UFES CEUNES

Universidade Federal do Espírito Santo
Prof. Paulo Moscon

Nome:

Matrícula:

1^a Prova de Ciência de Matereiais - 2019/01

OBS:Respostas não justificadas serão desconsideradas.

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

$$U = -\frac{Ke^2}{2r}.$$

(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 velores negativos para E. (negativo < zero).

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

Questão 2) [2,5] **(a)** Calcule o comprimento de onda de *de Broglie* para um elétron acelerado através de uma diferença de potencial $V = 9$ J/C.

Se $V = 9\ J/C$, então o elétron ganhou $9\ \frac{J}{C}$ de energia cinética.

(por Coulomb).

$$\Longrightarrow \frac{1}{2} m v^2 = 9 \times 1{,}6 \times 10^{-19}\ \frac{J}{\cancel{C}} \cdot \cancel{C}$$

A relação de de Broglie é $p = \frac{h}{\lambda} \longrightarrow mv = \frac{h}{\lambda}$

$$\Longrightarrow \frac{1}{2} m v^2 \times m = 9 \times 1{,}6 \times 10^{-19} \times m$$

$$\frac{(mv)^2}{2} = 9 \times 1{,}6 \times 10^{-19} \times 9{,}1 \times 10^{-31}\ J \cdot kg$$

$$\frac{h^2}{2\lambda^2} = 131{,}04 \times 10^{-50}\ J \cdot kg$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \times 131{,}04} \times 10^{-25}} \cdot \frac{1}{J^{1/2}\, kg^{1/2}}$$

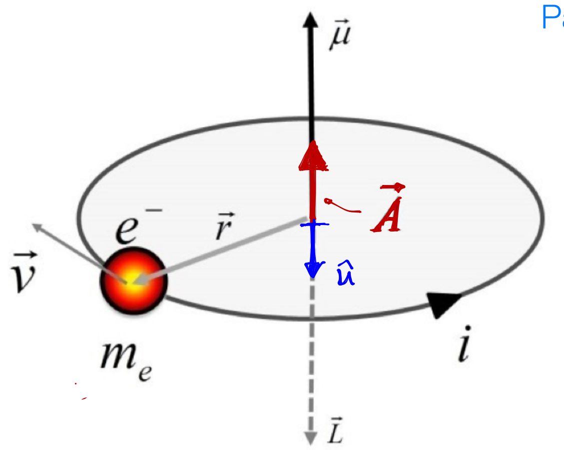
$$\lambda = \frac{6{,}6 \times 10^{-34} \times 10^{25}}{\sqrt{2 \times 131{,}04}} \cdot \frac{J \cdot s}{J^{1/2}\, kg^{1/2}}$$

$$\lambda \simeq 0{,}408 \times 10^{-9}\ \left(\frac{J}{kg}\right)^{1/2} \cdot s$$

$$\longrightarrow \left(\frac{kg}{kg} \cdot \frac{m^2}{s^2}\right)^{1/2} \cdot s = \text{metro}$$

$$\boxed{\lambda \simeq 4{,}08 \times 10^{-10}\ m}$$

Questão 3) [2,5] Considere dados a massa (m), a velocidade (v) e o raio de órbida (r) de um elétron ao redor de um núcleo atômico. Calcule o momento magnético em função do momento angular orbital ($L = mvr$). **OBS:** Considere uma órbita circular.



Momento magnético $\vec{\mu} = i\vec{A}$, onde $\vec{A}$ é definido pela regra da mão direita relativamente ao sentido da corrente elétrica.

$$|\vec{A}| = \pi r^2$$

$$|i| = \frac{e}{T}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{T}\pi r^2 \cdot \hat{u}$$

Quero inserir $L = mvr$

$\Rightarrow$ multiplicar por $\frac{m}{m}$

$\Rightarrow \frac{2\pi r}{T} = v \Rightarrow \frac{\pi r}{T} = \frac{v}{2}$

$$\vec{\mu} = -e\frac{v}{2} \cdot r \cdot \frac{m}{m}\,\hat{u}$$

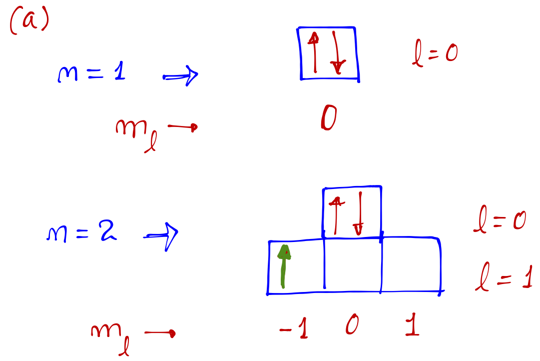
$$\vec{\mu} = -\frac{e\,mvr}{2m}\,\hat{u}$$

