimentação sobre dispersão e revelou, como o Modelo de Rutherford afirma, que a massa do átomo está concentrada em uma pequena região denominada núcleo (da ordem de 10^{-15} m para o hidrogênio), onde se localiza a carga positiva ligada aos prótons e uma eletrosfera de pequena massa onde orbitam os elétrons cuja dimensão aproximada para o átomo de hidrogênio chega até cerca de 10^{-10} m (10^5 vezes maior que o diâmetro do núcleo citado). Como o núcleo do átomo é um atrator de elétrons, consiste este de uma armadilha natural para o elétron. Vamos restringir doravante ao estudo do átomo mais simples, o hidrogênio. A figura a seguir ilustra aprisionando o no campo de potencial gerado pelos prótons do núcleo.



O modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio lembra o modelo orbital de um planeta girando em torno de uma estrela.

Aula 15 Átomo de Bohr revisitado.

A força elétrica igual a centrípeta nos diz:

$$\frac{-1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{|-e||e|}{r^2} = m \left(\frac{-v^2}{r} \right) \quad (1)$$

Enquanto que a quantização do momento angular nos diz:

$$L = r p = r m v = n \hbar \Rightarrow v = \frac{n \hbar}{r m} \quad (2)$$

Substituindo (2) em (1) vem:

$$r = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2 = a_0 n^2 \quad (3)$$

Onde a_0 é o raio de Bohr do átomo de hidrogênio = $5,2191\ 772 \times 10^{-11}$ m (4)

Como consequência da quantização do momento angular, a energia também será quantizada e sua expressão pode ser obtida como segue:

$$E = U + K = \frac{1}{2} m v^2 + \left(\frac{-1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) = \frac{1}{8 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} - \left(\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) = \frac{-1}{8 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (5)$$

Substituindo a equação 3 na 5 vem:

$$E_n = \frac{-m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad (6)$$

Aula 15 Átomo de Bohr revisitado.

Com

$$E_n = \frac{-me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = 2,180 \times 10^{-18} \text{ J} \frac{1}{n^2} = \frac{-13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (7)$$

Como pelo postulado de Bohr haverá emissão de um Fóton com energia hf quando o elétron transitar de um estado de maior energia E_n para o de menor energia E_m , com $n > m$, teremos:

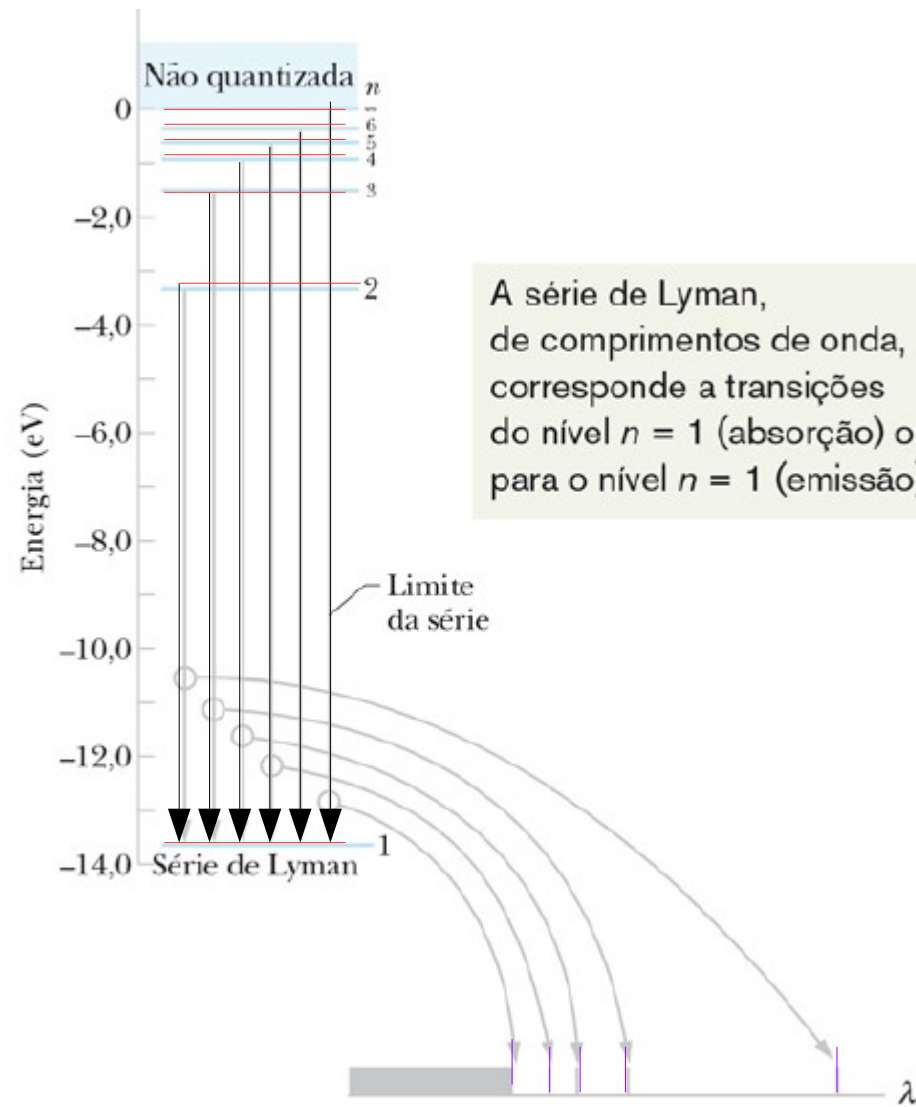
$$hf = \Delta E = E_n - E_m \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (8)$$

