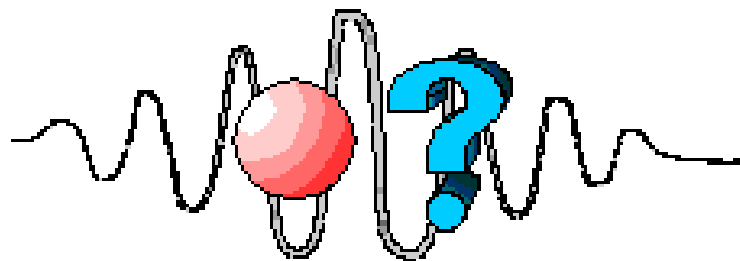


Mecânica Quântica

Fenómenos e aplicações



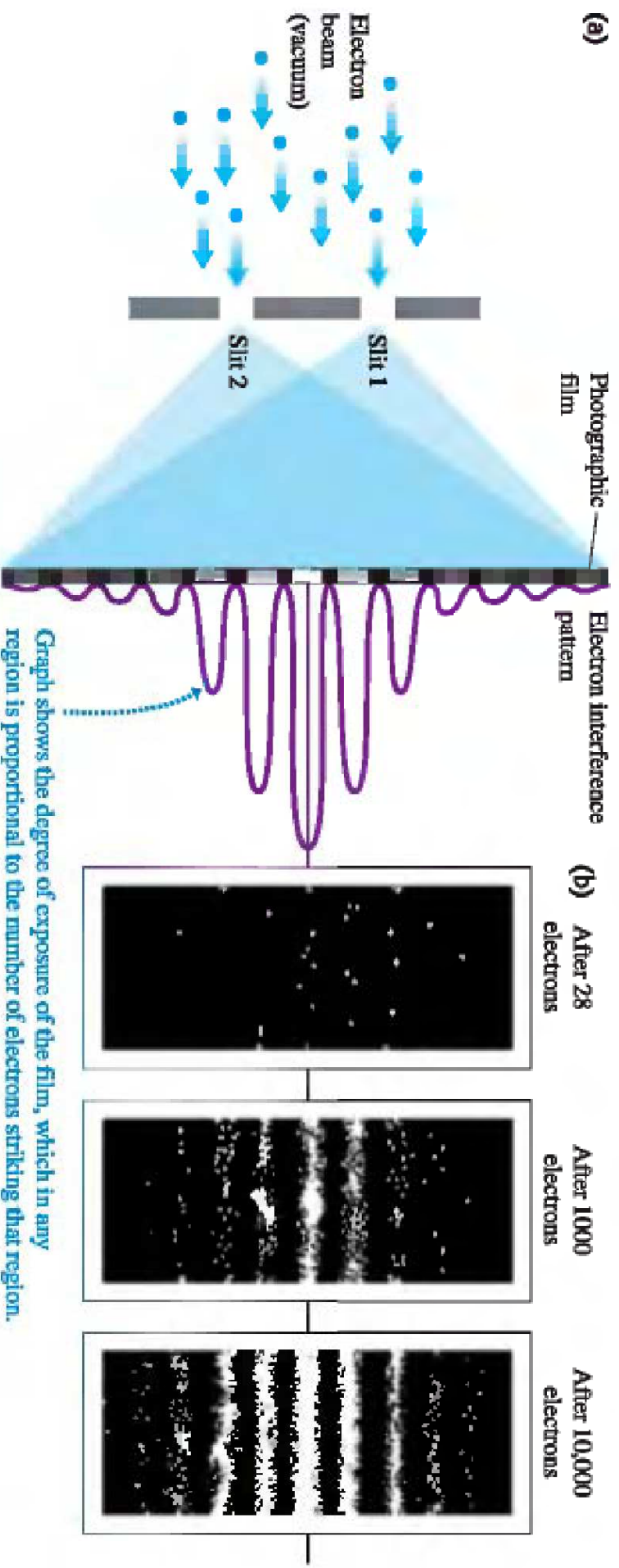
mecânica quântica: teoria físico-matemática que trata da mecânica dos sistemas atômicos e dos problemas com ela relacionados, utilizando só quantidades que podem ser medidas, e que compreende a mecânica ondulatória de E. Schrödinger (físico austríaco, 1887-1961), a mecânica das matrizes de W. Heisenberg (físico alemão, 1901-1976), e a mecânica de P. Dirac (físico inglês, 1902-1984), que é a teoria geral que engloba as duas primeiras;

http://pt.wikipedia.org/wiki/Introdu%C3%A7%C3%A3o_%C3%A0_mec%C3%A2nica_qu%C3%A2ntica

O electrão comporta-se como uma onda

Na experiência da dupla fenda o electrão comporta-se como uma onda

39.9 (a) Formation of an interference pattern for electrons incident on two slits, (b) after 28, 1000, and 10,000 electrons.



Mecânica Quântica

De acordo com a Mecânica Quântica (ou Física Quântica), o estado instantâneo de um sistema (ou partícula) pode ser completamente descrito através de uma função complexa contínua $\Psi(\mathbf{r},t)$, **a função de onda do sistema**.

Esta função de onda $\Psi(\mathbf{r},t)$ satisfaz a uma equação diferencial - a equação de Schrödinger. Isto quer dizer que a função $\Psi(\mathbf{r},t)$ varia no tempo de maneira completamente determinada pela sua forma (valor) no instante anterior, de modo que o seu comportamento é rigorosamente causal.

Isto é: os estados de um sistema são representados por funções de onda $\Psi(\mathbf{r},t)$, que contêm toda a informação «observável» ou «medível» acerca do sistema. Todavia, as funções de onda em si mesmas não têm «significado» físico. Apenas o módulo do quadrado da função de onda $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t)$ tem significado físico!

A função de onda e a equação de Schrödinger

O estado instantâneo de um sistema físico é completamente descrito por uma grandeza complexa (**função de onda**), que satisfaz a uma equação diferencial – a **equação de Schrödinger**.

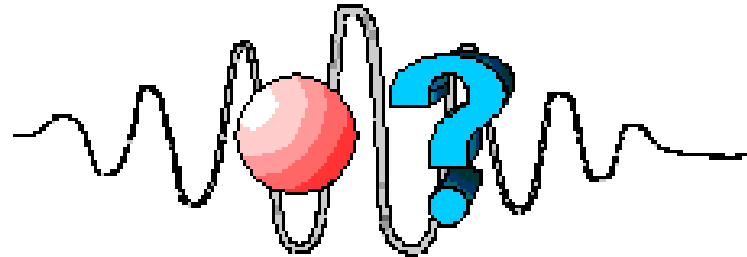
Equação de Schrödinger a 3 D:

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

Equação de Schrödinger a 1 D:

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

“Significado” físico da função de onda



O significado físico está associado ao quadrado do módulo da função de onda $|\psi(r,t)|^2 = \psi(r,t)^* \psi(r,t)$, onde $\psi(r,t)^*$ é o complexo conjugado de $\psi(r,t)$.

$\psi(r,t)^* \psi(r,t)$, representa a densidade de probabilidade de o *sistema estar num dado estado* na posição r e no instante t .

Função de onda de uma partícula livre com energia E

O que é uma partícula livre?

Partícula sujeita a um potencial constante: $U(x, y, z, t) = \text{constante}$

Equação de Schrödinger a 1 D para uma partícula livre

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

*Schrodinger equation for free particle
in one dimension.*

Solução:

Ψ = wavefunction
for electron

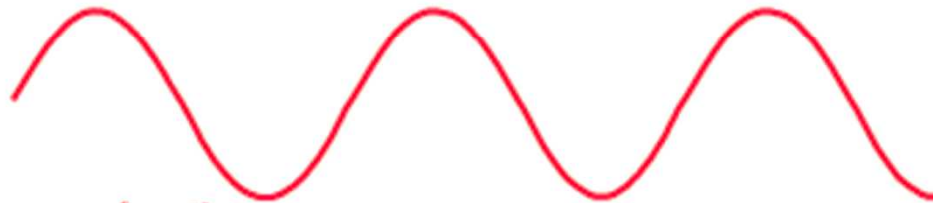
$$\Psi = A \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} x - \omega t\right)$$

Using the deBroglie relationship

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = k \quad p = \text{electron momentum}$$

Using the Planck relationship

$$\omega = \frac{\hbar \omega}{\hbar} = \frac{E}{\hbar} \quad E = \text{electron energy}$$



Função de onda de uma partícula livre



Ψ = wavefunction for electron

$$\Psi = A \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t\right)$$

Using the deBroglie relationship

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = k \quad p = \text{electron momentum}$$

Using the Planck relationship

$$\omega = \frac{h\nu}{h} = \frac{E}{h} \quad E = \text{electron energy}$$

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \xleftarrow{\text{particle}} E \xrightarrow{\text{wave}} h\nu = \hbar\omega$$

Propriedades da função de onda

De forma a poder representar um sistema físico observável, a função $\Psi(r,t)$ deve ser:

- i) uma função contínua, com primeiras derivadas contínuas;
- ii) deve ser uma solução da equação de Schrödinger;
- iii) ser normalizável, o que implica que o *valor* da função deve tender para zero à medida que a posição r tende para infinito. Ter presente que o espaço e o tempo são considerados como contínuos, isto é, a posição e o tempo são grandezas contínuas.

Para os estados estacionários, estado em que energia não depende do tempo, a probabilidade também não é função do tempo e a função de onda pode ser escrita como o produto de duas funções, uma dependente apenas das coordenadas espaciais e outra dependente do tempo.

Função de onda: significado físico

O significado físico está associado ao quadrado do módulo da função de onda $|\psi(\mathbf{r},t)|^2 = \psi(\mathbf{r},t)^* \psi(\mathbf{r},t)$, onde $\psi(\mathbf{r},t)^*$ é o complexo conjugado de $\psi(\mathbf{r},t)$: $\psi(\mathbf{r},t)^* \psi(\mathbf{r},t)$, representa a densidade de probabilidade de *o sistema estar* num dado *estado* na posição $\mathbf{r}$ e no instante t .

A probabilidade de *o sistema estar* num dado *estado* na região entre $\mathbf{r}$ e $\mathbf{r}+d\mathbf{r}$, no instante t , é dada por $|\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r}$. Esta interpretação é equivalente à intensidade de uma onda electromagnética, que é proporcional ao módulo do quadrado da amplitude do campo eléctrico.

Ter presente que a soma das probabilidade de o sistema ocupar todos os estados possíveis é igual a 1, isto é, $\int \psi(\mathbf{r},t)^* \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 1$. As funções de onda que satisfazem a relação anterior dizem-se normalizadas. Se a função não for normalizada, i.e., se $\int \psi(\mathbf{r},t)^* \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = C \neq 1$, com C finito, a função fica normalizada se se dividir $\psi(\mathbf{r},t)$ por $\sqrt{C}$.

Interpretação de Copenhagen

A **Interpretação de Copenhagen**, desenvolvida por Niels Bohr e Werner Heisenberg, pode ser resumida em três ideias fundamentais:

- i) os resultados da mecânica quântica são indeterminísticos;
- ii) a Física é a ciência dos resultados de processos de medida;
- iii) o acto de observar provoca o "**colapso da função de onda**", o que significa que, embora antes da medição o estado do sistema permitisse muitas *possibilidades*, apenas uma delas é escolhida *aleatoriamente* pelo processo de medição, e a função de onda modifica-se instantaneamente para reflectir essa escolha.

Nota: Há interpretações menos *populares*, ex., a de Bohm.)

Estados estacionários

Para os **estados estacionários**, estados em que energia não depende do tempo, a probabilidade do sistema estar num desses estados também não é função do tempo e a função de onda pode ser escrita como o produto de duas funções, uma dependente apenas das coordenadas espaciais e outra dependente do tempo:

$$\Psi(x, y, z, t) = \phi(x, y, z)\phi(t) = \phi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar},$$

$$\text{com } \phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad e \quad i = \sqrt{-1}$$

E : representa a energia do estado

Equação de Schrödinger independente do tempo

O estado instantâneo de um sistema físico é completamente descrito por uma grandeza complexa (**função de onda**), que satisfaz a uma equação diferencial – a **equação de Schrödinger**:

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

Se o potencial não depender do tempo pode escrever-se:

$$\Psi(x, y, z, t) = \phi(x, y, z)\phi(t) = \phi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar},$$

Obtendo-se a equação de **Schrödinger independente do tempo**

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

Questões filosóficas criadas pela Mecânica Quântica

o acto de observar provoca o "colapso da função de onda", o que significa que, embora antes da medição o estado do sistema permitisse muitas possibilidades, apenas uma delas é escolhida aleatoriamente pelo processo de medição, e a função de onda modifica-se instantaneamente para reflectir essa escolha.

http://pt.wikipedia.org/wiki/Richard_Feynman

Quantum mechanical quotes

<http://phys.wordpress.com/2006/06/09/quantum-mechanical-quotes/>

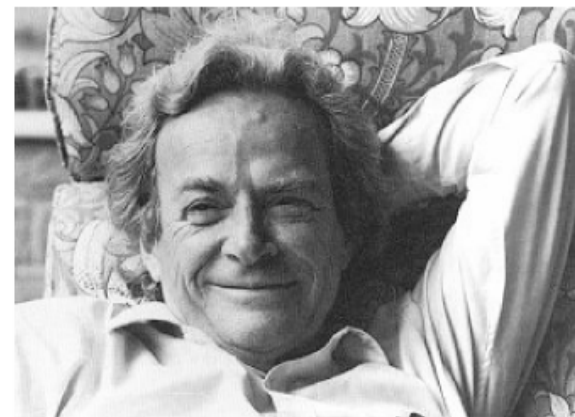
“Será que a Lua está lá quando não olhamos para ela?”*

(Einstein, ~1950).

**Ver Is the moon there when nobody looks? Reality and the quantum theory, N. David Mermin, PHYSICS TODAY, APRIL 1985, PAG. 38-47*

“Einstein maintained that quantum metaphysics entails spooky actions at a distance; experiments have now shown that what bothered Einstein is not a debatable point but the observed behaviour of the real world.”

<http://www.iafe.uba.ar/e2e/phys230/history/moon.pdf>



Richard Feynman

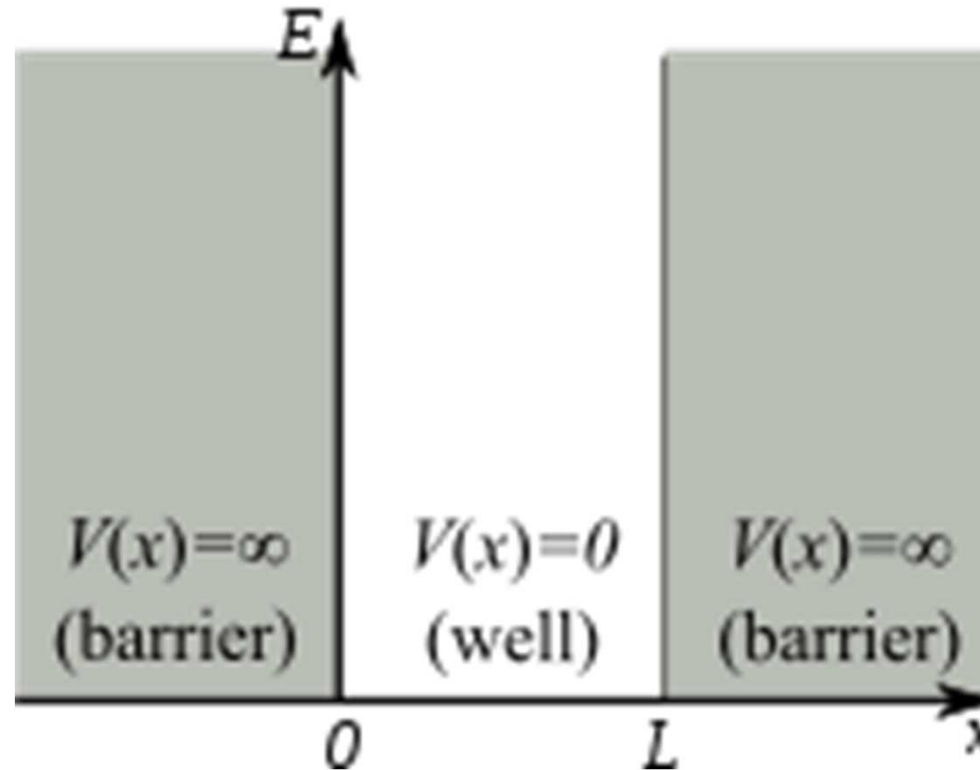
“I think it is safe to say that nobody understands quantum mechanics...”



Partícula numa caixa (poço quântico)

Para uma caixa e uma dimensão (poço a 1 D) tem-se:

$$U(x) \equiv V(x)$$



Fora do poço: $U(x) = \infty$ $x \leq 0$ e $x \geq L$

Dentro do poço: $U(x) = 0$ $0 < x < L$

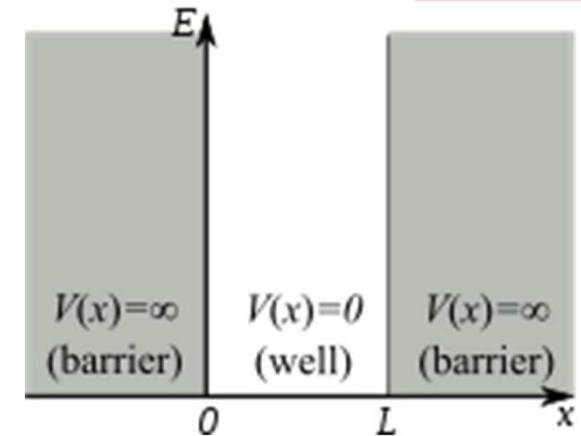
Equação de Schrödinger para uma partícula numa caixa

Equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao potencial $U(x)$

$$U(x) \equiv V(x)$$

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

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - U(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$



Para uma caixa e uma dimensão (poço a 1 D) tem-se:

Fora do poço, $U(x) = \infty$ $x \leq 0$ e $x \geq L$, tem-se $\Psi(x, t) = 0$

Dentro do poço, $U(x) = 0$ $0 < x < L$,

Fazendo: $\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar}$, obtém-se $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$

Partícula numa caixa (poço quântico)

Equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao potencial $U(x)$

Para os estados estacionários, estado em que energia não depende do tempo, a densidade de probabilidade também não é função do tempo e a função de onda pode ser escrita como o produto de duas funções, uma dependente apenas das coordenadas espaciais e outra dependente do tempo:

Equação de Schrödinger independente do tempo para a região **dentro do poço**

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Solução geral:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar} = \left[A \sin(kx) + B \cos(kx) \right] e^{-iEt/\hbar}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo para a região **fora do poço “seria”**:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \infty \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$

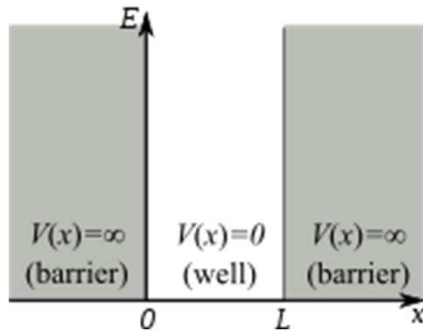
Solução geral:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar} = 0$$

Partícula numa caixa (poço quântico)

Equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao potencial $U(x)$

$$U(x) \equiv V(x)$$



Fora do poço: $U(x) = \infty$ $x \leq 0$ e $x \geq L \Rightarrow \varphi(x) = 0$

Dentro do poço: $U(x) = 0$ $0 < x < L$

Solução geral:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar} = [A \sin(kx) + B \cos(kx)] e^{-iEt/\hbar}$$

Solução particular:

$$\varphi(x=0) = [A \sin(k0) + B \cos(k0)] = 0 \quad \forall t \Rightarrow B = 0$$

$$\varphi(x=L) = [A \sin(kL) + 0] = 0 \quad \forall t \Rightarrow kL = n\pi \text{ com } n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Rightarrow \varphi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad \forall t \Rightarrow \Psi(x, t) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) e^{-i\hbar(n\pi/L)^2 t/2m}$$

(Falta normalizar a função de onda $\Psi(x, t)$)