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}}$$

pois $mvr\hat{u} = \vec{L}$

Questão 4) [2,5] **(a)** Faça a distribuição eletrônica para o átomo de Boro (5 elétrons). **(b)**O átomo de Boro isolado possui magnetismo de origens orbital e/ou de spin? **(c)** Se sim calcule o seu momento magnético em magnetons de Bohr.

(a)



(b) O átomo ↑ não tem compensações orbital e de spin. Portanto, o átomo isolado possui magnetismo com origem orbital e de Spin.

(c) Orbital: $l = 1 \Rightarrow L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = \sqrt{2}\,\hbar$

Spin: $s = \frac{1}{2} \Rightarrow S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar = \sqrt{3}\,\hbar$

$$\vec{\mu}_{geral} = -\frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{L}_{geral}$$ onde $g = 1$ para orbital e $g = 2$ para spin.

(c) Cálculo dos momentos orbital e de spin de forma independente. (vou aceitar assim).

$$\boxed{|\vec{\mu}_{orbital}| = 1\frac{\mu_B}{\hbar}\sqrt{l(l+1)}\,\hbar = \sqrt{2}\,\mu_B}$$

$$|\vec{\mu}_{spin}| = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\sqrt{s(s+1)}\,\hbar = 2\sqrt{3}\,\mu_B$$

Obs: $\vec{\mu}_{spin_z} = -2\frac{\mu_B}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}\right)\hbar\,\hat{z} = \mu_B\,\hat{z}$

Obs: Para a componente z são 3 possibilidades. A de menor energia ocorre para $m_l = -1$ (PQ?)

$\Rightarrow \vec{\mu}_{orb_z} = -1.\frac{\mu_B}{\hbar}(-1)\hbar\,\hat{z}$

$\vec{\mu}_{orb_z} = \mu_B\,\hat{z}$

No entanto o átomo apresenta esses momentos magnéticos acoplados, produzindo um momento total dado pela soma das duas contribuições. Na próxima página apresento a solução com essas considerações (não cobradas nesta avaliação).

Se existem dois momentos angulares $\vec{L}$ e $\vec{S}$, então o sistema possui um momento angular total $(\equiv \vec{J})$;

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

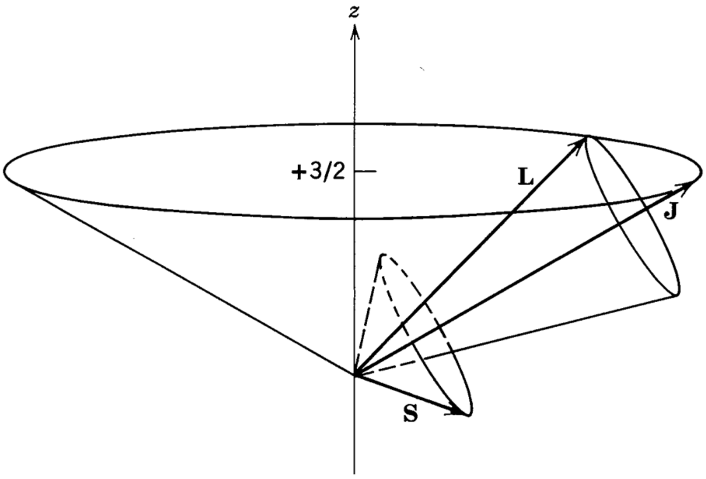


Figure 8-8 The angular momentum vectors **L, S,** and **J** for a typical case of a state with $l = 2$, $j = 5/2$, $m_j = 3/2$. The vectors **L** and **S** precess uniformly about their sum **J,** and **J** can be found anywhere on the cone symmetrical about the *z* axis.