Onde R é a constante de Rydberg, $R = 1,097\,373 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ e

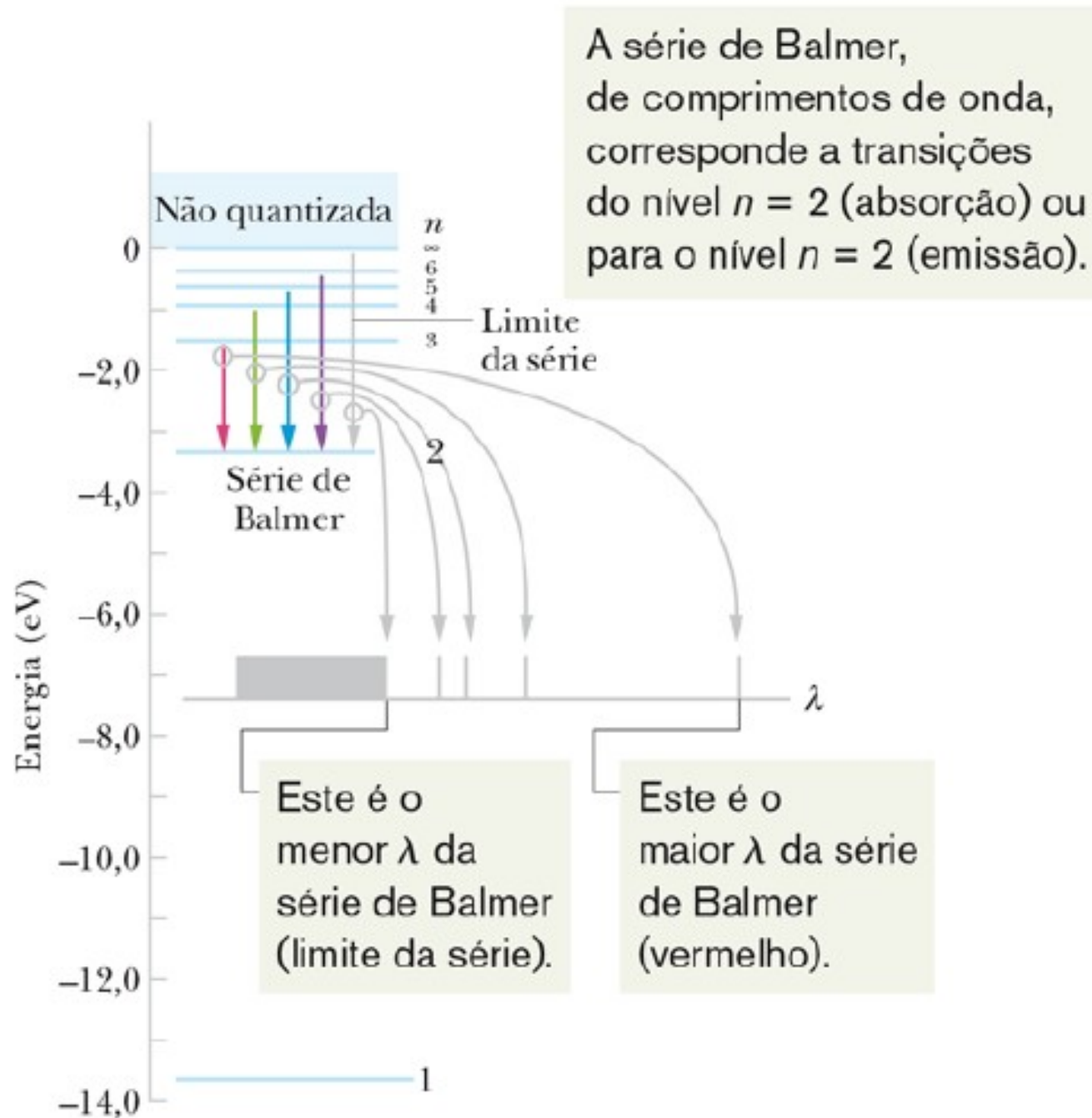
$$\lambda_0 \equiv \frac{1}{R} \simeq 91 \text{ nm}$$