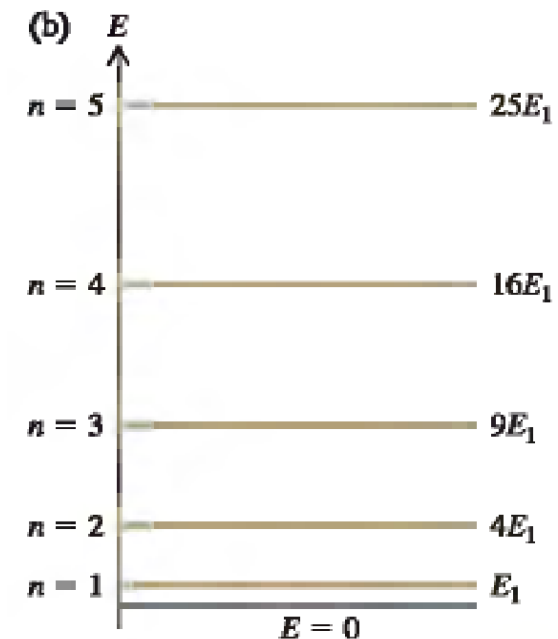
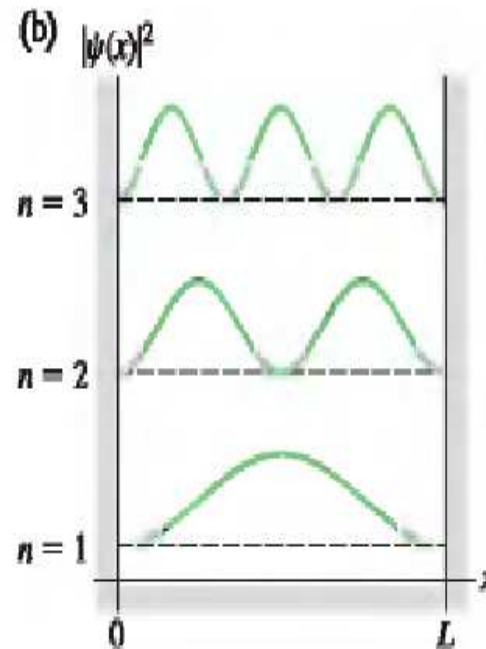
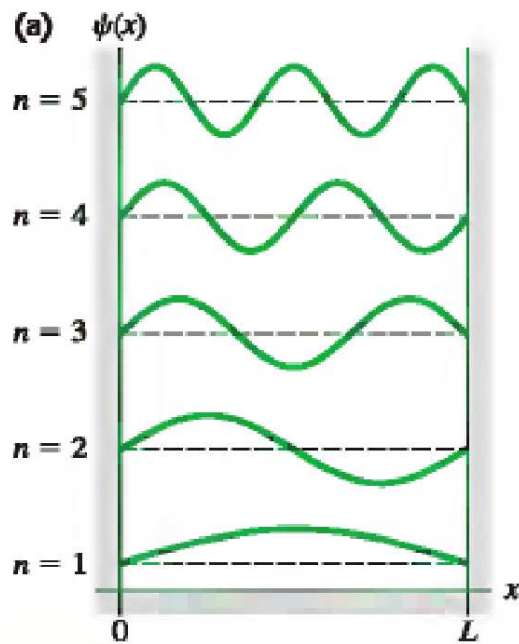
Níveis de energia de uma partícula numa caixa

Solução da equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao potencial $U(x)$ tipo poço quântico

$$\Psi(x,t) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE \cdot t/\hbar} = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-i\hbar(n\pi/L)^2 t/2m}$$

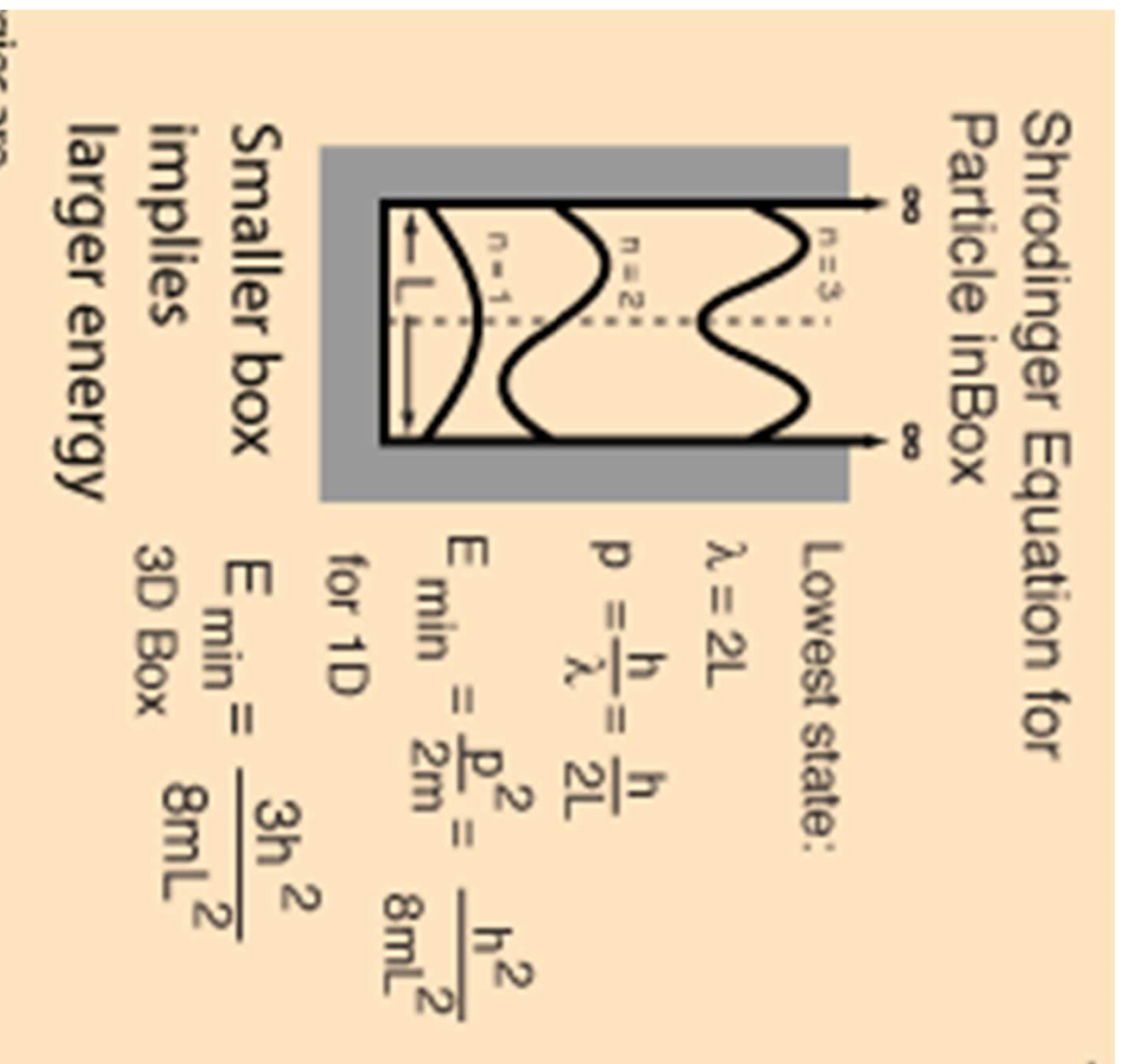
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

(Falta normalizar a função de onda)



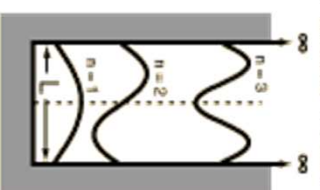
Ideias a reter: O número de estados possíveis é infinito, mas as energias possíveis estão quantizadas.

Níveis de energia de uma partícula numa caixa



Níveis de energia de uma partícula numa caixa

Schrodinger Equation for Particle in Box



Lowest state:

$$\lambda = 2L$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L}$$

$$E_{\min} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

for 1D

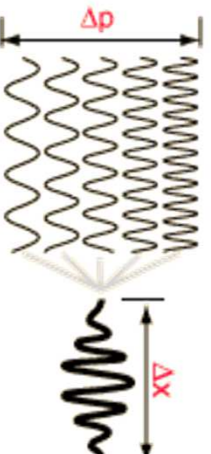
$$E_{\min} = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

3D Box

[Show](#)

Uncertainty Principle

$$\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$$



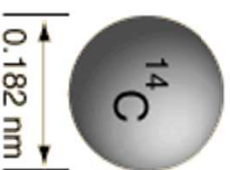
$$E_{\min} = \frac{9h^2}{8mL^2\pi^2}$$

[Show](#)

Using the uncertainty principle expression for minimum confinement energy:

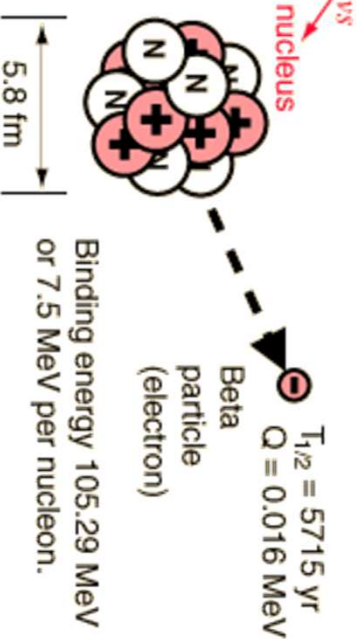
Electron in carbon atom: $E_{\min} = 10.4 \text{ eV}$

Proton in carbon atom: $E_{\min} = 0.0056 \text{ eV}$



First ionization energy 11.3 eV

1 nm = 10 ⁻⁹ m
1 fm = 10 ⁻¹⁵ m
1 MeV = 10 ⁶ eV
1 GeV = 10 ⁹ eV
Units

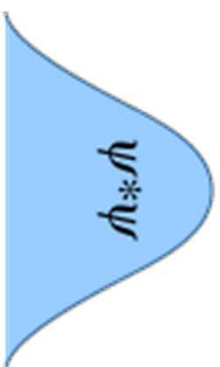


Binding energy 105.29 MeV
or 7.5 MeV per nucleon.

Electron in carbon nucleus: $E_{\min} = 10.2 \text{ GeV}$

Proton in carbon nucleus: $E_{\min} = 5.6 \text{ MeV}$

Níveis de energia de uma partícula numa caixa



$\psi^*\psi$ is the probability of finding the particle.

ψ = wavefunction



Assume

$$\Delta p = p$$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Assume atomic size = $0.4nm$

$$\text{Nuclear size} = \frac{1}{20,000} \times 0.4nm$$

Using the atomic size as the uncertainty in position:

This shows that Planck's constant determines the relationship between Δx and Δp and therefore the energy of confinement.

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = 1.66 \times 10^{-24} kg \cdot m / s$$

Energy to:

Confine electron in atom:

$$9.4eV$$

Confine proton in nucleus:

$$2.05MeV$$

Confine electron in nucleus: $3.77GeV$

These are in the range of observed atomic and nuclear processes.

This is about a factor of a **thousand** above the observed energies of nuclear processes, indicating that the electron **cannot be confined** in the nucleus!

Níveis de energia de uma partícula numa caixa

Confinement in atom

Assume atomic size = $0.4nm = \Delta x$

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = 1.66 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} / \text{s}$$

$$\Delta p = p ; \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

For electron:

$$E = \frac{(1.66 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} / \text{s})^2}{2(9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ J} / \text{eV})}$$
$$E = 9.4 \text{ eV}$$

Confinement in nucleus

Nuclear size = $\frac{1}{20,000} \times 0.4nm = \Delta x$

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = 3.31 \times 10^{-20} \text{ kg} \cdot \text{m} / \text{s}$$

For electron:

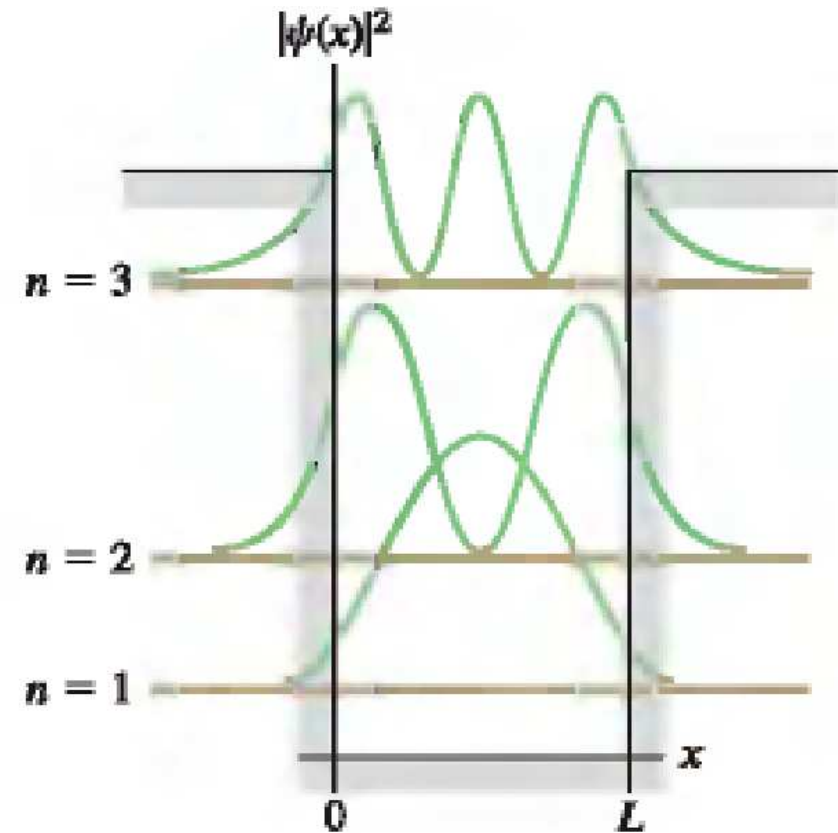
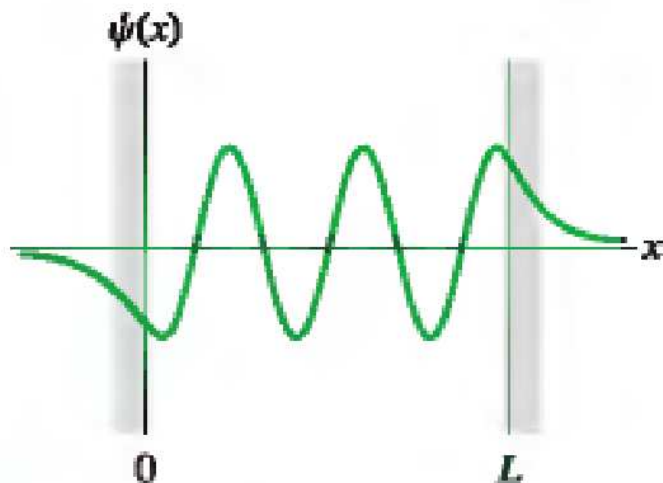
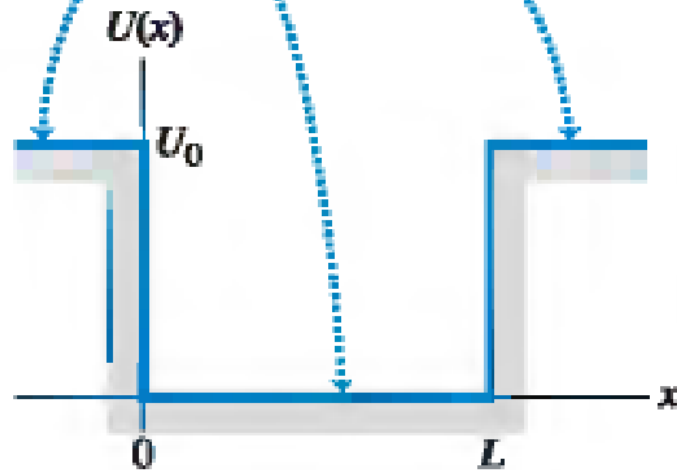
$$E = \frac{(3.31 \times 10^{-20} \text{ kg} \cdot \text{m} / \text{s})^2}{2(9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ J} / \text{eV})}$$
$$E = 3.77 \times 10^9 \text{ eV} = 3.77 \text{ GeV}$$

For proton, divide by $m_p / m_e = 1836$

$$E = 2.05 \times 10^6 \text{ eV} = 2.05 \text{ MeV}$$

Funções de onda num poço finito

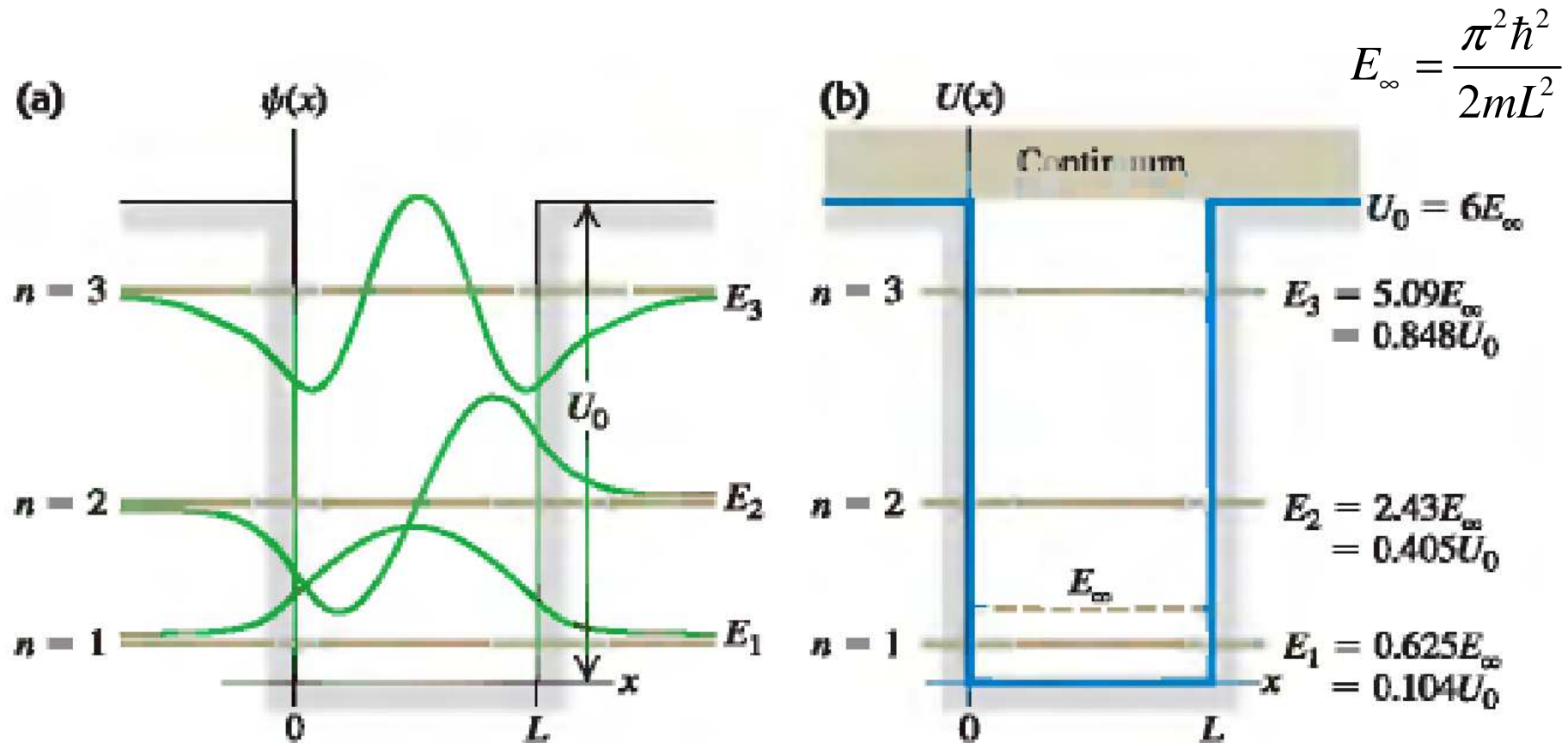
The potential energy U is zero in the interval $0 \leq x \leq L$ and has the constant value U_0 everywhere outside this interval.



Ideias a reter

- Num poço finito a função de onda tem um valor **não nulo** na região das barreiras, decaindo para zero com a distância ao poço.
- O número de estados possíveis num poço quântico de profundidade finita é **finito**.

Funções de onda e níveis de energia num poço finito

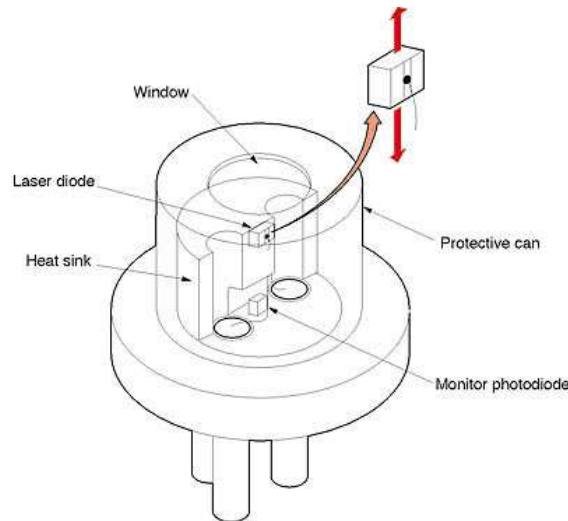


Ideias a reter

- O número de estados possíveis num poço quântico de profundidade finita é **finito**.
- Num poço quântico finito a função de onda espraia-se para dentro das barreiras, o que faz com que os valores da energia dos estados discretos possíveis sejam inferiores aos valores previstos para um poço quântico de profundidade infinita.