O padrão de $\vec{J}$ é similar;

$$J = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar \qquad \text{onde } J \equiv |\vec{J}|$$

$$J_z = m_j \hbar$$

$$|m_j| \leq j$$

O elétron orbitando um núcleo atômico experimenta um campo magnético pois de seu ponto de vista percebe o núcleo positivo girando ao seu redor

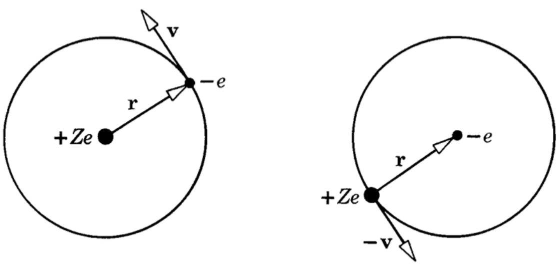
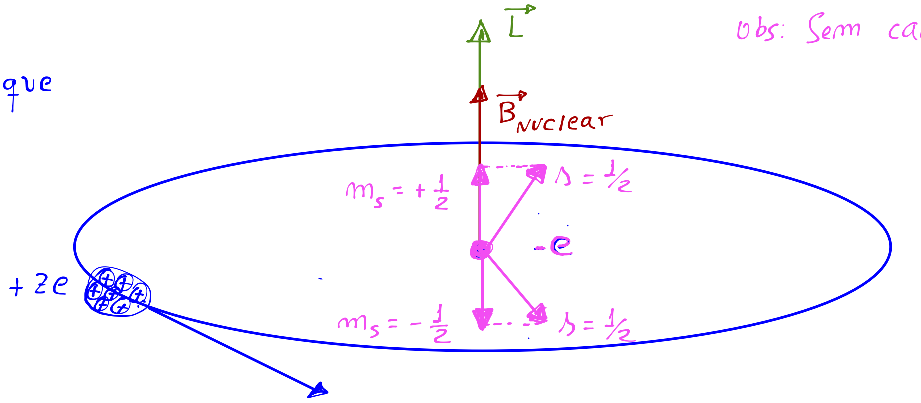


Figure 8-7 *Left:* An electron moves in a circular Bohr orbit, the motion as seen by the nucleus. *Right:* The same motion, but as seen by the electron. From the point of view of the electron, the nucleus moves around it. The magnetic field **B** experienced by the electron is in the direction out of the page at the electron's location.

Desta forma o momento magnético de spin do elétron tende a precessionar em torno do campo magnético gerado pelo núcleo, gerando um acoplamento spin-órbita.

Note que

obs: Sem campo externo



Notar que $J_{z\text{-máximo}} = L_z + S_z$ se S_z é paralelo à L_z.

ou $J_{z\text{-máximo}} = L_z - S_z$ se S_z é antiparalelo à L_z

No caso, para $l = 1$ e $s = \frac{1}{2}$

$$J_{z\text{-máx}} = m_{l\text{-máx}}\,\hbar + \frac{1}{2}\hbar = \left(1 + \frac{1}{2}\right)\hbar = \frac{3}{2}\hbar$$

ou $$J_{z\text{-máx}} = m_{l\text{-máx}}\,\hbar - \frac{1}{2}\hbar = \left(1 - \frac{1}{2}\right)\hbar = \frac{1}{2}\hbar$$

Para o caso de menor energia, relativamente ao acoplamento do momento magnético de spim com o campo magnético nuclear, o spin eletrônico deve ser antiparalelo ao momento angular orbital do elétron, pois assim o $\vec{\mu}_{spim}$ se alinha a $\vec{B}_{nuclear}$.

$\Longrightarrow$ Menor energia para

$J_{z\text{-máx}} = \frac{1}{2}\hbar$ $\qquad$ $m_{j\text{-máx}} = \frac{1}{2}$

Portanto, como $|m_j| \leq j$

$\Longrightarrow j = \frac{1}{2}$

De uma forma geral:

$$\vec{\mu} = -g_l \frac{\mu_\beta}{\hbar}\vec{L} - g_s \frac{\mu_\beta}{\hbar}\vec{S} = -\frac{\mu_\beta}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S})$$