representa um limite!!!! **Que limite é este?**

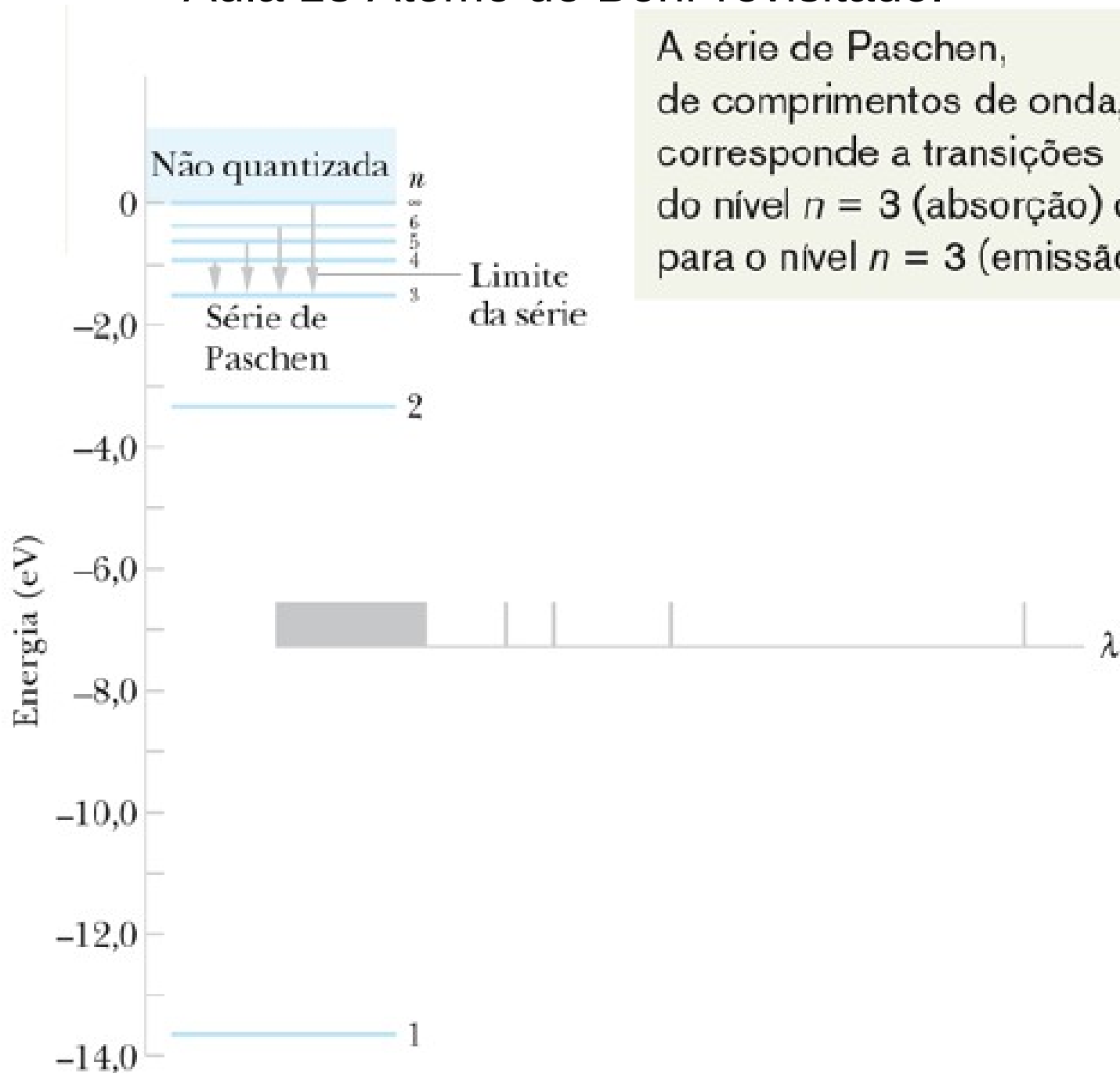
Aula 15 Átomo de Bohr revisitado.