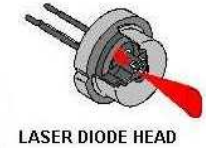
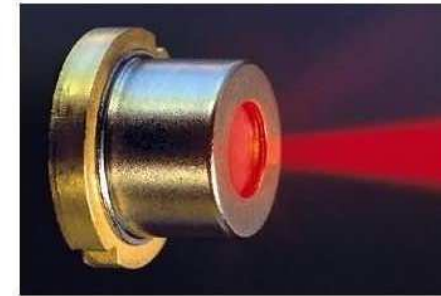
Aplicação de poços quânticos: Laser de díodo (LD)

The Nobel Prize in Physics 2000

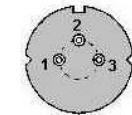


díodo laser

[../../w3dev.ualg.pt/laser.mov](http://w3dev.ualg.pt/laser.mov)

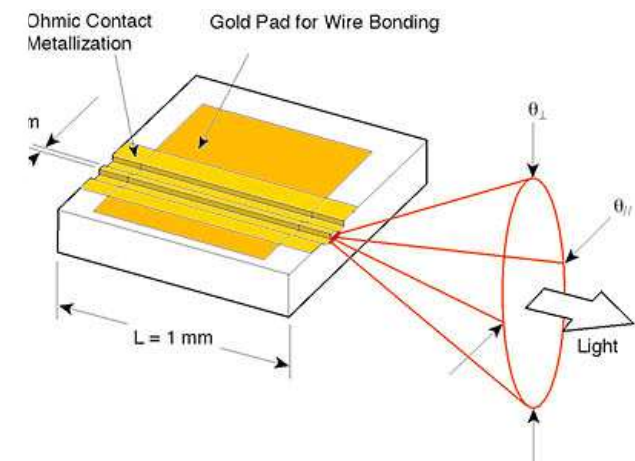
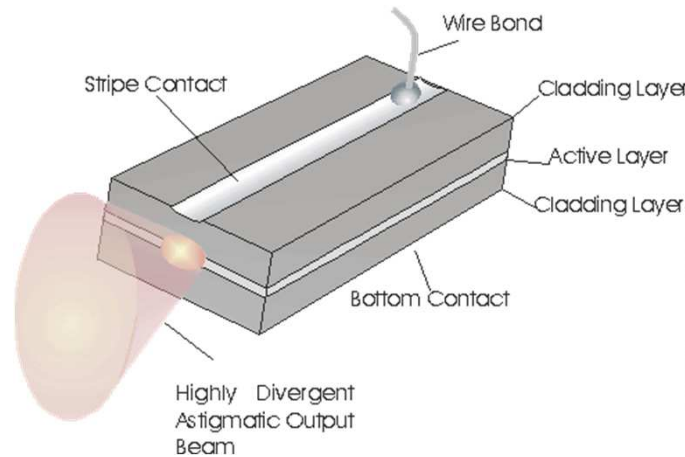
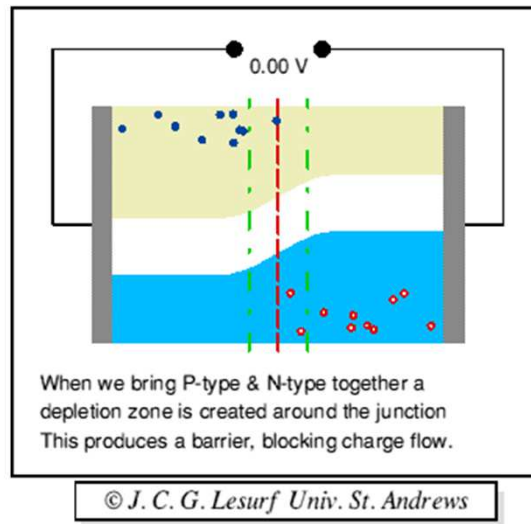


LASER DIODE HEAD



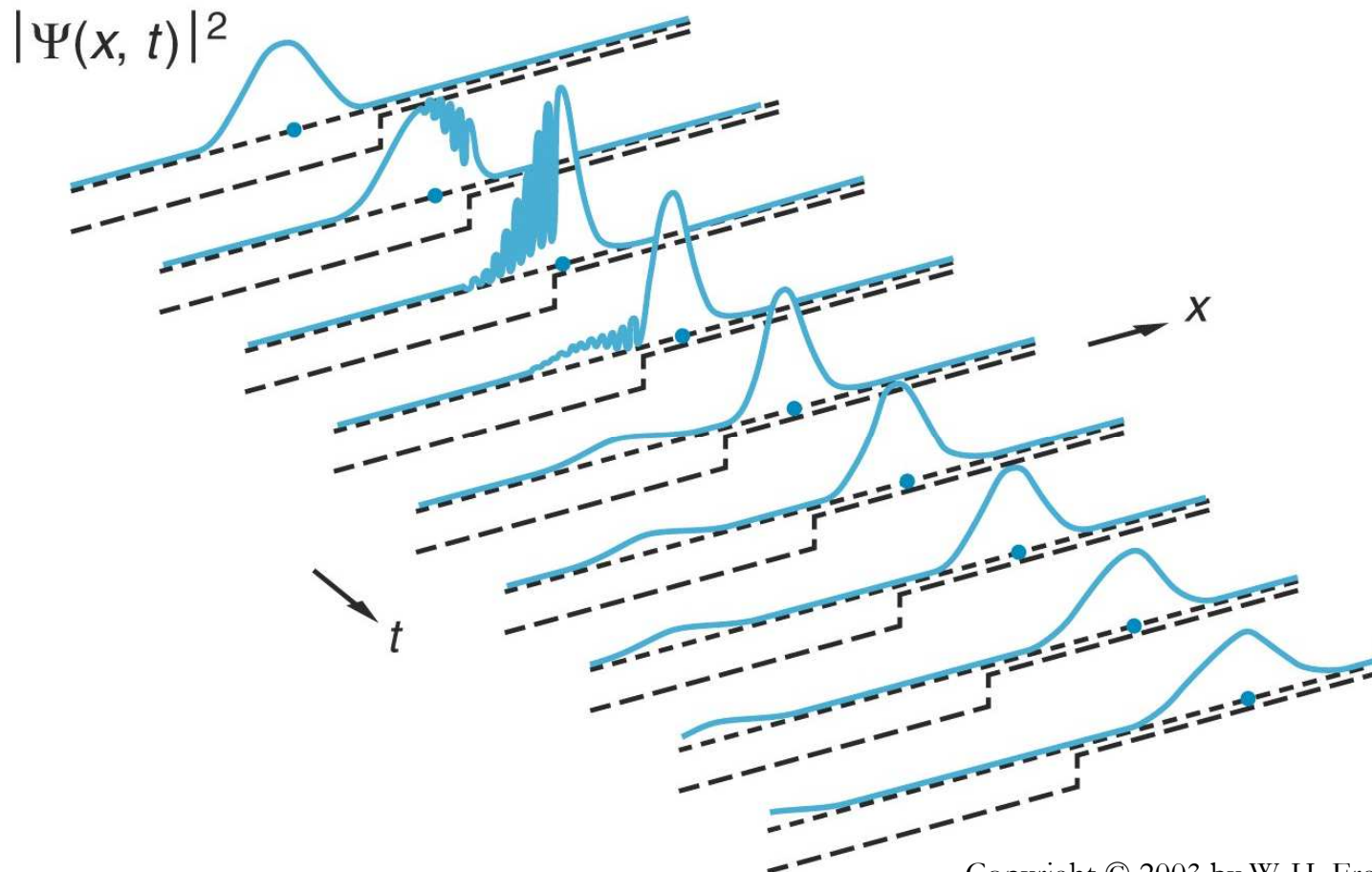
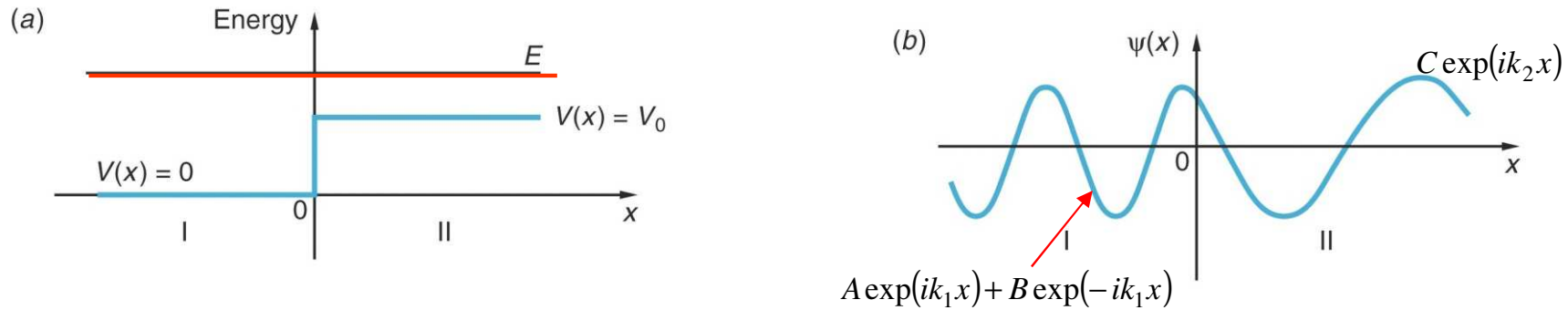
1: LD - Laser Diode
2: COM
3: PD - Photo Diode

Ver <http://w3.ualg.pt/~jlongras/laser.mov>

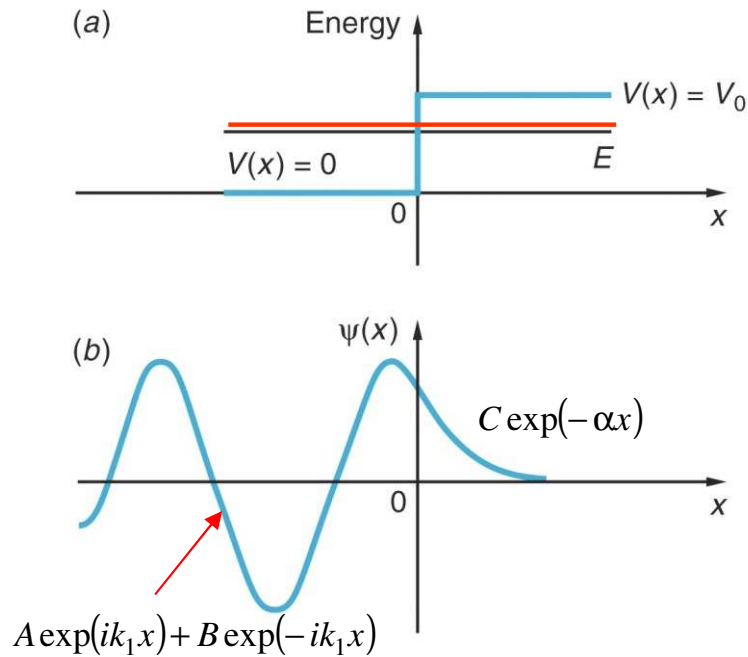


http://en.wikipedia.org/wiki/Laser_diode
2011-2012

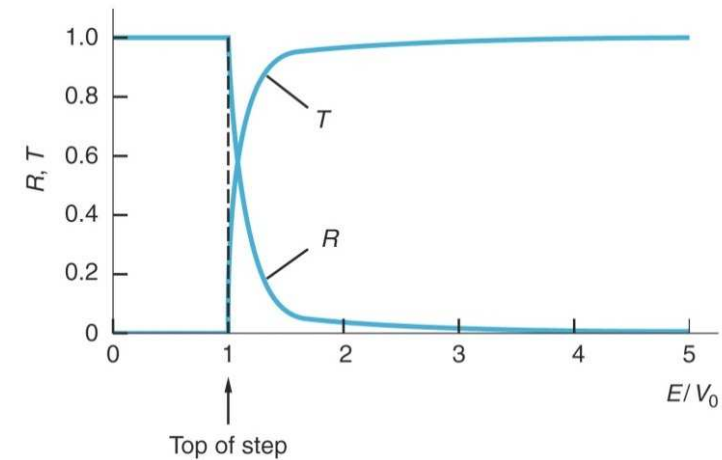
Função de onda num degrau de potencial



Função de onda num degrau de potencial



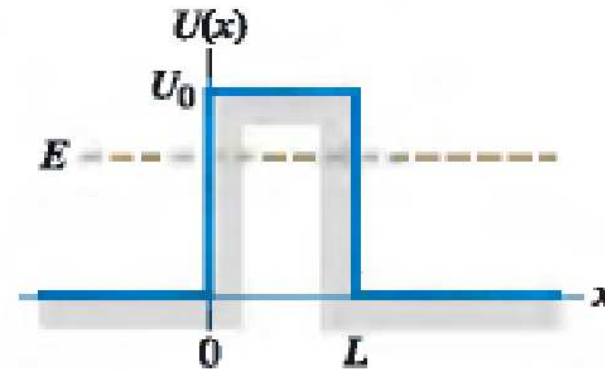
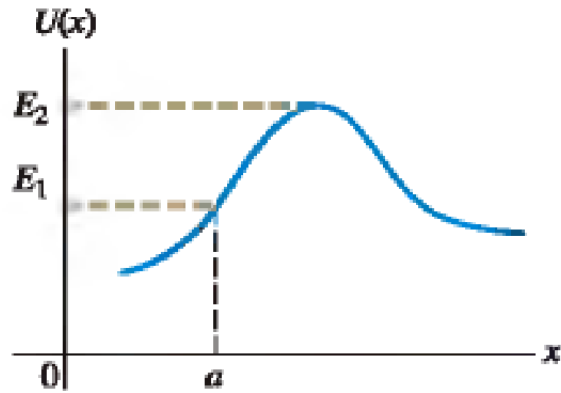
Coeficientes de transmissão (T) e de reflexão (R)



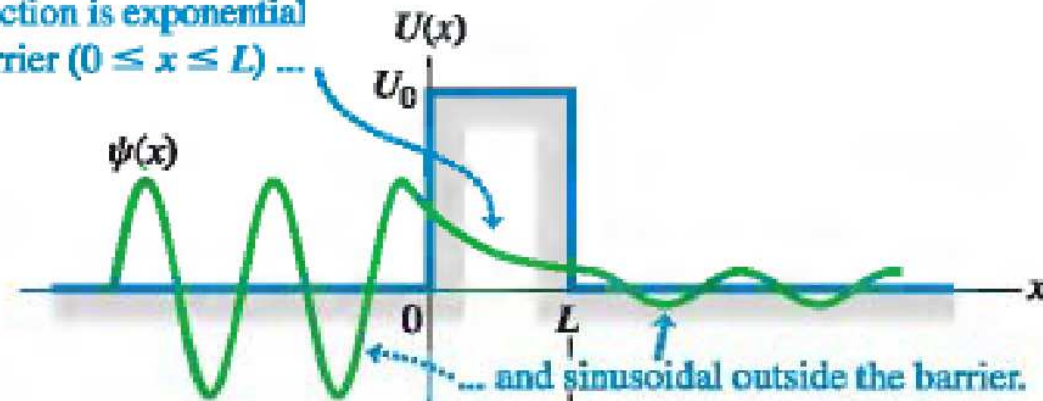
Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

Barreiras de potencial e efeito de túnel

Barreiras de potencial



The wave function is exponential within the barrier ($0 \leq x \leq L$) ...

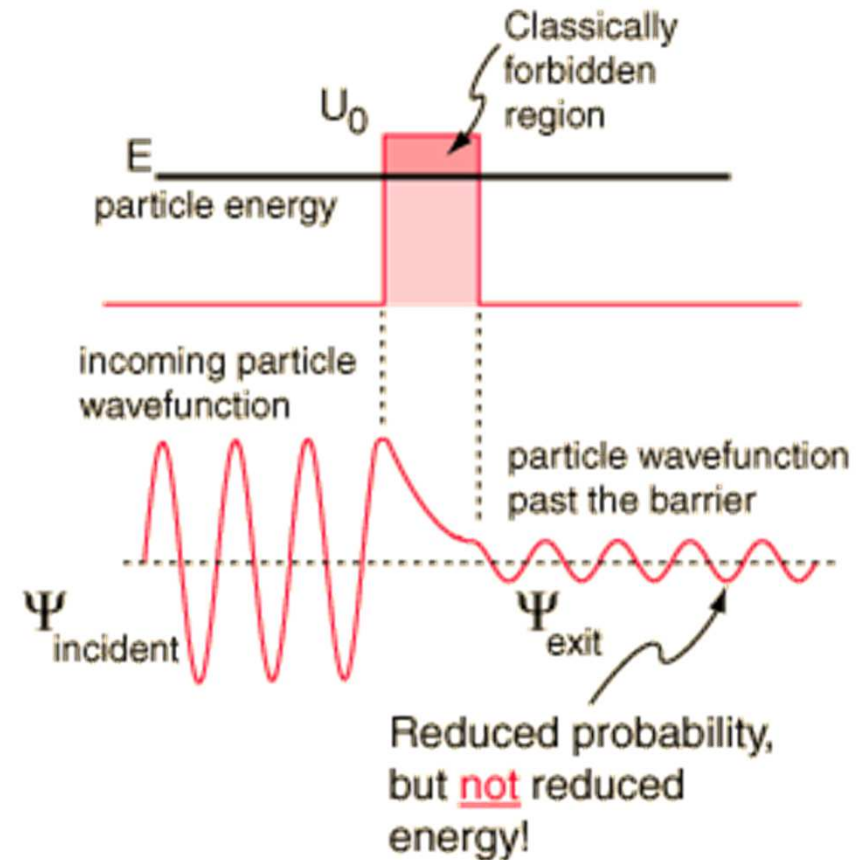
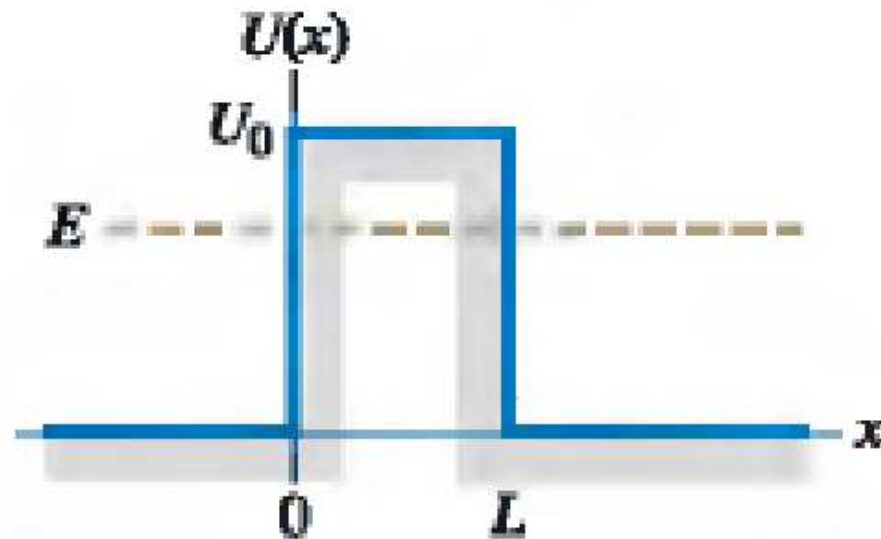


The function and its derivative (slope) are continuous at $x = 0$ and $x = L$ so that the sinusoidal and exponential functions join smoothly.

Numa barreira de potencial finita a função de onda é não nula na região da barreira, isto é, a probabilidade de encontrar a partícula dentro da barreira é finita. Se a barreira não for muito alta e muito larga, a probabilidade de encontrar a partícula do outro lado da barreira é diferente de zero.

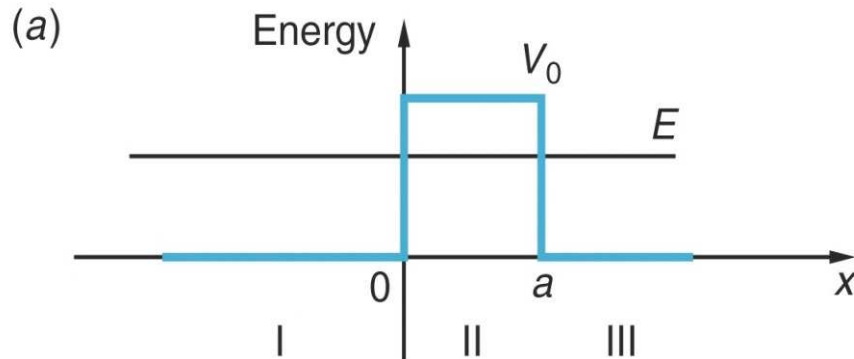
Barreiras de potencial e efeito de túnel

Barreiras de potencial

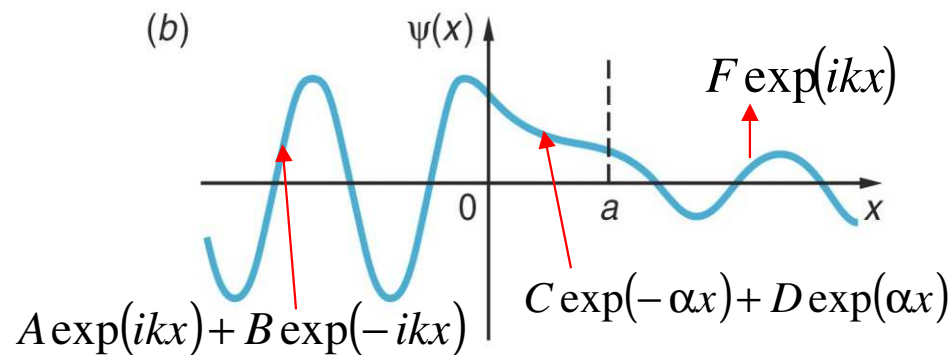


Numa barreira de potencial finita a função de onda é não nula na região da barreira, isto é, a probabilidade de encontrar a partícula dentro da barreira é finita. Se a barreira não for muito alta e muito larga, a probabilidade de encontrar a partícula do outro lado da barreira é diferente de zero.