Mas $\vec{L}$ e $\vec{S}$ precessionam em torno de $\vec{J}$

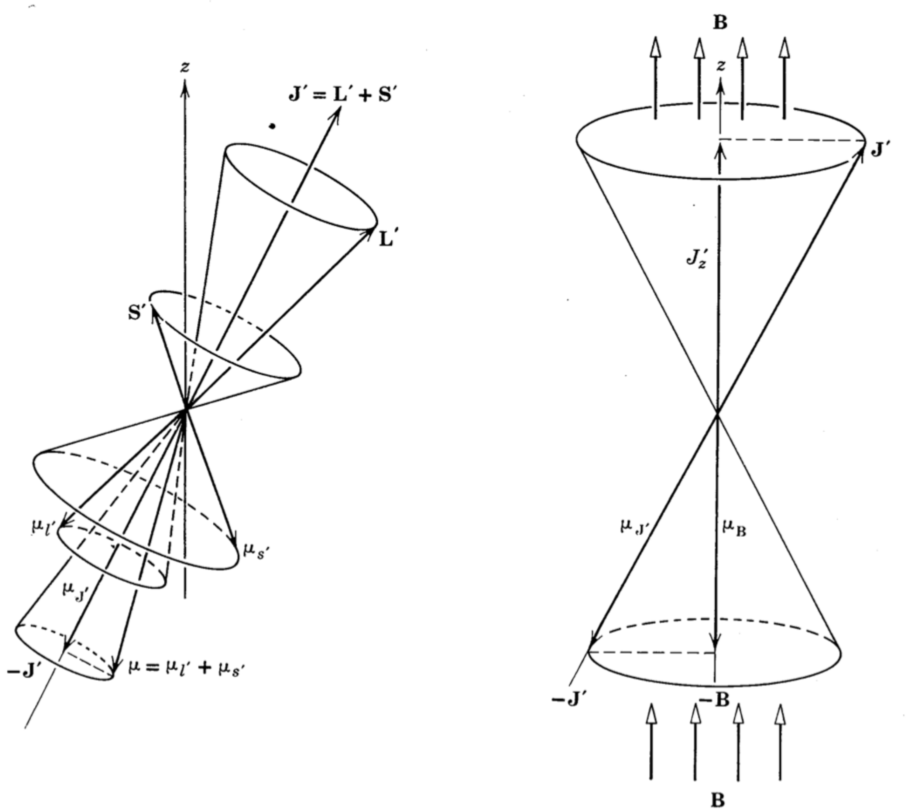


Figure 10-10 *Left:* The total orbital angular momentum **L**′ and total spin **S**′ couple together to form the total angular momentum **J**′ of a typical atom. The total orbital magnetic dipole moment $\boldsymbol{\mu}_{l'}$ and total spin magnetic dipole moment $\boldsymbol{\mu}_{s'}$ similarly couple together to form the total magnetic dipole moment $\boldsymbol{\mu}$. Since the proportionality constant connecting **L**′ and $\boldsymbol{\mu}_{l'}$ is only half the magnitude of the constant connecting **S**′ and $\boldsymbol{\mu}_{s'}$, the total dipole moment will not be exactly antiparallel to **J**′. And since **L**′ and **S**′ precess rapidly about **J**′, $\boldsymbol{\mu}_{l'}$ and $\boldsymbol{\mu}_{s'}$ precess rapidly as well, causing $\boldsymbol{\mu}$ to precess about −**J**′ at the same rate. Thus the component of $\boldsymbol{\mu}$ perpendicular to −**J**′ averages to zero, and the component parallel to −**J**′ remains a constant of magnitude $\mu_{\mathbf{J}'}$. *Right:* In a weak applied magnetic field **B**, a torque is exerted which causes the direction −**J**′, on which $\boldsymbol{\mu}$ has the constant average component $\mu_{\mathbf{J}'}$, to precess about the direction of −**B**. So the average magnitude of this component on the direction of the field has the magnitude $\mu_{\mathbf{B}}$ indicated in the figure.

⇒ Para o caso de menor energia interna: ($\vec{L} \uparrow\downarrow \vec{S}$).

$$|\vec{\mu}_j| = \underbrace{\left| g_l \frac{\mu_\beta}{\hbar} m_l \hbar - g_s \frac{\mu_\beta}{\hbar} m_s \hbar \right|}$$

↳ usar m_l e m_s pois $\vec{\mu}$ é dado pelas precessões de $\vec{L}$ e $\vec{S}$ em torno de $\vec{J}$, ou seja, suas componentes em uma direção específica ($\equiv z$).

$$|\vec{\mu}_j| = \left|\mu_\beta - 2\mu_\beta \cdot \frac{1}{2}\right| = \text{zero} \qquad \longrightarrow \qquad \vec{\mu} = \overrightarrow{\text{zero}}$$

Para o caso mais energético:

$$|\vec{\mu}_j| = \left|\mu_\beta + 2\frac{\mu_\beta}{2}\right| = 3\mu_\beta$$

Sendo $\vec{\mu}_j$ o momento magnético na direção de $\vec{J}$; pode ser considerado total pois $\vec{\mu}$ precessionta em torno de $\vec{J}$ matando a componente perpendicular à $\vec{J}$ (média = zero).