Aula 15 Átomo de Bohr revisitado.



Aula 13 Átomo de Bohr revisitado.

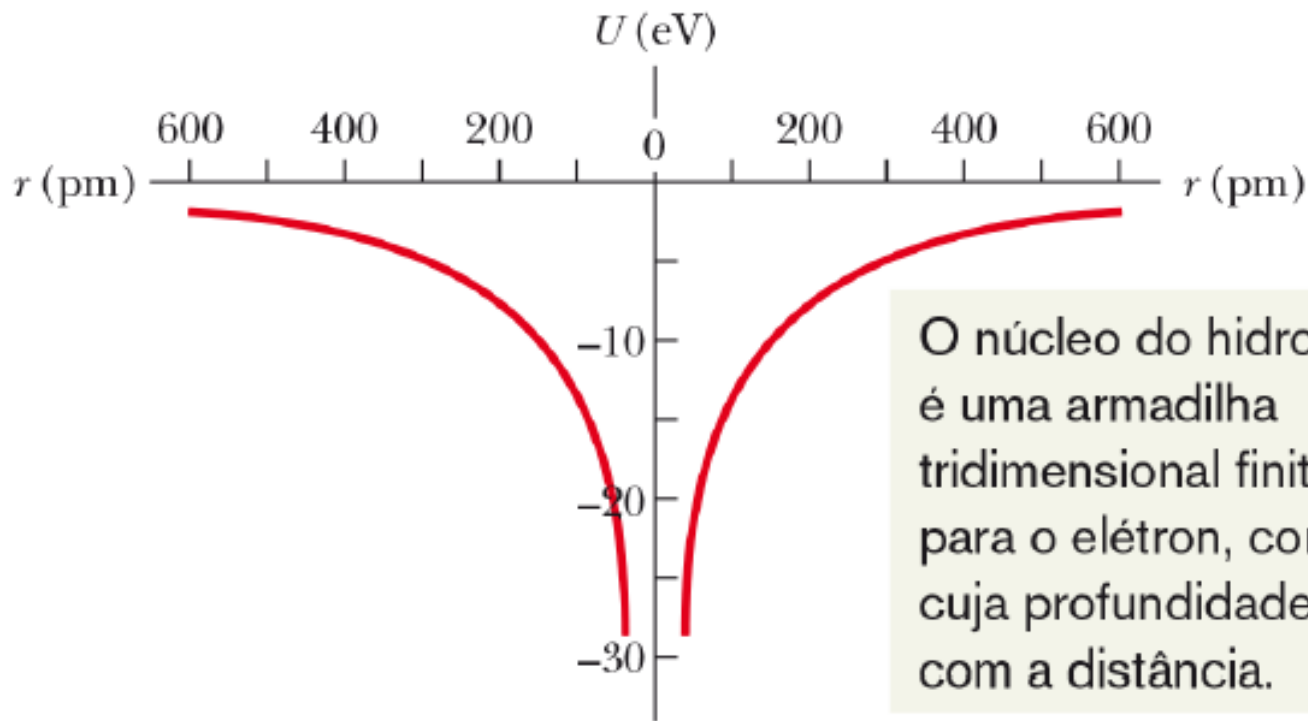


A série de Paschen, de comprimentos de onda, corresponde a transições do nível $n = 3$ (absorção) ou para o nível $n = 3$ (emissão).