Barreiras de potencial e efeito de túnel



Coeficientes de transmissão de uma partícula através de uma barreira rectangular (quadrado da razão entre a amplitude da onda incidente A e a onda transmitida F)



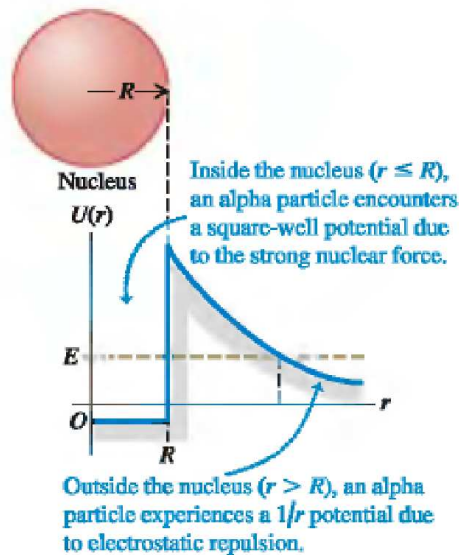
$$T(E) = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{\sinh^2 \alpha a}{4 \frac{E}{U_0} \left(1 + \frac{E}{U_0} \right)} \right]^{-1}$$

Se $\alpha a \gg 1$, com $\alpha = \sqrt{2m(U_0 - E) / \hbar^2}$:

$$T(E) \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) e^{-2\alpha a} \approx \exp \left(-2 \sqrt{2m(U_0 - E) / \hbar^2} a \right) = \exp(-2\alpha a).$$

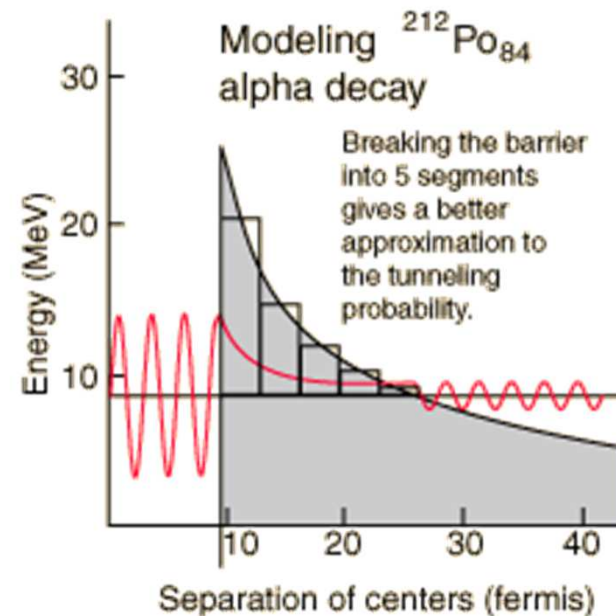
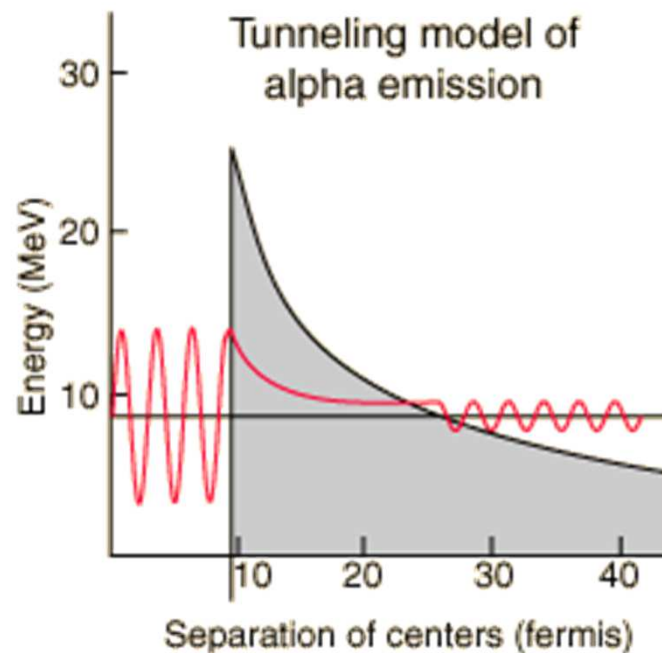
Exemplos de efeito de túnel na natureza

Decaimento alfa



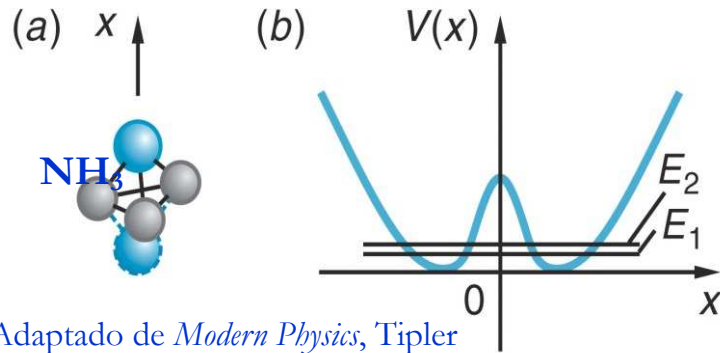
Decaimento alfa: Processo de decaimento radioactivo no qual o núcleo de um átomo emite uma partícula alfa, perdendo massa atômica igual a um átomo de 4He .

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/Nuclear/alphdet.html#c1>



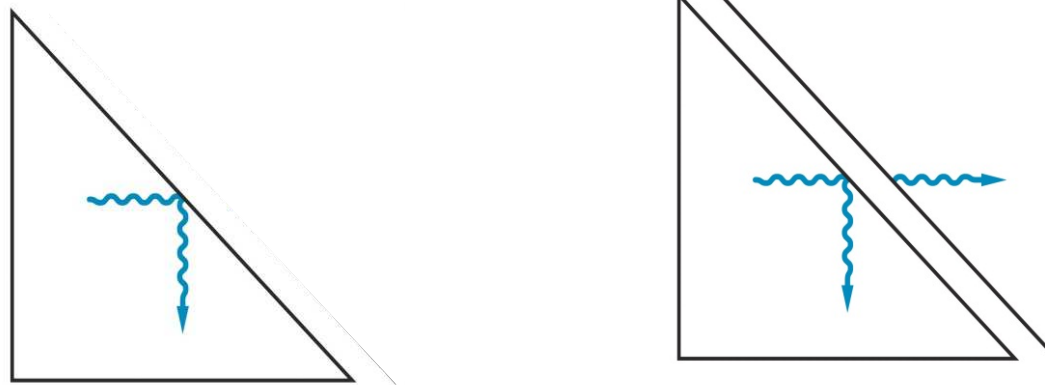
Exemplos de efeito de túnel na natureza

Relógio atômico de NH_3



1949 - O NIST (naquela época o National Bureau of Standards, Laboratório Nacional de Padrões), EUA, anuncia a construção do primeiro relógio atômico usando moléculas de amônia .

Efeito de túnel óptico

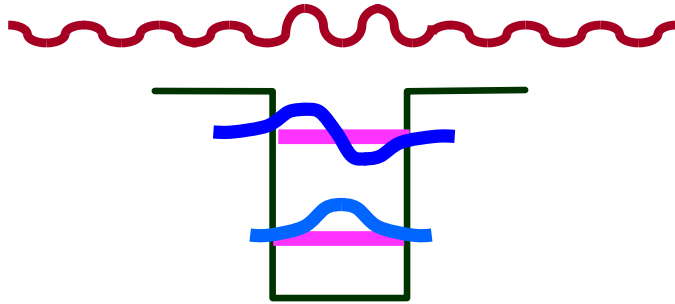


Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

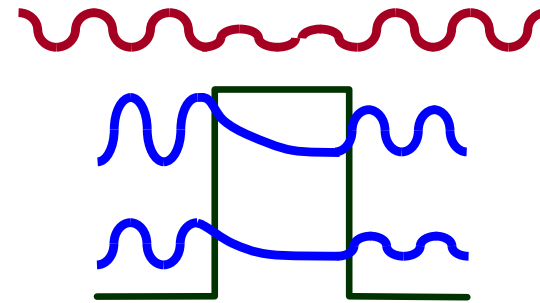
<http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/snef/xvi/cd/resumos/T0461-1.pdf>

Dupla barreira de potencial: efeito de túnel ressonante

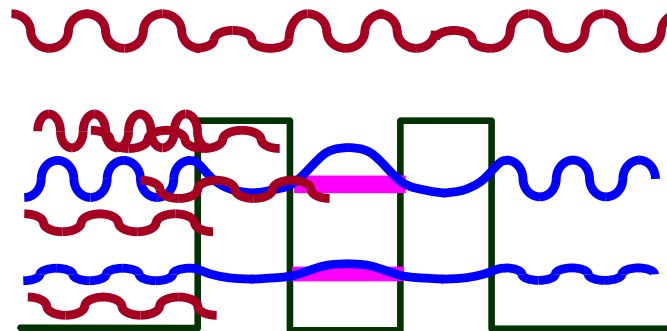
Poço quântico



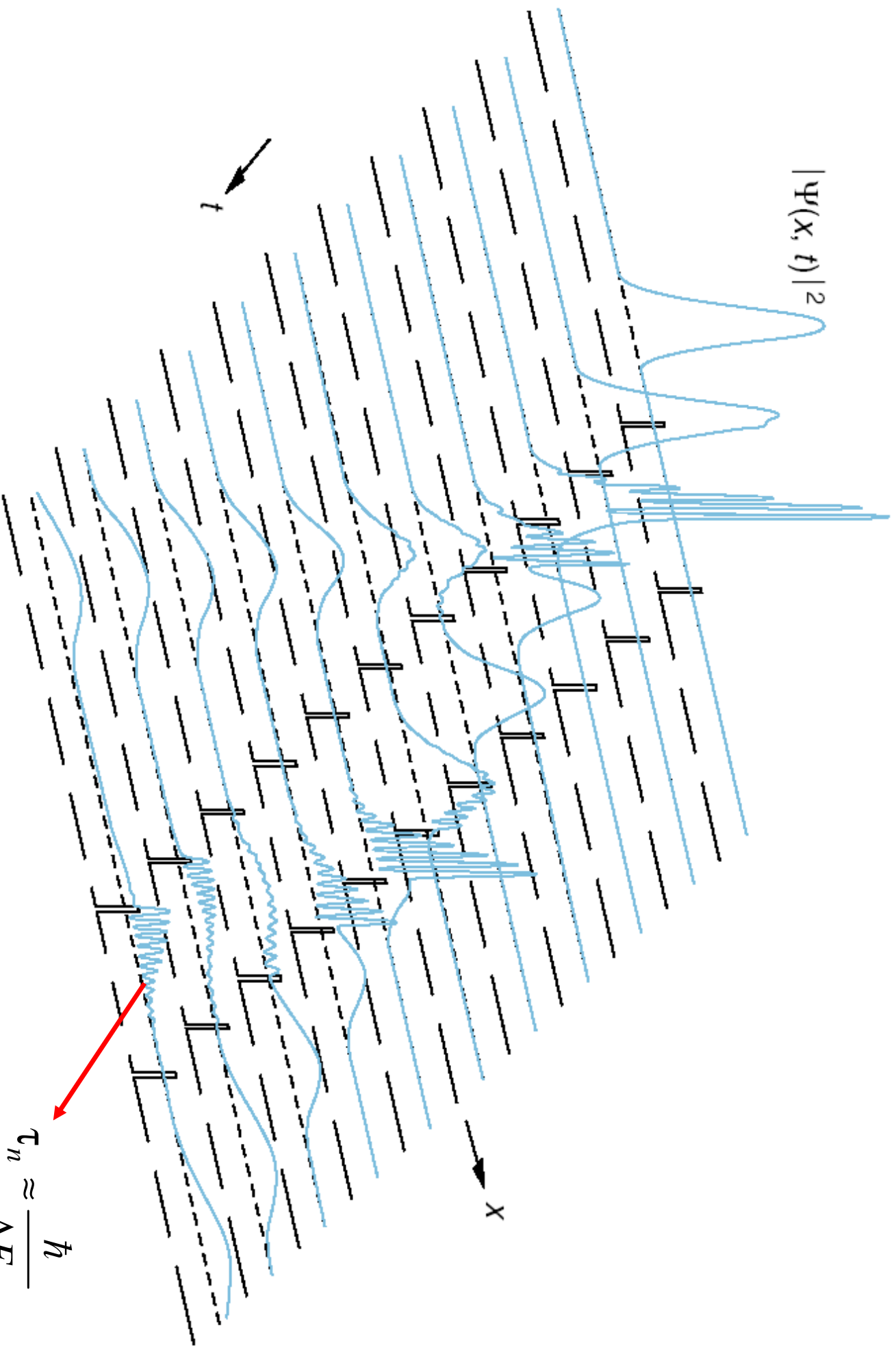
Barreira



Dupla barreira de potencial

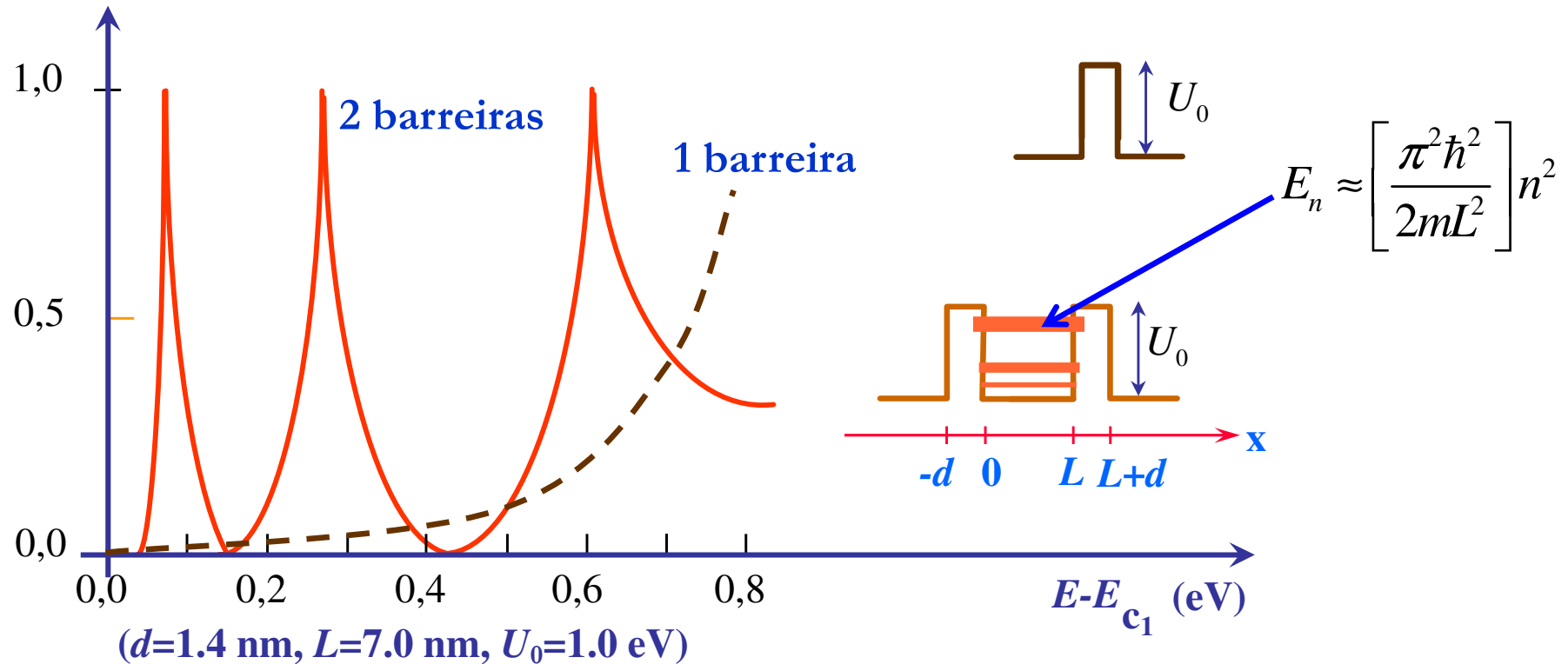


Evolução da função de onda numa dupla barreira



Dupla barreira de potencial: efeito de túnel ressonante

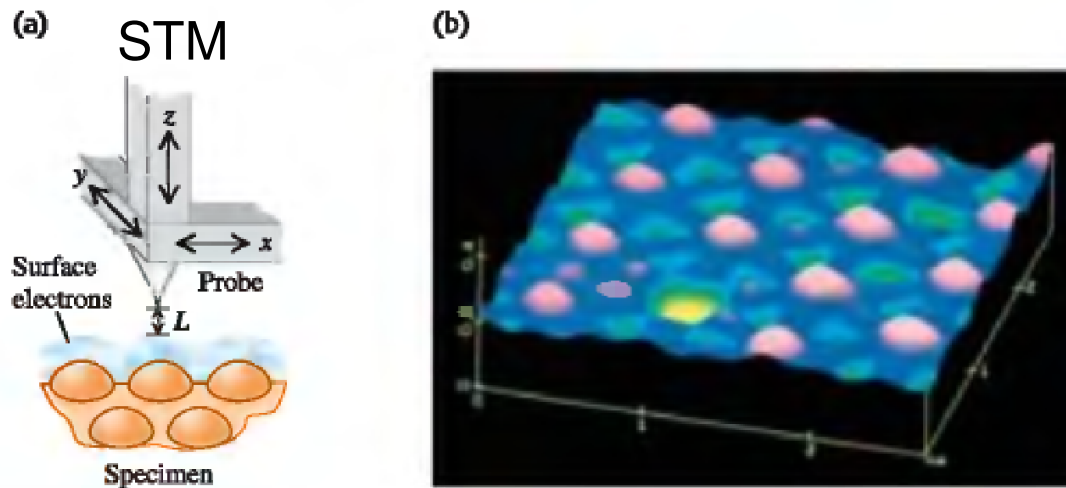
Probabilidade transmissão dos electrões



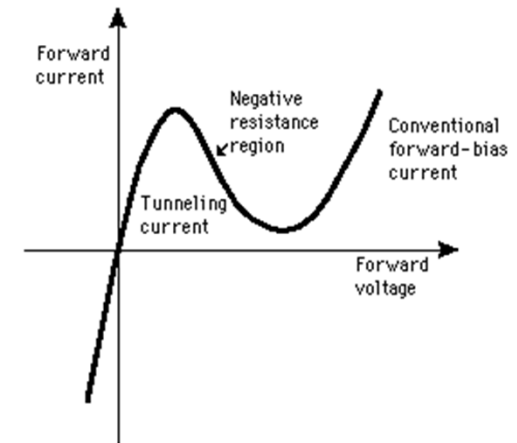
Para certos valores de energia do electrão incidente, a probabilidade de atravessar as duas barreiras é 1.

Aplicações do efeito túnel

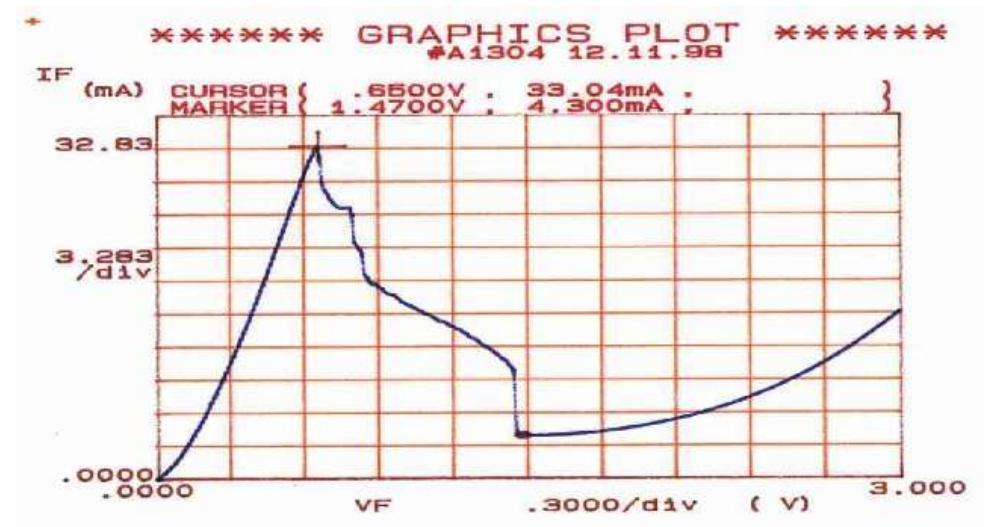
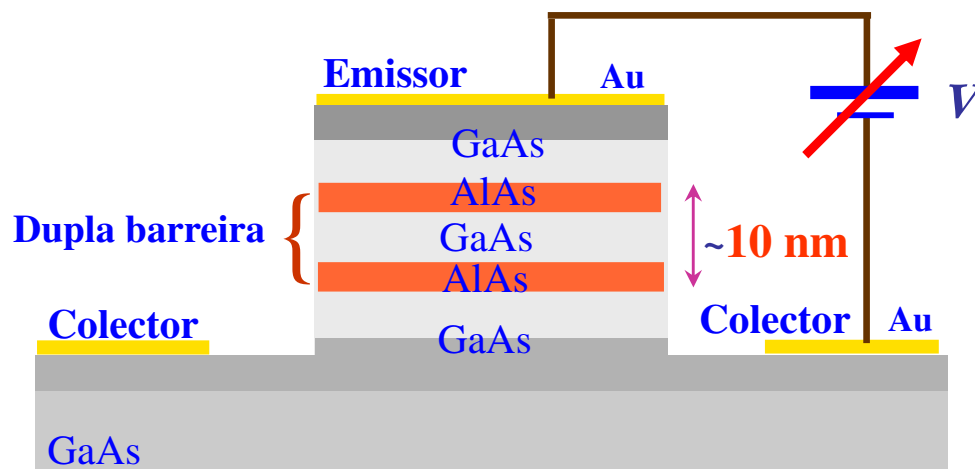
Scanning Tunneling Microscope



Díodo Túnel



RTD: "Resonant Tunnelling Diode"



Microscópico de varrimento baseado no efeito de túnel

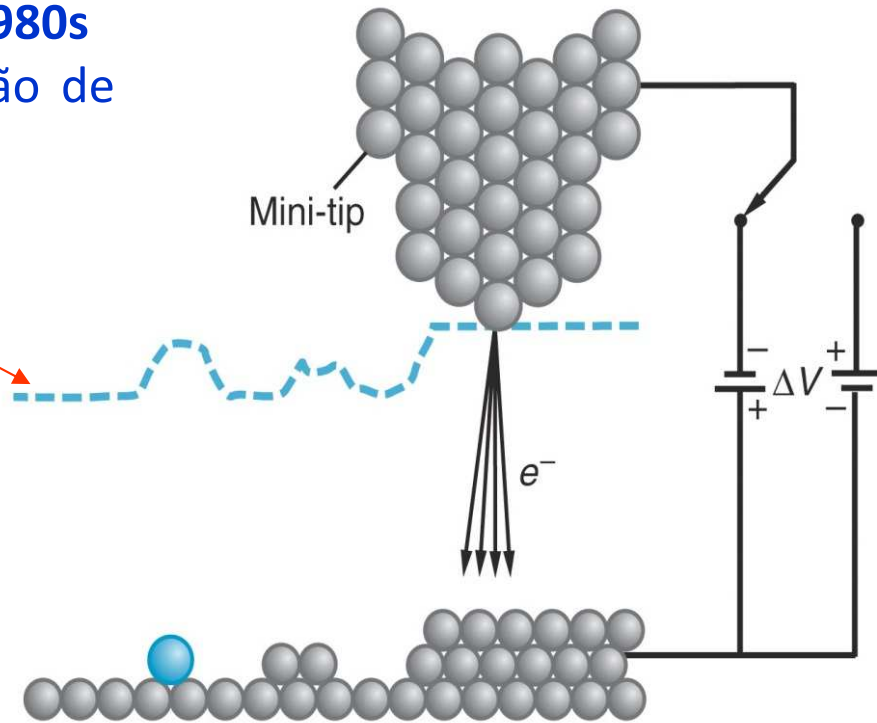
Scanning Tunneling Microscope (STM), 1980s

Este microscópio permite a caracterização de superfícies condutoras de electricidade.

