

Questão 1) [2,5] O cálculo da energia do átomo de Hidrogênio resultou na expressão

$$U = -\frac{eK^2}{2r} = -\frac{ke^2}{2r} \quad (\text{correção}).$$

- (a) Qual a origem (física e matemática) do sinal negativo na Equação acima.
(b) Quais tipos de energias foram consideradas para o cálculo da energia do átomo de Hidrogênio?

(a) Trata-se da energia total do átomo de hidrogênio. A energia é uma grandeza física que só tem sentido quando relativa a um valor referencial, pois não pode ser criada, apenas transferida. Desta forma é necessário definir-se um valor referencial, tal que E seja uma variação relativa ao valor previamente definido.

No caso, o raio r corresponde à distância do elétron ao núcleo atômico. Define-se que $E=0$ em $r=\infty$ (definição feita durante a obtenção da expressão $E = -\frac{ke^2}{2r}$). Desta forma,

como trata-se de uma energia que diminui com a proximidade do elétron ao núcleo atômico, então só é possível valores negativos para E . (negativo < zero).

(b) Considera-se um elétron orbitando o núcleo positivo. Portanto as únicas energias envolvidas são a energia potencial elétrica ($E_p = -\frac{ke^2}{r}$) e a energia cinética devido ao movimento orbital ($E_c = \frac{1}{2}mv^2$). onde m = massa do elétron.

Questão 2) [2,5] **(a)** Qual o motivo de existir uma órbita mínima para o elétron menos energético nas proximidades de um núcleo atômico? **(b)** Mostre que a condição utilizada para explicar a letra **(a)** leva ao postulado de Bohr $L = n\hbar$.

(a) Ao redor do núcleo uma órbita de $2\pi r$ deve ser suficiente para conter um número inteiro de comprimentos de onda — no mínimo um (numa visão mais simplória). O fato é que ao resolver-se a equação de Schrödinger, as condições de que órbitas devem seguir condições de contorno contendo ondas estacionárias (de maior estabilidade), levam a valores específicos de orbitais e orbitais. Desta forma, deve existir uma órbita mínima cujo perímetro $2\pi r$ seja suficiente para conter um comprimento de onda, ou seja

$$2\pi r = \lambda.$$

(b) Para uma órbita genérica $2\pi r$, a estabilidade ocorre quando a condição

$$2\pi r = n\lambda$$

é atingida. Portanto, visando verificar a relação $L = n\hbar$ vamos manipular a relação acima no sentido de gerar $L = mvr$.

$$\Rightarrow \begin{array}{l} 2\pi r = n\lambda \\ \underbrace{2\pi r m v}_L = n \underbrace{\lambda m v}_p \end{array} \quad (x \quad m v)$$

$$\text{Mas } p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow 2\pi L = n \cancel{\lambda} \frac{h}{\cancel{\lambda}}$$

$$L = n \frac{h}{2\pi}$$

$$L = n\hbar$$

Questão 3) [2,5] Durante a solução da Equação de Schroedinger da mecânica quântica para o átomo de hidrogênio obtêm-se três números quânticos. **(a)** Qual o passo matemático que leva à necessidade de inserção de constantes das quais resultam nos três números quânticos? **(b)** Qual a grandeza física associada ao número quântico l ? Por exemplo: Se o número quântico l for 2 qual o valor da grandeza física associada?

(a) Trata-se de uma equação diferencial para uma função de quatro variáveis $\Psi(r, \theta, \varphi, t)$. Durante a solução aplica-se a técnica de separação de variáveis;

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) T(t).$$

Procede-se a separação de variáveis levando a um sistema de quatro equações diferenciais dependentes unicamente das respectivas variáveis. Cada separação leva ao surgimento de uma constante de separação, resultando em três constantes:

$$n, l, m_l.$$

(b) O número quântico l é inserido na separação da variável angular θ . Representa, portanto, uma grandeza física que não muda no tempo (constante) e que está associada às variações angulares em θ . A grandeza física a que variações em θ remete, e que deve ser constante no tempo, é o momento angular $\vec{L}$.

$$\text{No exemplo} \rightarrow l=2 \rightarrow L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

$$L = \sqrt{6} \hbar$$

Que é o momento angular total do elétron ao redor do núcleo atômico

Questão 4) [2,5] Calcule: **(a)** A variação de energia do átomo; **(b)** A variação da energia de um fóton e **(c)** o comprimento de onda da radiação emitida; em uma transição do nível inicial $n = 4$ para o nível final $n = 2$ do átomo de Hidrogênio.

Transição $n_i = 4$ para $n_f = 2$:

$$\Delta E_{\text{átomo}} = - 13,6 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) \text{ eV} = - 2,55 \text{ eV}$$

$\Delta E_{\text{átomo}} < 0$ significa que o átomo perdeu energia. Esta energia é emitida na forma de um fóton.

$$\Rightarrow \Delta E_{\text{fóton}} > 0 \quad (\equiv E_{\text{fóton}})$$

$$E_{\text{fóton}} = 2,55 \text{ eV.}$$

$$E_{\text{fóton}} = h \cdot f$$

$$\text{Mas } c = \lambda f \Rightarrow E_{\text{fóton}} = \frac{h c}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h c}{E_{\text{fóton}}}$$

$$\lambda = \frac{6,6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{2,55 \times 1,6 \times 10^{-19}} \cdot \frac{\text{J} \cdot \text{s} \cdot \text{m}}{\text{J}}$$

$$\lambda \simeq 4,85 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$\lambda \simeq 485 \text{ nm}$$