Aula 13 A equação de Schrödinger e o Átomo de Bohr..

A energia potencial de um átomo de hidrogênio

$$U(r) = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$



Aula 13.

O Átomo de Hidrogênio

Substituindo na Eq. Schrödinger obtemos 3 equações:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_\ell^2\Phi \quad \text{Equação Azimutal}$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dF}{d\theta} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} \right] F = 0$$

Equação de Colatitude

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Equação Radial

Aula 13 A equação de Schrödinger e o Átomo de Bohr..

A função de onda para o estado fundamental do hidrogênio é dada por:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

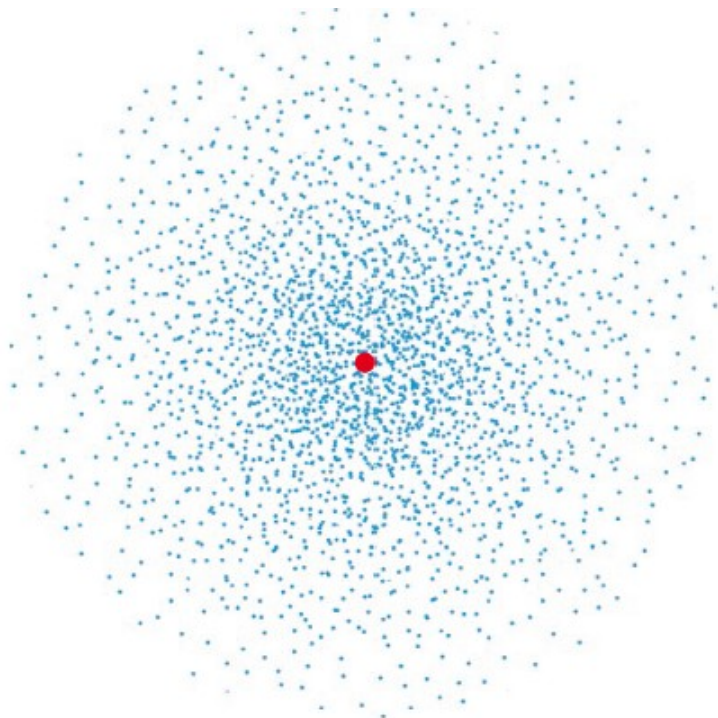
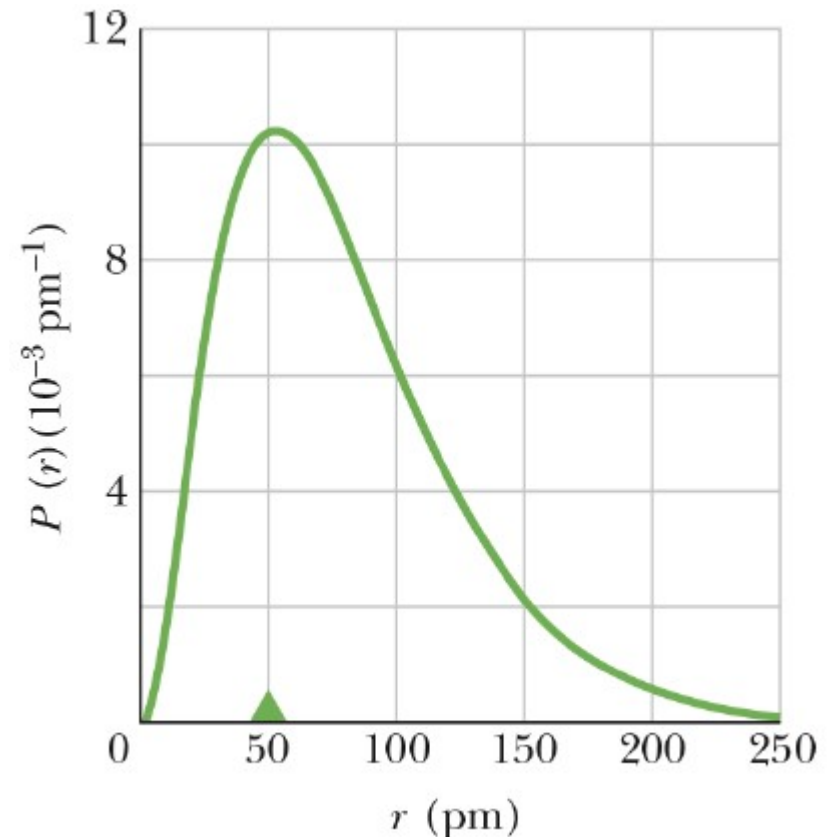


Figura 39-20 Gráfico de pontos que mostra a densidade de probabilidade $\psi^2(r)$ [e não a densidade de probabilidade *radial* $P(r)$] para o estado fundamental do átomo de hidrogênio.