Perfil do percurso da ponta de prova

Ver também “Atomic Force Microscope”, AFM

O AFM é semelhante ao STM. Contudo, o AFM permite a caracterização de superfícies não condutoras.



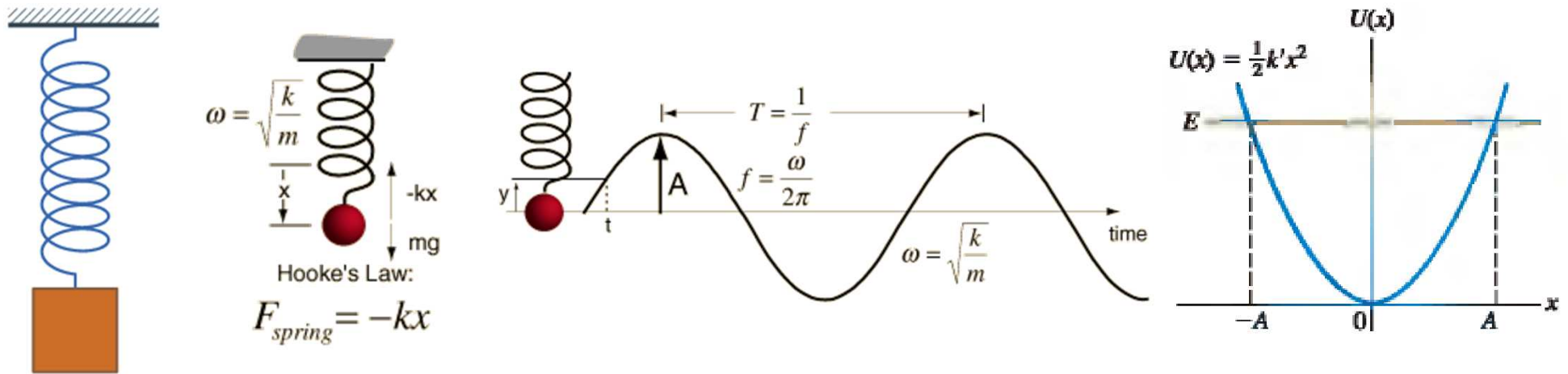
Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

A corrente de túnel é extremamente sensível à largura da barreira. Uma variação de 0,5 nm na largura da barreira pode provocar uma alteração na intensidade de corrente de um factor de 10 000. À medida que a ponta de prova percorre a amostra, a corrente de túnel é mantida constante usando um sistema de re-alimentação negativa baseado em piezoeléctricos que asseguram que a largura da barreira não varia. Assim, a superfície da amostra pode ser *mapeada* através do movimento vertical da ponta de prova.

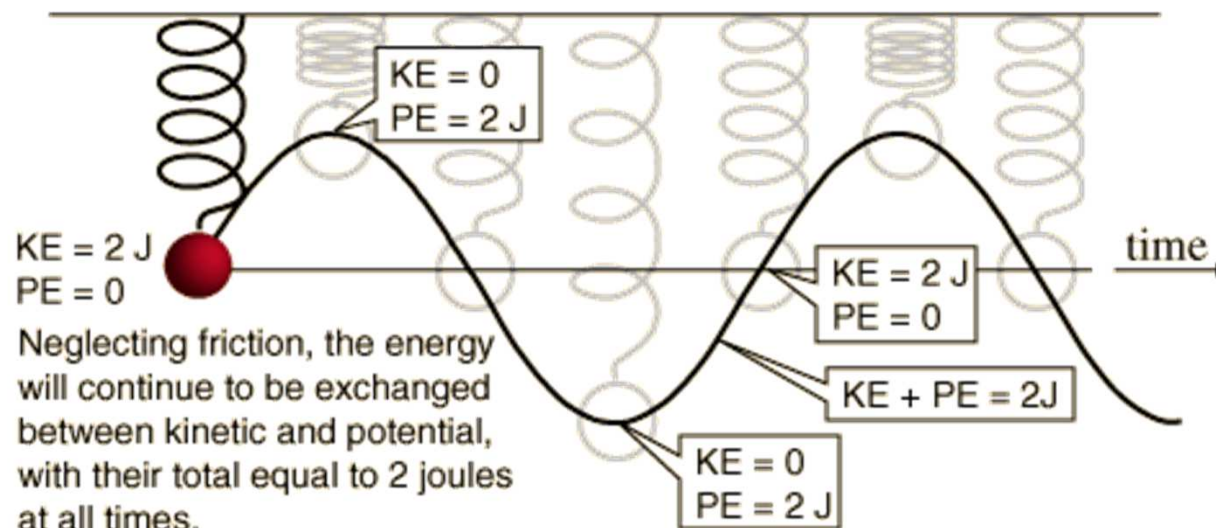
Resolução: da ordem do tamanho do átomo.

Piezoelectricidade ou piezelectricidade: electricidade desenvolvida em certos cristais quando se exercem pressões sobre as suas faces (de piez- + electricidade); piez(o)- elem. de formação de palavras que exprime a ideia de fazer pressão, comprimir, apertar (do gr. piézein, «fazer pressão»).

Oscilador harmónico clássico



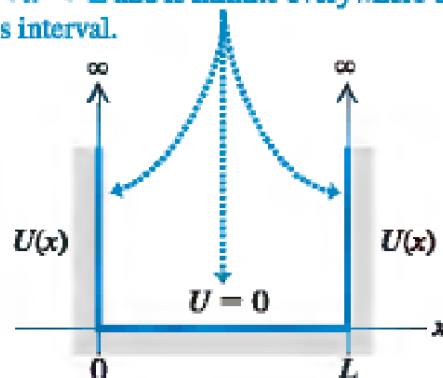
Embora a energia total de um oscilador harmónico simples (sem amortecimento) se mantenha constante, a energia cinética e potencial variam de forma continua



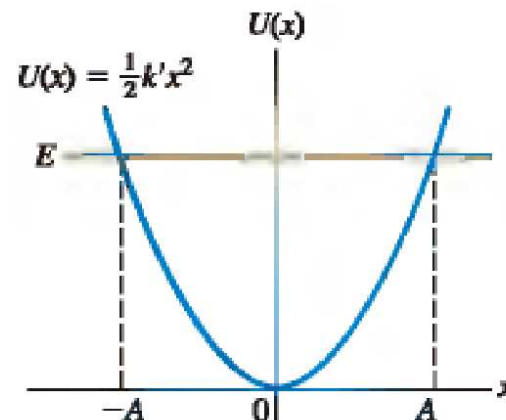
Oscilador harmónico quântico

Poço quântico quadrado

The potential energy U is zero in the interval $0 < x < L$ and is infinite everywhere outside this interval.



Poço quântico parabólico

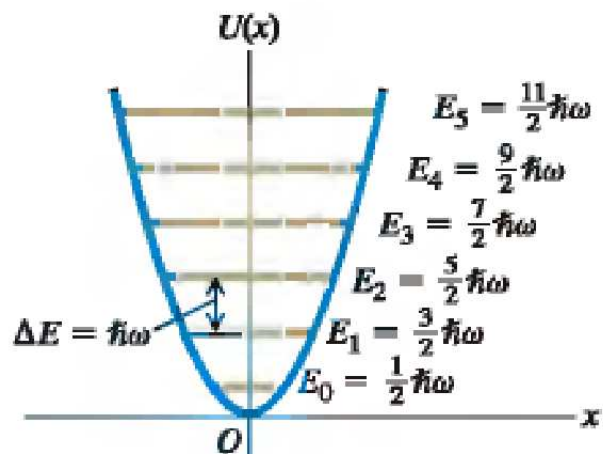


Equação de Schrödinger para o oscilador harmónico quântico

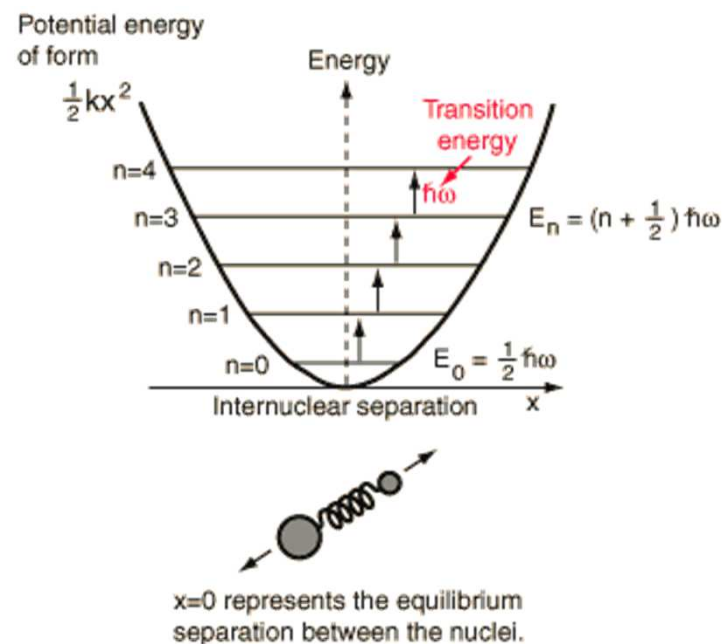
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} k' x^2 \psi = E \psi$$

Oscilador harmónico quântico

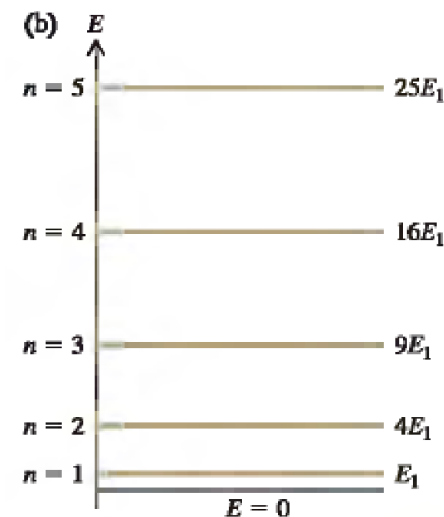
Níveis de energia do oscilador harmónico quântico



$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{k'}{m}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$



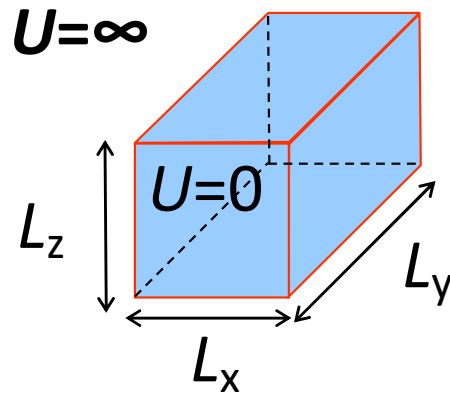
Poço quântico quadrado



$$E_n = \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \right] n^2$$

Caixa a 3 dimensões (3D): pontos quânticos

Ponto quântico ideal: $U(x,y,z;t)=0$ no interior da caixa e infinito no exterior



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

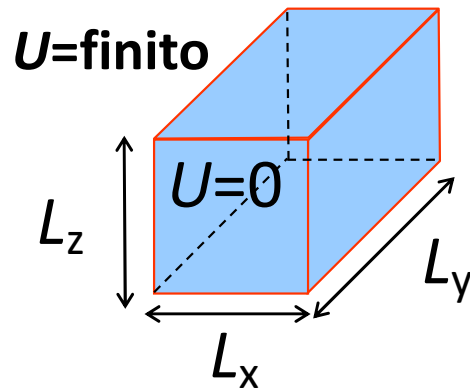
Uma solução possível:

$$\Psi(x,y,z;t) = \varphi(x)\phi(y)\psi(z)e^{-iEt/\hbar}$$

$$\text{com } E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

Pontos quânticos *reais*

Ponto quântico reais: $U(x,y,z;t)=0$ no interior da caixa e finito no exterior

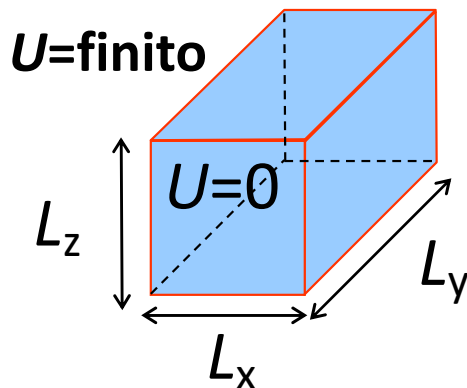


Numa primeira aproximação pode considerar-se:

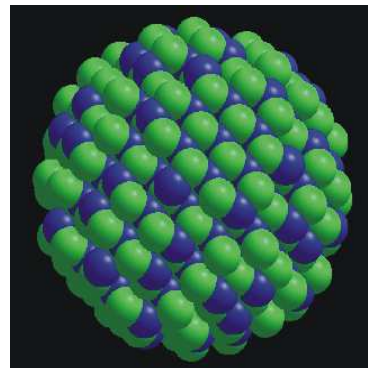
$$E_{n_x n_y n_z} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

<http://images.google.pt/images?q=quantum%20dot&oe=utf-8&rls=org.mozilla:pt-PT:official&client=firefox-a&um=1&ie=UTF-8&sa=N&hl=pt-PT&tab=wi>

Exemplos de implementações práticas

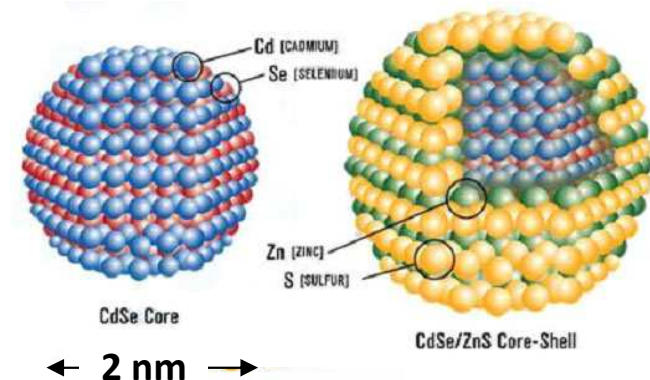


QDs de InP



← 5 nm →

QDs de CdS

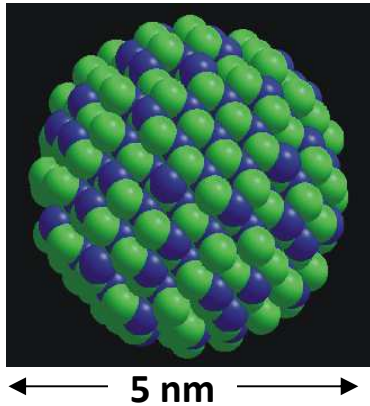


← 2 nm →

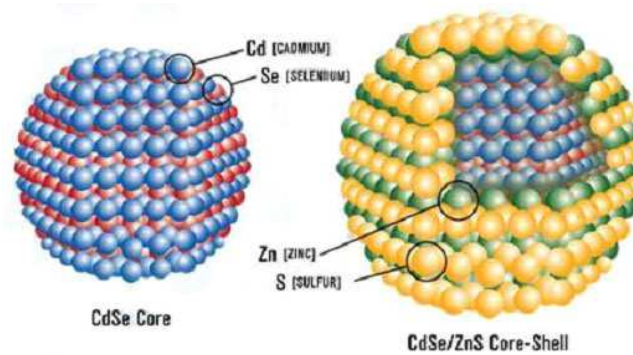
http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_dot
2011-2012

Propriedades espectroscópicas dos pontos quânticos

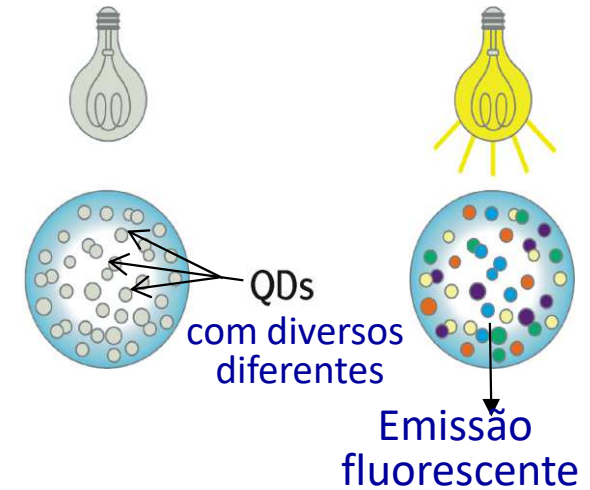
QDs de InP



QDs de CdS



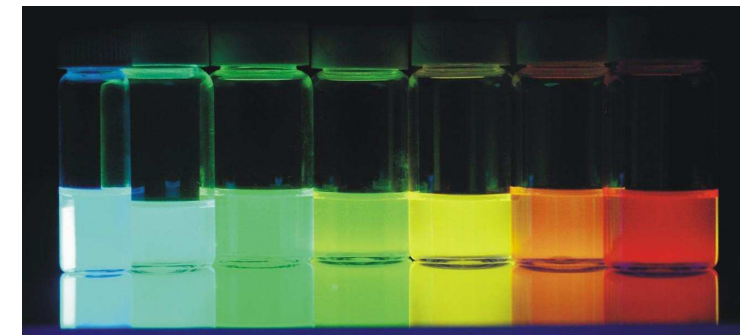
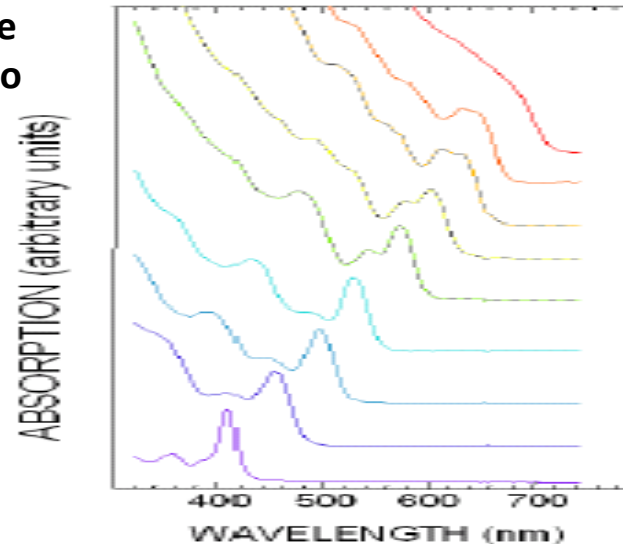
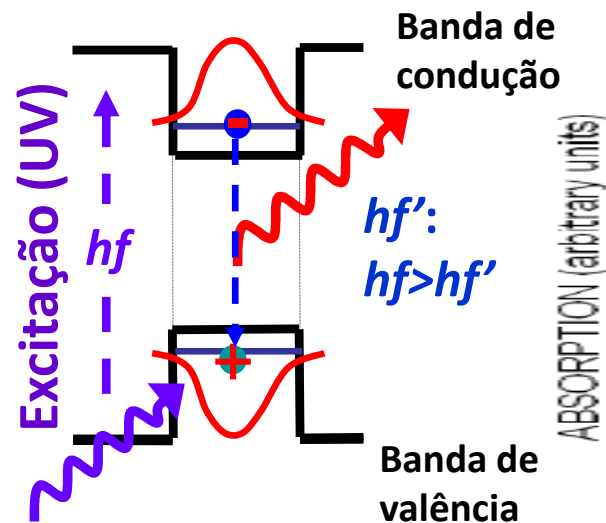
Luz ultravioleta



<http://www.evidenttech.com/quantum-dots-explained/how-quantum-dots-work.html>

Alterando o tamanho, a forma, e a composição dos QDs, as propriedades espectroscópicas dos QDs alteram-se de forma dramática.

http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_dot

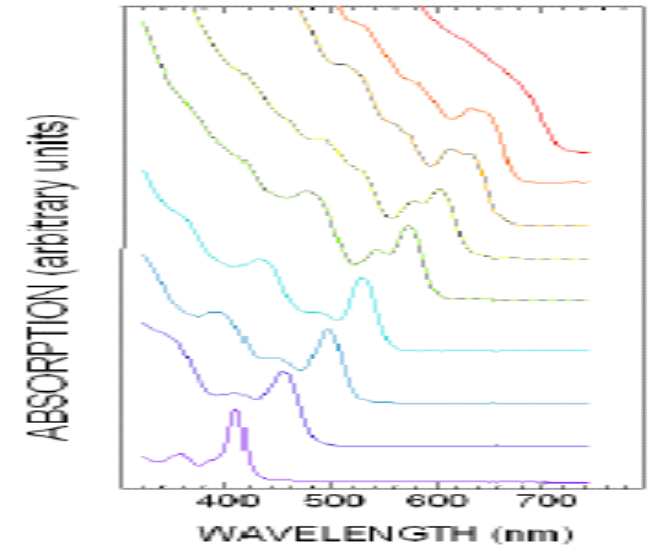
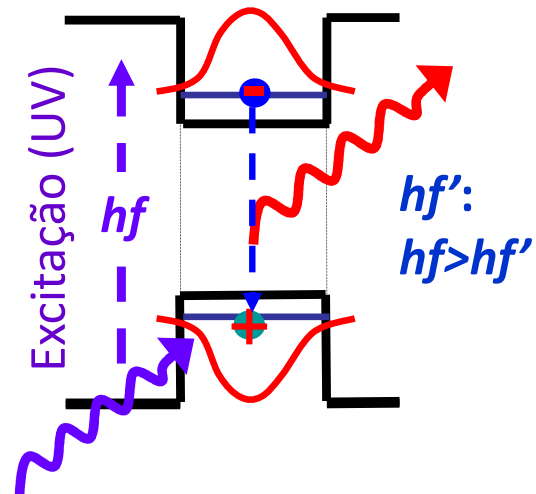
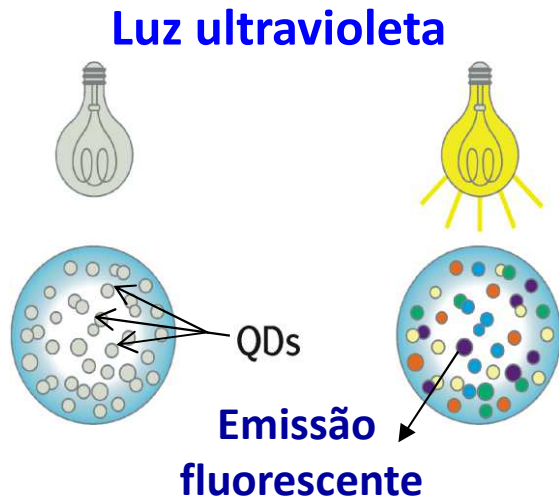


2.3 $\xrightarrow{\text{Dimensões dos QDs}}$ 5.5
Size (nanometers)

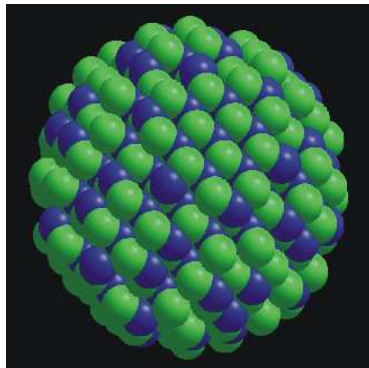
© Copyright 2004, Benoit Dubertret

<http://www.evidenttech.com/quantum-dots-explained/how-quantum-dots-work.html>

Pontos quânticos reais



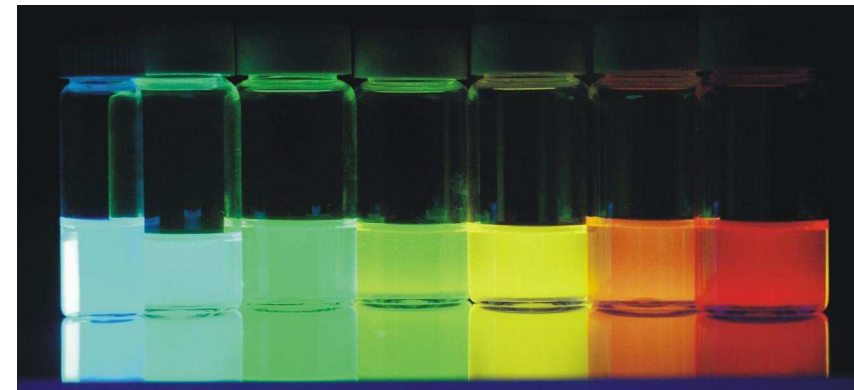
QDs de InP



← 5 nm →

qds-nasa.wmv

ocancro-e-quantum-dots.wmv



2.3 → 5.5
Dimensão dos QDs
Size (nanometers)

© Copyright 2004, Benoit Dubertret

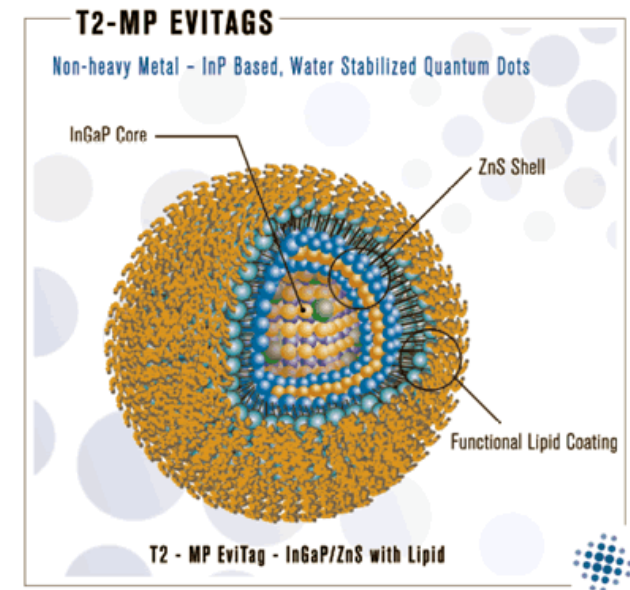
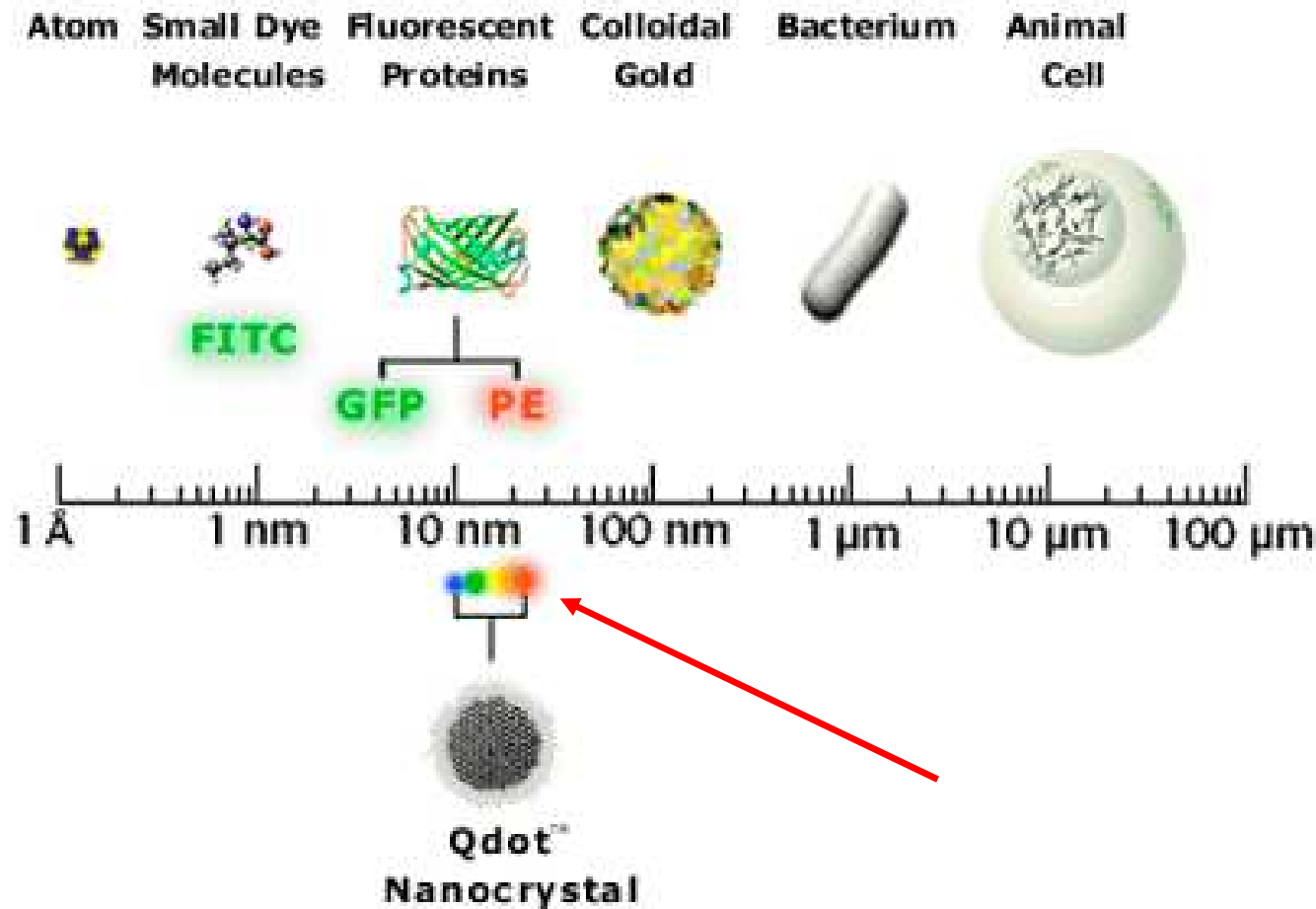
Alterando o tamanho, a forma, e a composição dos QDs, as propriedades espectroscópicas dos QDs alteram-se de forma dramática.

http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_dot

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/qds-nasa.wmv>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ocancro-e-quantum-dots.wmv>

Aplicações de pontos quânticos (“quantum dots”, QDs)



qds-nasa.wmv

ocancro-e-quantum-dots.wmv

Fontes de luz



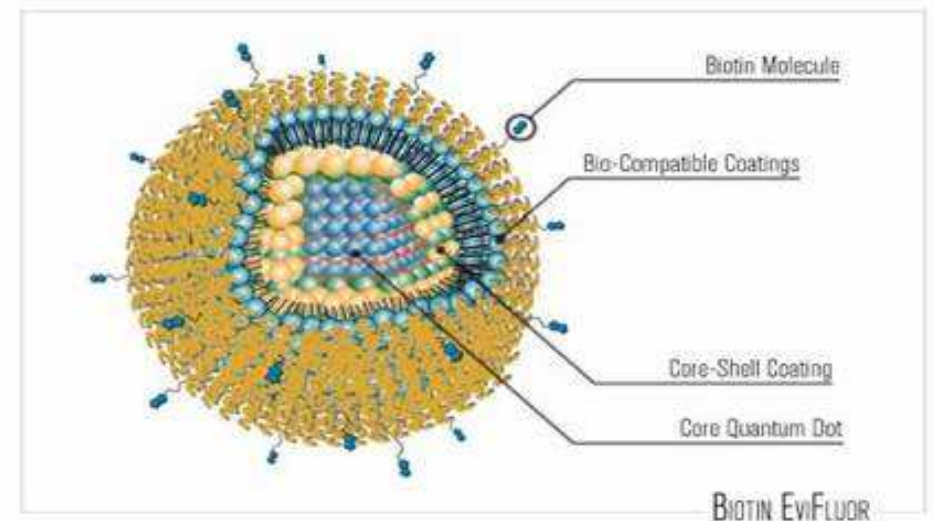
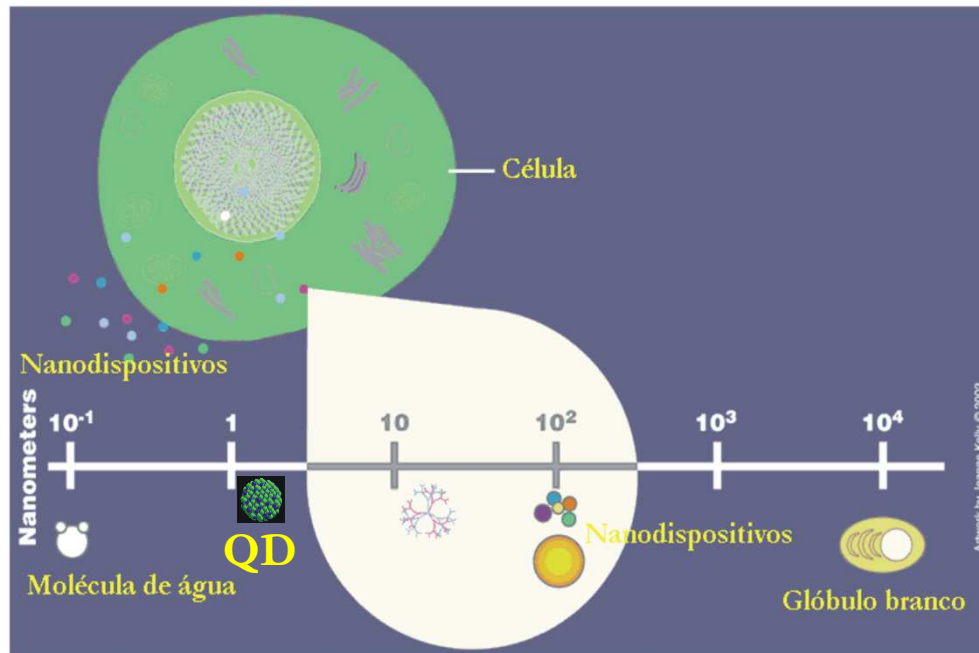
Alterando o tamanho, a forma, e a composição dos QDs, as **propriedades espectroscópicas** dos QDs alteram-se de forma dramática.

<http://www.evidenttech.com/quantum-dots-explained/how-quantum-dots-work.html>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ocancro-e-quantum-dots.wmv>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/qds-nasa.wmv>

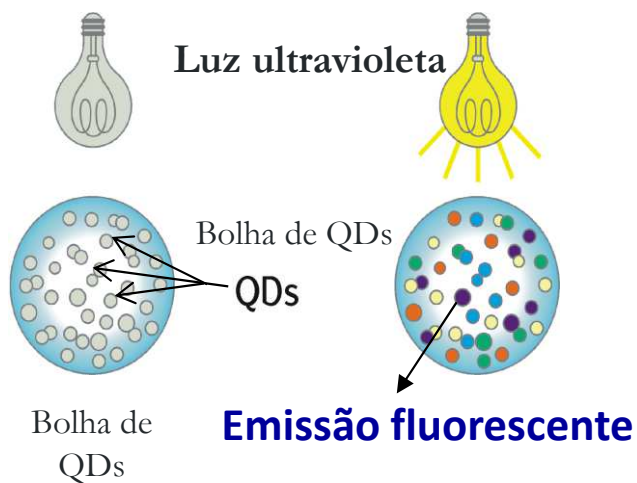
Aplicações de pontos quânticos na Medicina



qds-nasa.wmv

ocancro-e-quantum-dots.wmv

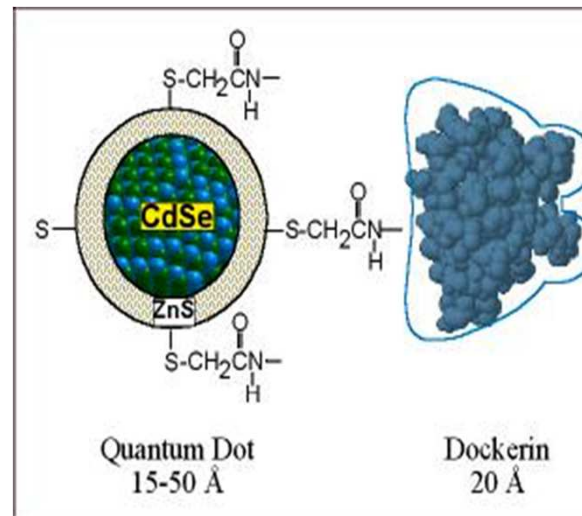
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ocancro-e-quantum-dots.wmv>



<http://w3.ualg.pt/~jlongras/qds-nasa.wmv>

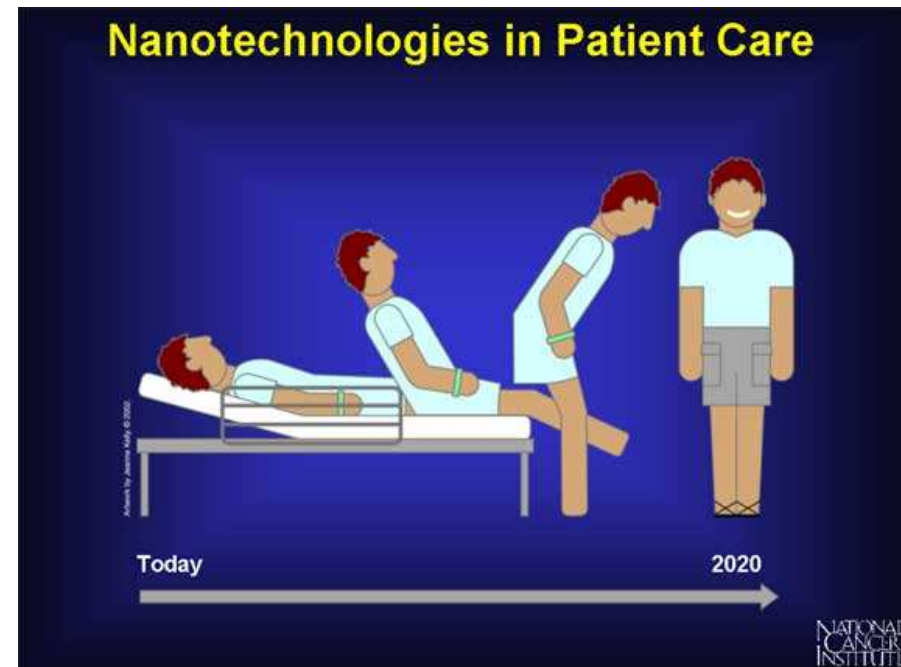
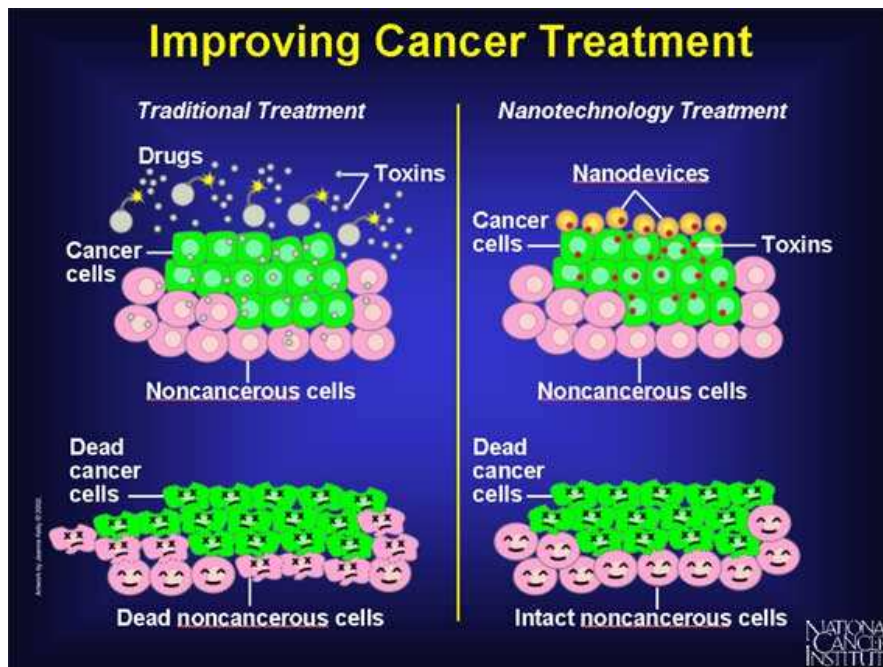
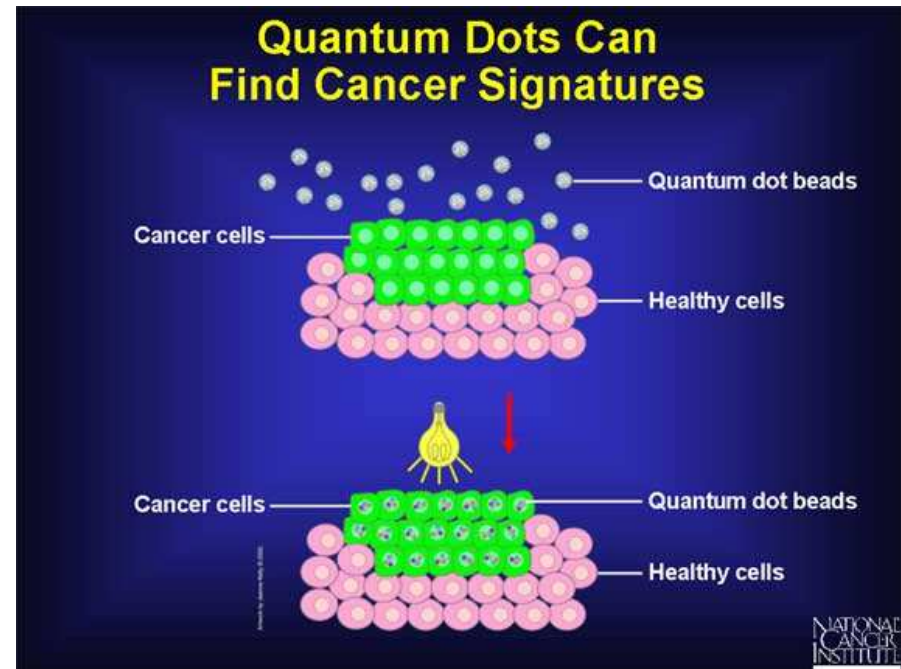
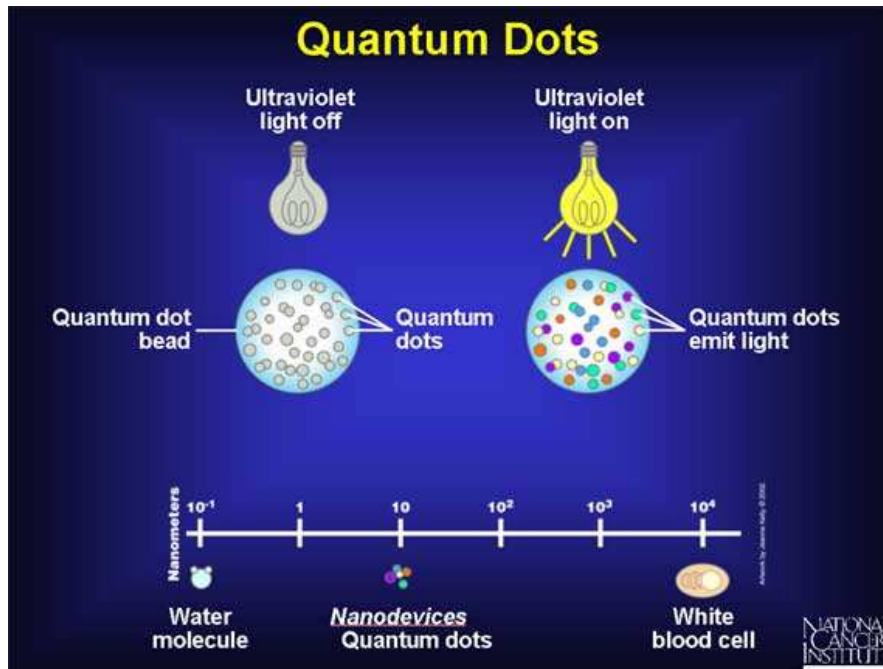
Ver aplicações em medicina em: <http://www.cancer.gov/cancertopics/understandingcancer/nanodevices>

2011-2012



Bull's-eye. Red quantum dots injected into a live mouse mark the location of a tumor.