Gráfico da densidade de probabilidade radial $P(r)$ em função de r para o estado fundamental do átomo de hidrogênio.



Aula 15 A equação de Schrödinger e o Átomo de Bohr..

Símbolo	Nome	Valores permitidos
n	Número quântico principal	1, 2, 3, ...
ℓ	Número quântico orbital	0, 1, 2, ..., $n-1$
m_ℓ	Número quântico magnético orbital	$-\ell, -(\ell-1), \dots, +(\ell-1), +\ell$

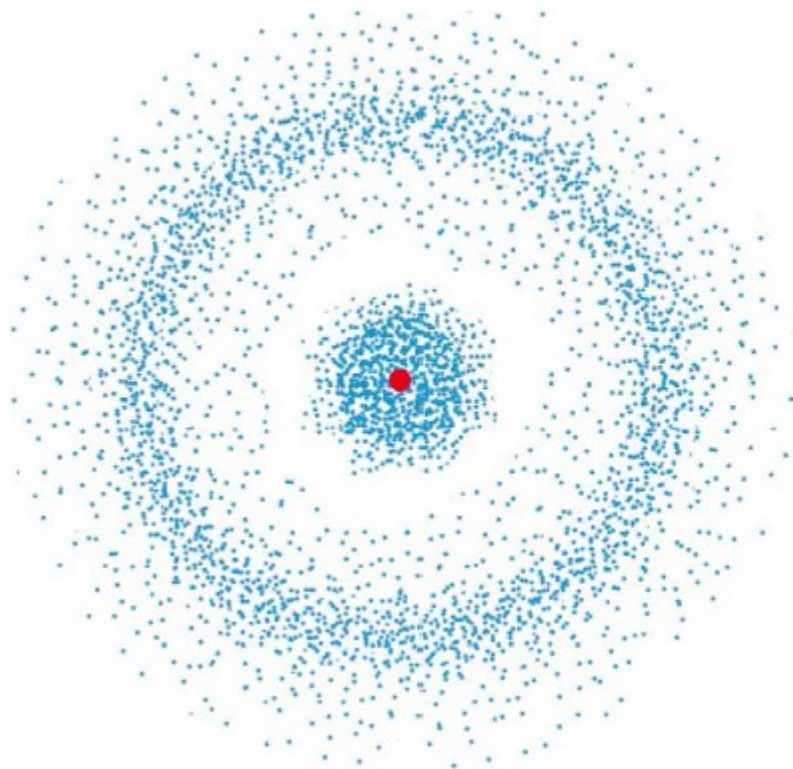
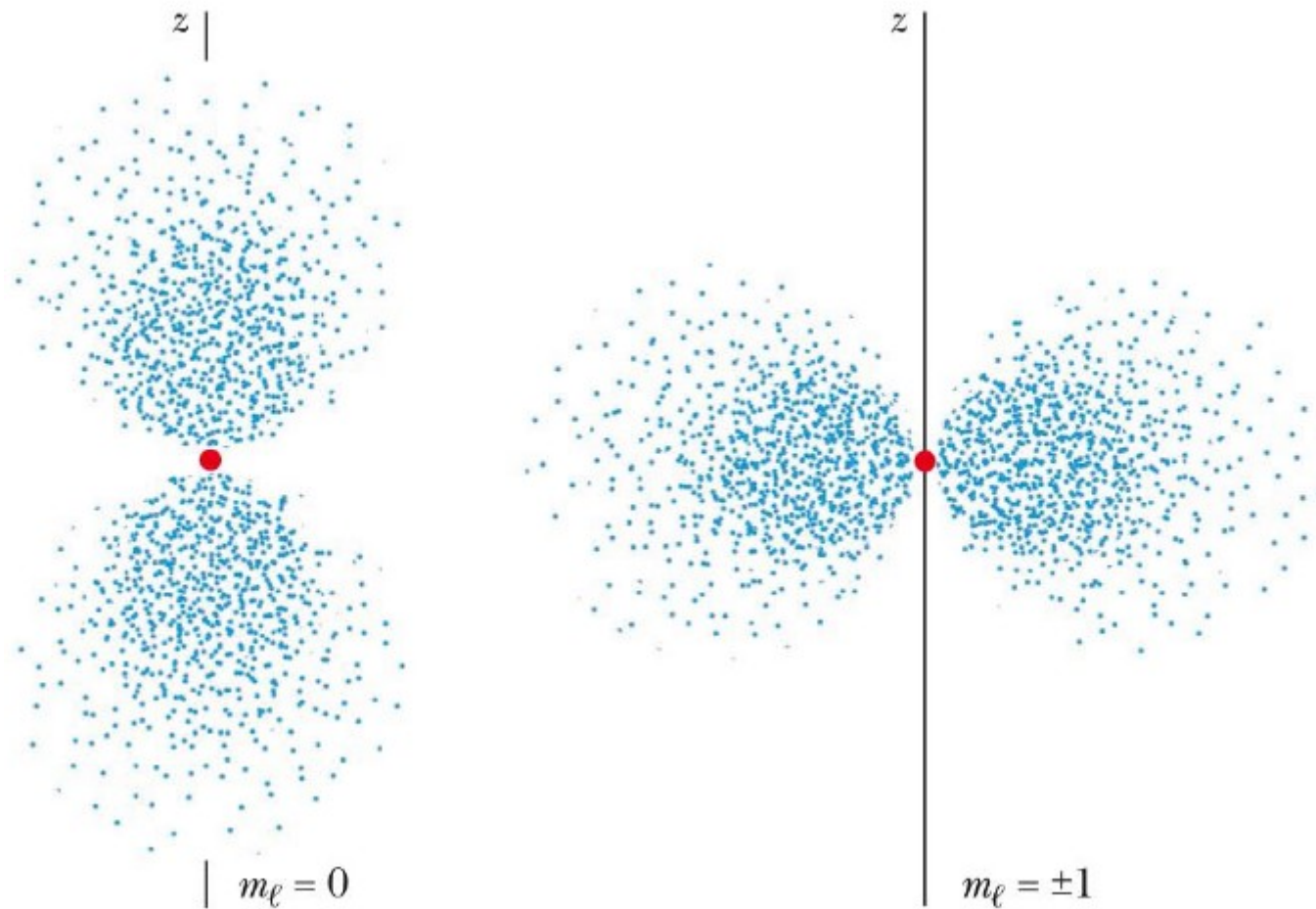