Aplicações de pontos quânticos em Medicina



Nanopartículas

Será o ouro sempre
“amarelado”?

Gold Building Blocks

Atoms:
colorless, 1 Å

Gold clusters:
orange, nonmetallic,
<1 nm

Gold nanoparticles:
3–30 nm, red, metallic,
“transparent”

Gold particles:
30–500 nm
metallic, turbid,
crimson to blue

Bulk gold film



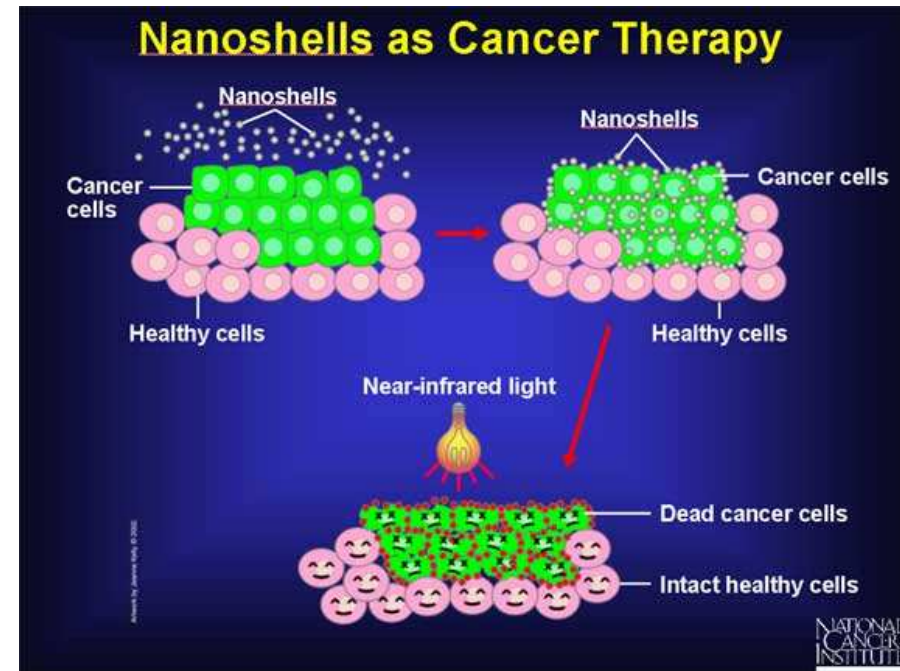
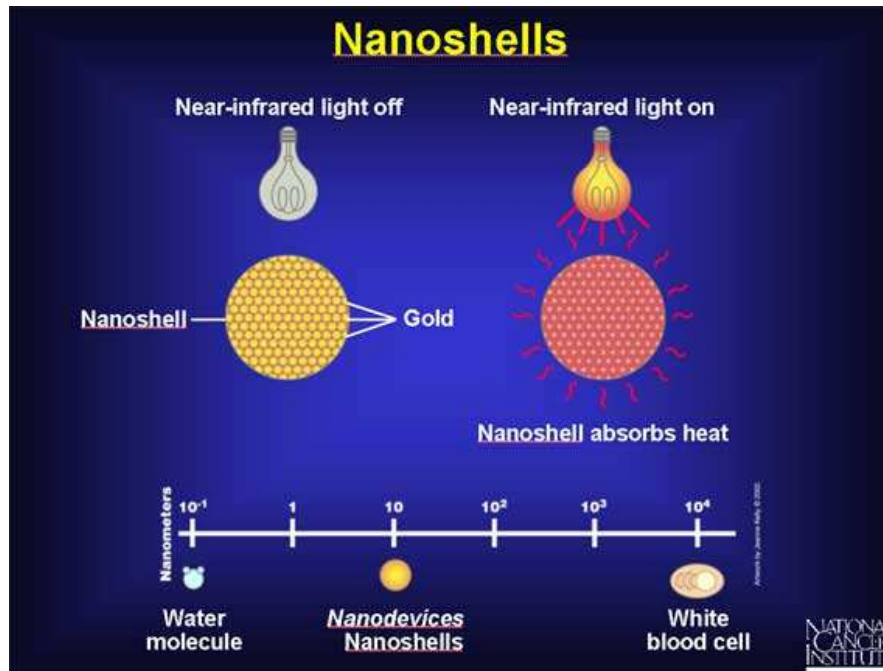
Figure 1. Gold building blocks, from the atomic to the mesoscopic, and their changing colors.

Una nanopartícula (nanopolvo, nanoracimo, o nanocristal) es una partícula microscópica con por lo menos una dimensión menor que 100 [nm](#). Actualmente las nanopartículas son un área de intensa investigación científica, debido a una amplia variedad de aplicaciones potenciales en los campos de [biomédicos](#), [ópticos](#), y [electrónicos](#). La [Iniciativa Nacional de Nanotecnología](#) del gobierno de los [Estados Unidos](#) ha conducido cantidades enormes de financiamiento exclusivamente para la investigación de las nanopartículas. pinche sos joto y puñal le usta la BIIID

Imagens de nanopartículas

http://images.google.pt/images?q=Nanoparticle&oe=utf-8&rls=org.mozilla:pt-PT:official&client=firefox-a&um=1&ie=UTF-8&ei=ckPTSvfnJYb_Aa74ozZAg&sa=X&oi=image_result_group&ct=title&resnum=4&ved=0CCcQsAQwAw

Aplicações de nanopartículas em Medicina



<http://www.abril.com.br/noticias/ciencia-saude/nanopartacula-ouro-pode-ajudar-tratar-doencas-como-cancer-412027.shtml>

Segundo cientistas do Massachusetts Institute of Technology (MIT), o sistema torna possível liberar uma quantidade determinada de remédios em partes específicas do corpo durante intervalos controlados. Em reportagem, a BBC afirma que a tecnologia funciona porque as nanopartículas desenvolvidas pelo MIT se dissolvem quando expostas a diferentes níveis de luz infravermelha. Com isso, os cientistas poderiam fazer com que as partículas carregassem remédios e liberassem a droga no corpo humano de forma controlada. A pesquisa foi publicada na revista científica ACS Nano. Uma das vantagens de se levar remédios directamente a lugares específicos do corpo é que isso permite que drogas relativamente mais tóxicas e eficientes sejam usadas com menos risco de danos colaterais a outros órgãos do corpo. No caso do câncer, os remédios poderiam ser aplicados directamente em tumores, evitando alguns dos efeitos colaterais de terapias tradicionais, como a quimioterapia. Algumas nanopartículas de ouro chegam a ter apenas um nanómetro, que equivale a um bilionésimo de um metro. Quando elas chegam ao local do corpo onde o remédio deve agir, o corpo é exposto à luz infravermelha, que penetra a pele. A alta temperatura dissolve a nanopartícula, que libera a droga do seu interior.

[ocancro-e-quantum-dots.wmv](#)

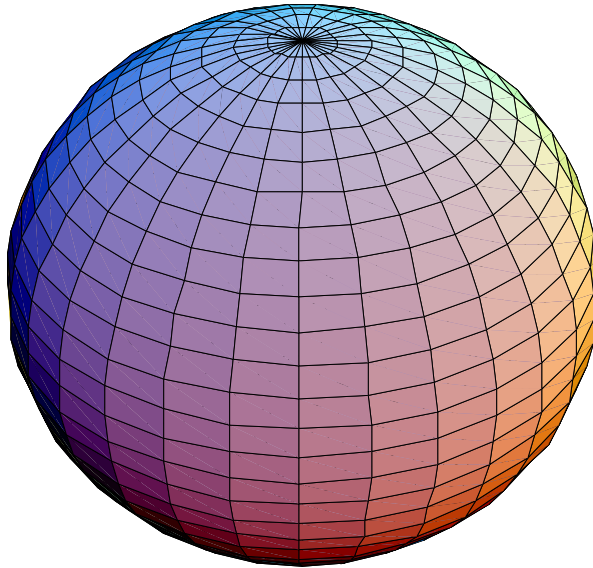
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/qds-nasa.wmv>

Ver aplicações em medicina em: <http://www.cancer.gov/cancertopics/understandingcancer/nanodevices>

2011-2012 <http://w3.ualg.pt/~jlongras/ocancro-e-quantum-dots.wmv>

Nanopartículas

É tudo uma questão de superfície: Compare a área de uma esfera de ferro com 1 kg de massa com a área total do número de esferas de ferro de raio 1 nm cuja massa total perfaz 1 kg de Fe. (380 000 m².)



$$V = \frac{4\pi}{3} R^3$$

$$S = 4\pi R^2$$

$$\frac{S}{V} = \frac{3}{R}$$

<http://www.abril.com.br/noticias/ciencia-saude/nanopartacula-ouro-pode-ajudar-tratar-doencas-como-cancer-412027.shtml>

Nanocristais poderão revolucionar energia solar

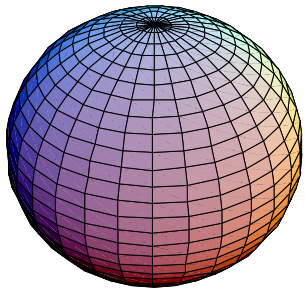
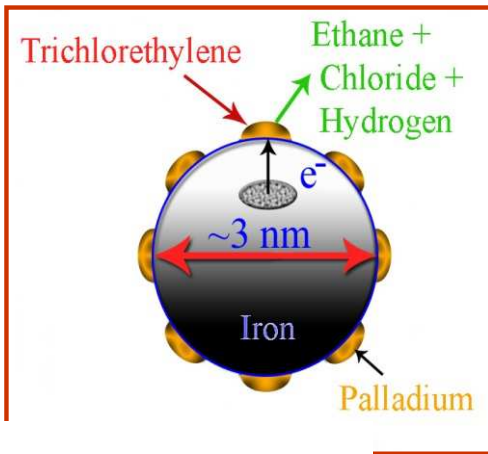
<http://www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=010115060207>

As inimagináveis potencialidades da Nanotecnologia, *Mundus* 2006 Número 10.

Nanopartículas

Nanopartícula de ferro como *despoluente* de água

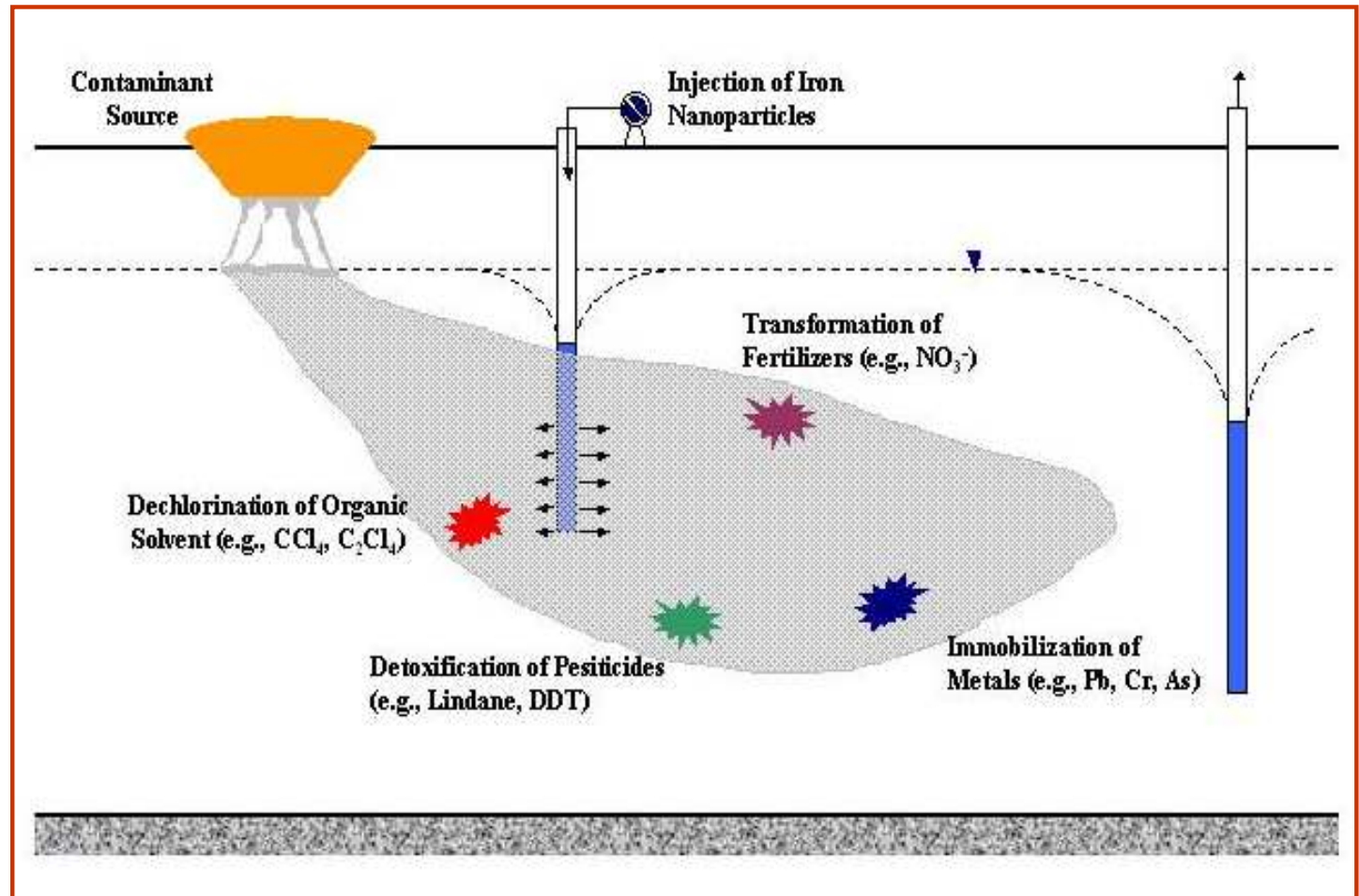
figueiredo/)



$$V = \frac{4\pi}{3} R^3$$

$$S = 4\pi R^2$$

$$\frac{S}{V} = \frac{3}{R}$$



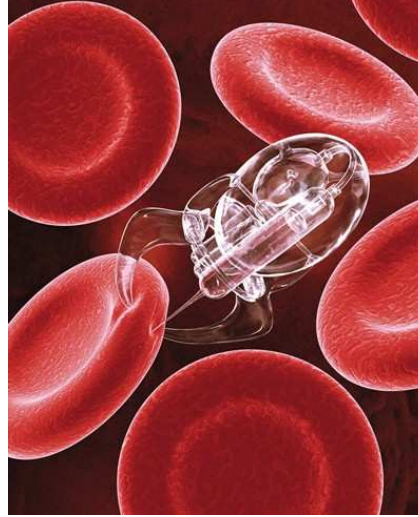
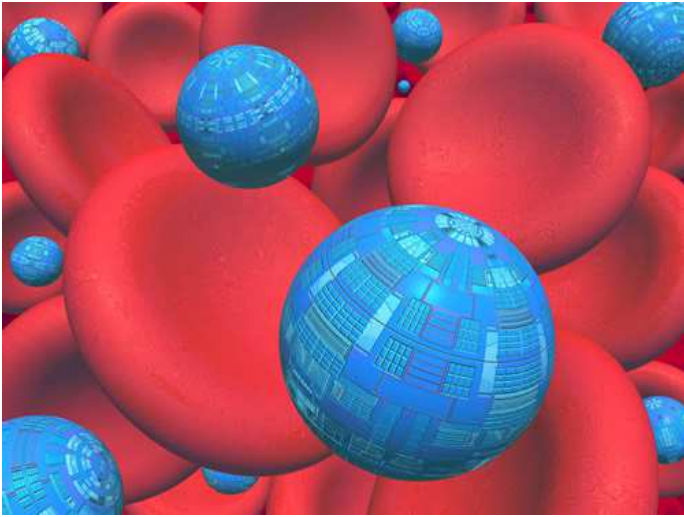
http://images.google.pt/images?q=Nanoparticle&oe=utf-8&rls=org.mozilla:pt-PT:official&client=firefox-a&um=1&ie=UTF-8&ei=ckPTSvfnJYb_Aa74ozZAg&sa=X&oi=image_result_group&ct=title&resnum=4&ved=0CCcQsAQwAw

Nanotecnologia



<http://www.inl.int/>

Nano máquinas e nano robôs

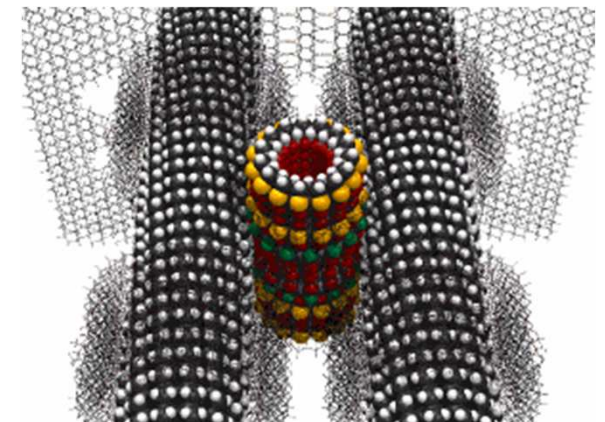
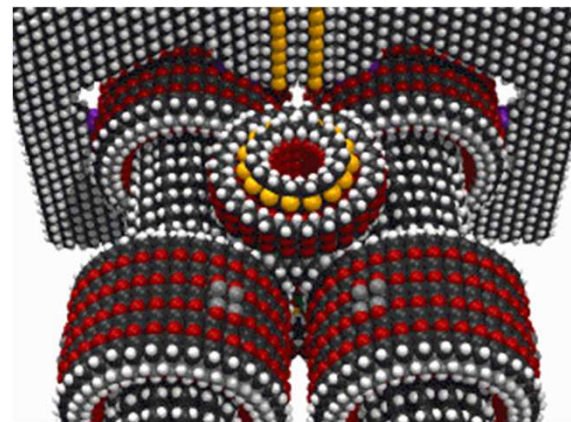


[Fantastic Voyage \(1966\)](#)

<http://www.imdb.com/title/tt0060397/>

<http://nanoinformatic.org/>

[Nano Informática em
Discussão na União
Europeia](#)

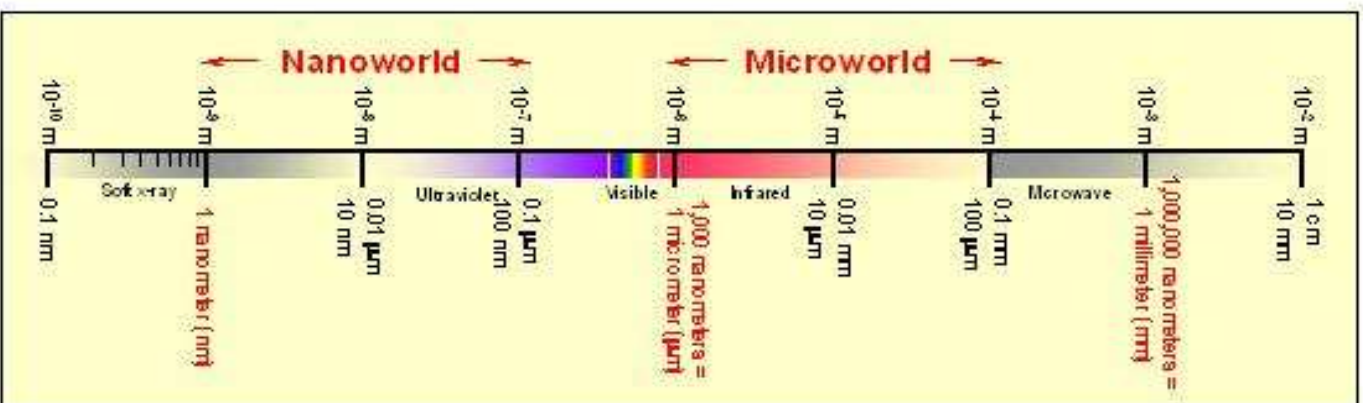
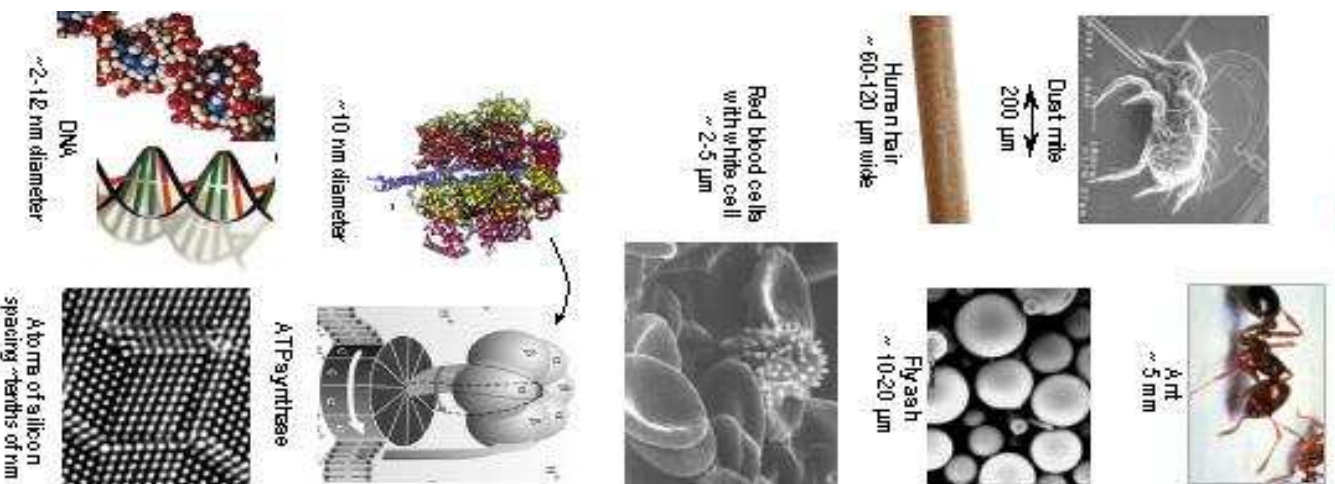


[As inimagináveis potencialidades da Nanotecnologia](#), *Mundus* 2006.