Gráfico de pontos que mostra a densidade de probabilidade $\psi^2(r)$ para o átomo de hidrogênio no estado $n = 2, \ell = 0$ e $m_\ell = 0$. O gráfico apresenta simetria esférica em relação ao núcleo. O espaço vazio entre os dois conjuntos de pontos revela a presença de uma superfície esférica na qual $\psi^2(r) = 0$.

Aula 15 A equação de Schrödinger e o Átomo de Bohr..

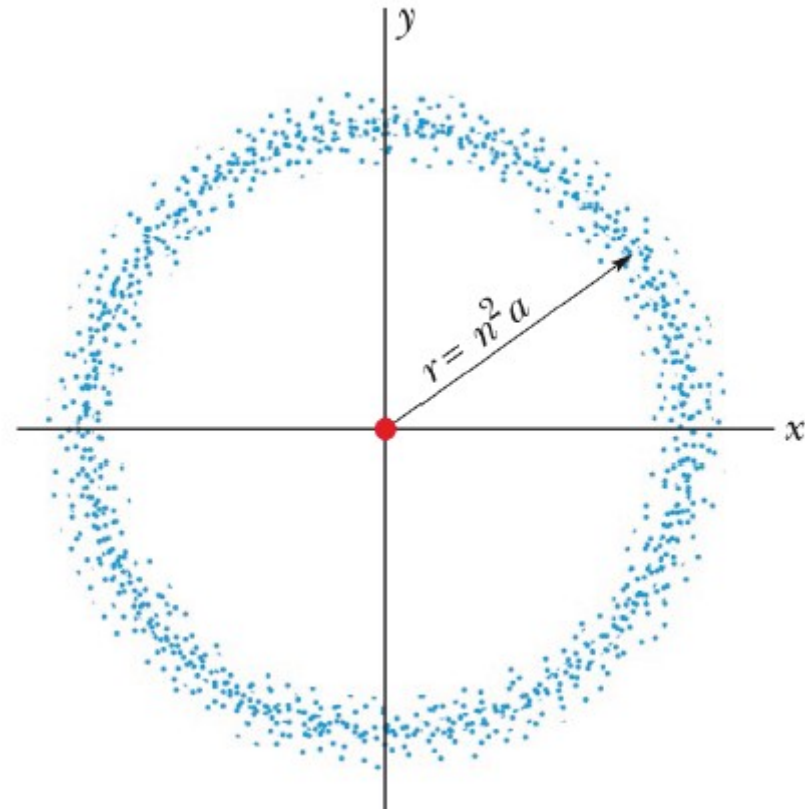
Gráficos de pontos da densidade de probabilidade $\psi^2(r,\theta)$
para o hidrogênio em estados com $n = 2$ e $\ell = 1$.



Aula 15 A equação de Schrödinger e o Átomo de Bohr..

Princípio da correspondência de Bohr diz que: “os resultados da mecânica quântica devem coincidir com os da mecânica clássica para estados com números quânticos muito grandes.”

Gráfico de pontos da densidade de probabilidade radial $P(r)$ para o átomo de hidrogênio em um estado com número quântico principal ($n = 45$) e número quântico de momento angular ($\ell = n - 1 = 44$) relativamente grandes. Os pontos formam um anel, próximo do plano xy , que se parece com uma órbita eletrônica clássica.



Aula 15 Exercícios.

Um elétron é confinado a um poço de potencial unidimensional infinitamente profundo de largura $L = 100 \text{ pm}$.

(a) Qual é a menor energia possível do elétron?

Solução: Fazendo $n = 1$ na equação de energia no poço infinito:

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \Rightarrow \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{(8)(9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(100 \times 10^{-12} \text{ m})^2}$$

$$E_n = 6,031 \times 10^{-18} \text{ J.}$$

$$E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 = (6,031 \times 10^{-18} \text{ J})(1^2) \approx 6,03 \times 10^{-18} \text{ J} = 37,7 \text{ eV.}$$

(b) Qual é a energia que deve ser fornecida ao elétron para que execute um salto quântico do estado fundamental para o segundo estado excitado?

$$\Delta E_{31} = E_3 - E_1 = \Delta E_{31} = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) (3)^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) (1)^2 = \frac{h^2}{8mL^2} (3^2 - 1^2)$$

$$\Delta E_{31} = (6,031 \times 10^{-18} \text{ J})(8) = 4,83 \times 10^{-17} \text{ J} = 301 \text{ eV.}$$

(c) Se o elétron executa o salto quântico do item (b) após absorver luz, qual é o comprimento de onda da luz?

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E_{31}} = \frac{(6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(2,998 \times 10^8 \text{ m/s})}{4,83 \times 10^{-17} \text{ J}} = 4,12 \times 10^{-9} \text{ m.}$$

(d) Depois que o elétron salta para o segundo estado excitado, que comprimentos de onda pode emitir ao voltar para o estado fundamental?

Se o elétron se encontra inicialmente no segundo estado excitado pode chegar ao estado fundamental ($n = 1$) *saltando diretamente* para esse nível ou executando *dois saltos sucessivos*, um do nível $n = 3$ para o nível $n = 2$ e outro do nível $n = 2$ para o nível $n = 1$.

O salto direto envolve a mesma diferença de energia ΔE_{31} que foi calculada no item (c), portanto

$$\lambda = 4,12 \times 10^{-9} \text{ m.}$$

Usando o mesmo método do item (b)

$$\Delta E_{32} = 3,016 \times 10^{-17} \text{ J} \quad \text{e} \quad \Delta E_{21} = 1,809 \times 10^{-17} \text{ J.}$$

o comprimento de onda de $n = 3$ para $n = 2$ é $\lambda = 6,60 \times 10^{-9} \text{ m}$,

e o comprimento de onda de $n = 2$ para $n = 1$ é $\lambda = 1,10 \times 10^{-8} \text{ m}$.