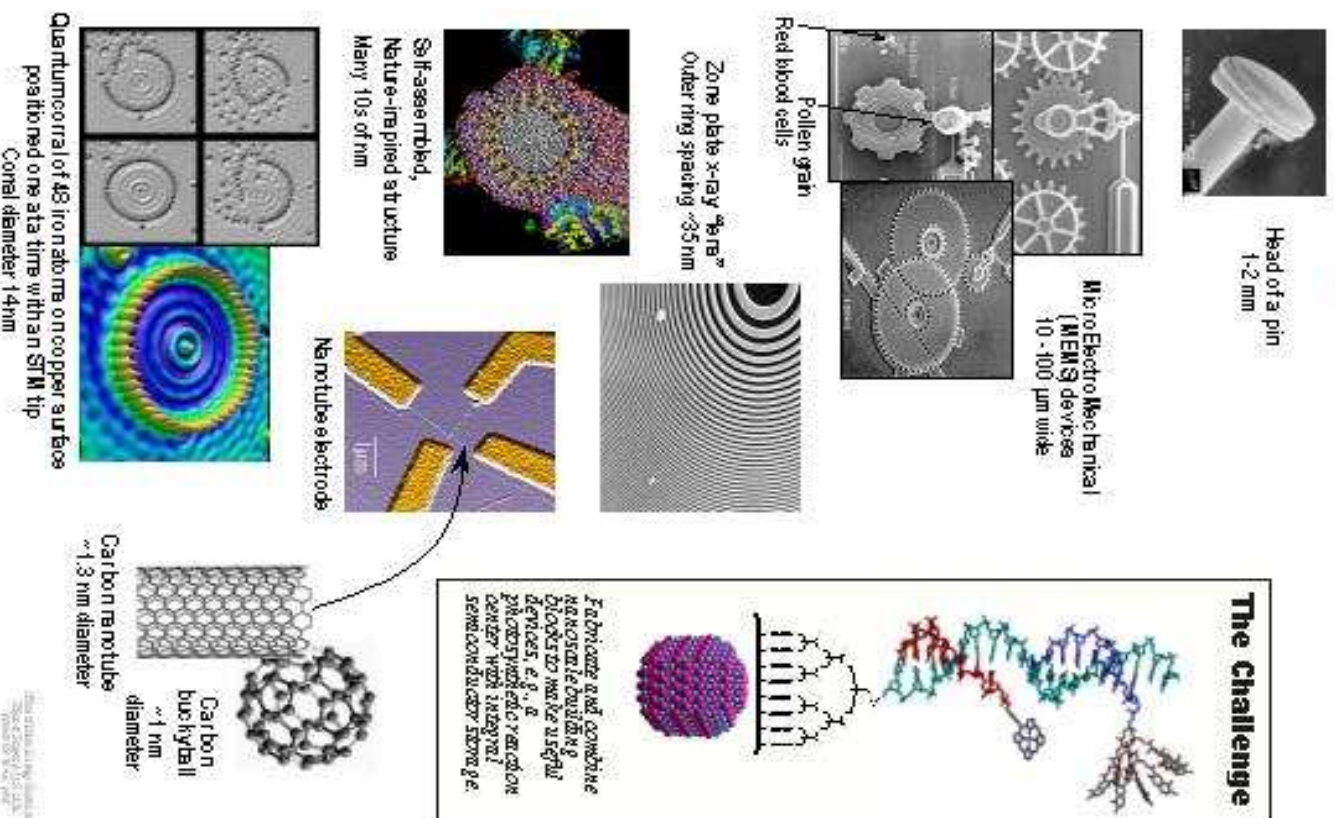
<http://w3.ualg.pt/%7Ejlongras/Entrevista-Mundus.pdf>

The Scale of Things – Nanometers and More

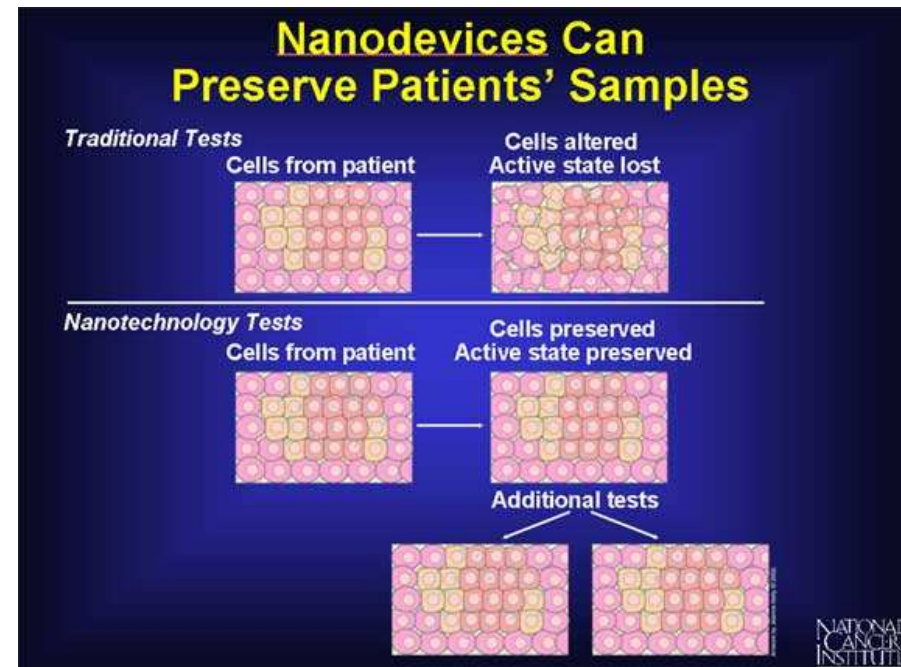
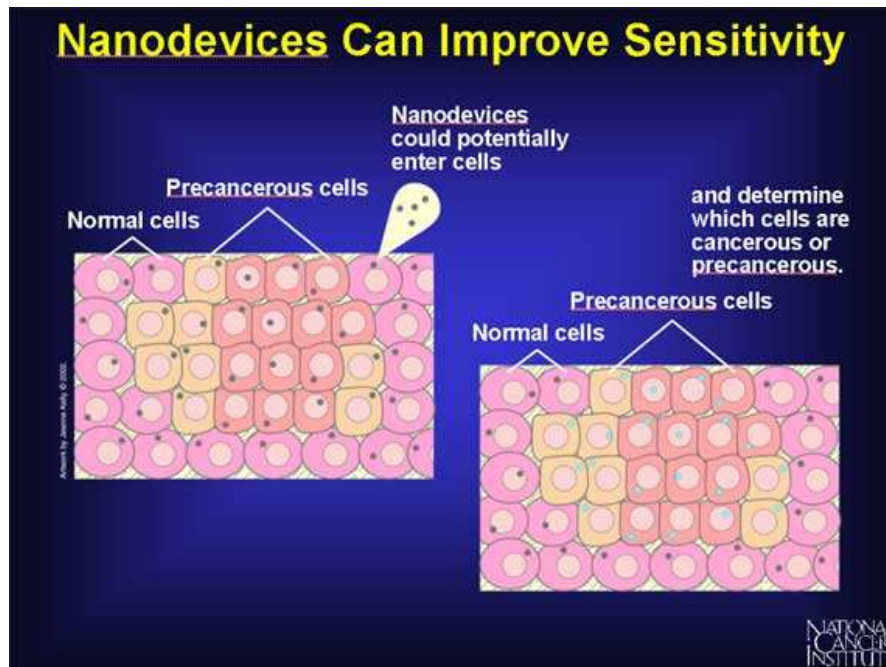
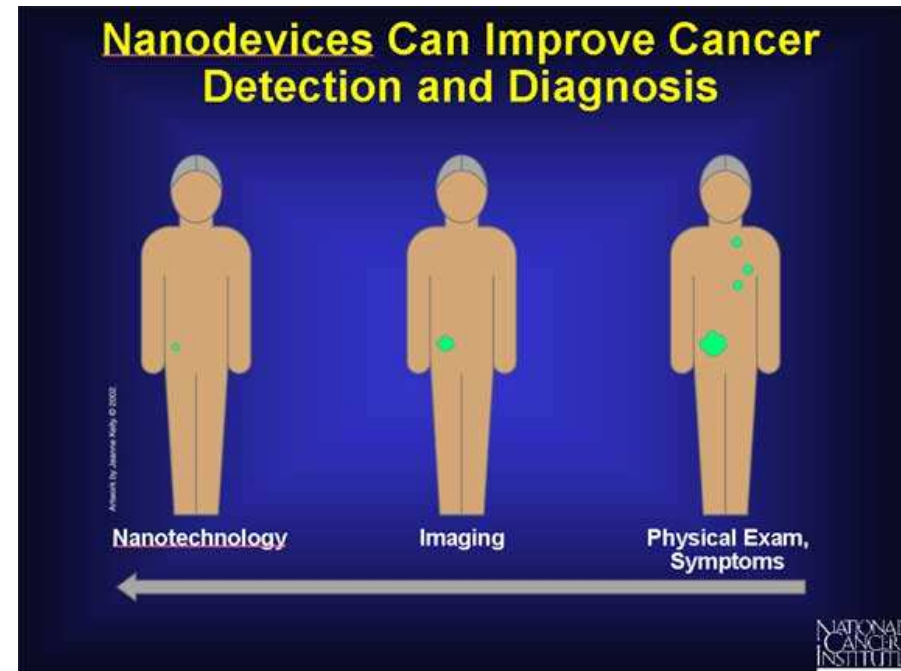
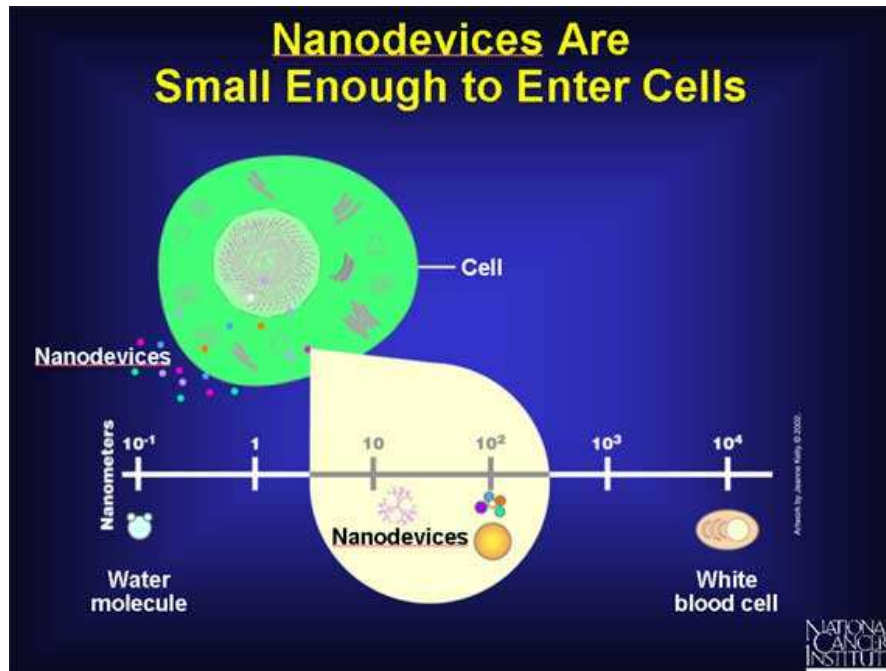
Things Natural



Things Manmade

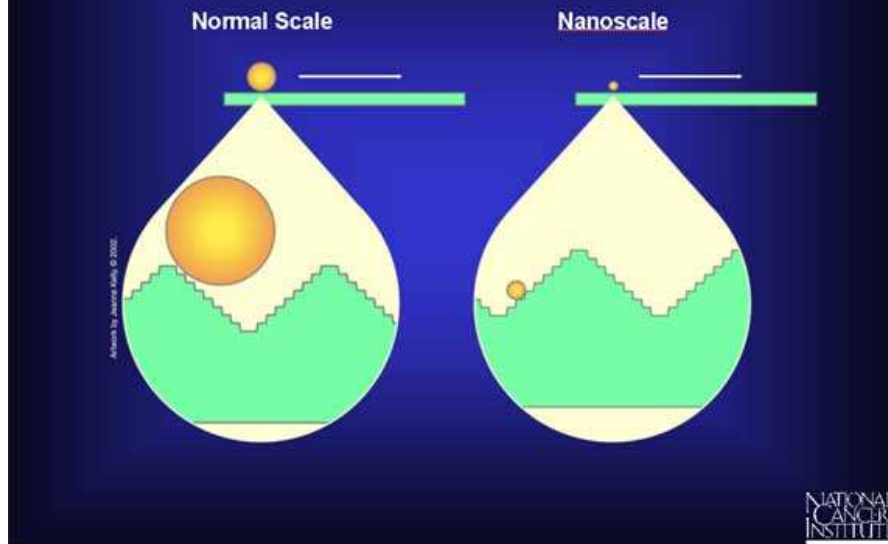


Nanotecnologia e a Medicina

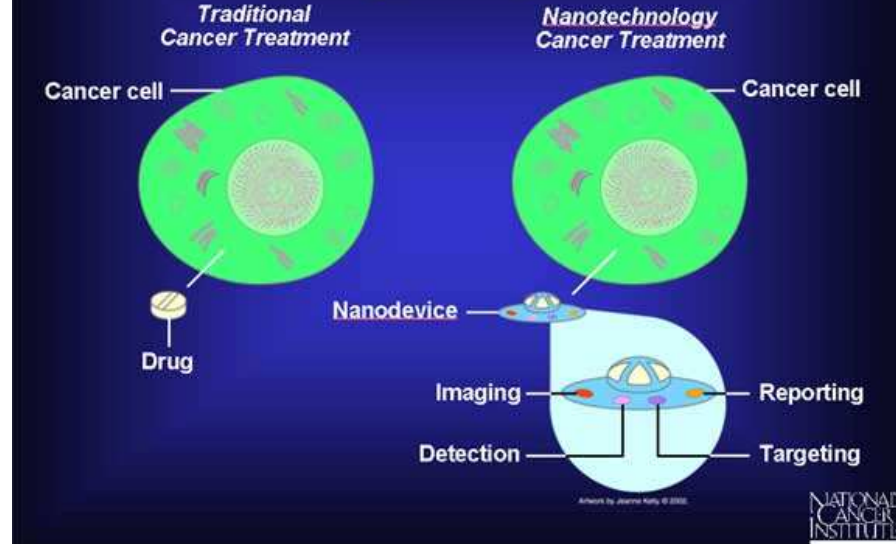


Nanotecnologia e a Medicina

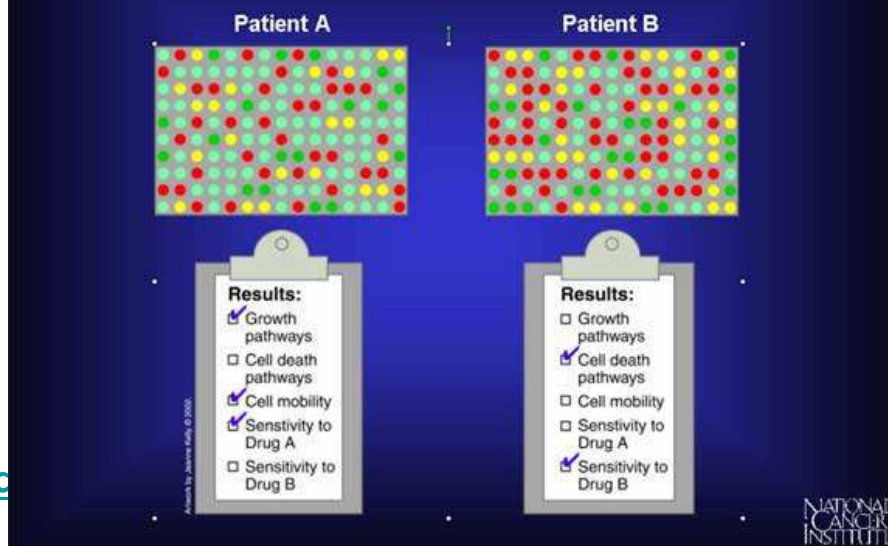
Nanotechnology Plays by Different Rules



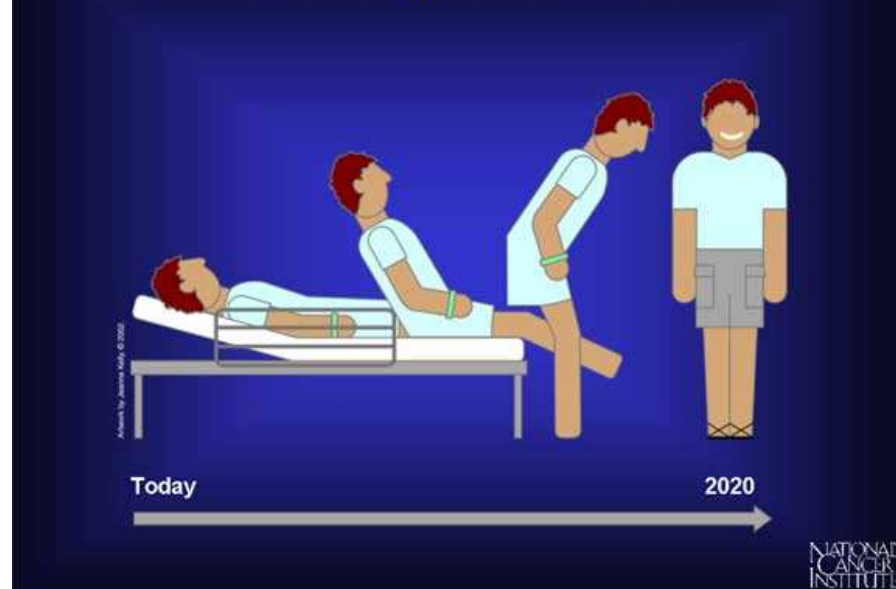
Nanodevices as a Link Between Detection, Diagnosis, and Treatment



Nanodevices Can Make Cancer Tests Faster and More Efficient



Nanotechnologies in Patient Care



Estrutura atômica segundo a Mecânica Quântica

2011-2012

Elementos

Discovery Year

1669 1999

known to ancients

1																	18
H 1766																	He 1895
2																	
Li 1817	Be 1798																
Na 1807	Mg 1808																
		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12						
K 1807	Ca 1808	Sc 1879	Ti 1791	V 1830	Cr 1797	Mn 1774	Fe ancie	Co 1737	Ni 1751	Cu ancie	Zn 1746	Ga 1875	Ge 1886	As ancie	Se 1817	Br 1826	Kr 1898
Rb 1861	Sr 1790	Y 1794	Zr 1789	Nb 1801	Mo 1778	Tc 1837	Ru 1844	Rh 1803	Pd 1803	Ag ancie	Cd 1817	In 1863	Sn ancie	Sb ancie	Te 1782	I 1811	Xe 1898
Cs 1860	Ba 1808	La 1839	Hf 1923	Ta 1802	W 1783	Re 1925	Os 1804	Ir 1804	Pt 1741	Au ancie	Hg ancie	Tl 1861	Pb ancie	Bi ancie	Po 1898	At 1940	Rn 1900
Fr 1939	Ra 1898	Ac 1899	Rf 1964	Db 1970	Sg 1974	Bh 1976	Hs 1984	Mt 1982	Uun 1994	Uuu 1996	Uub 1996	113 --	Uuq 1999	115 --	116 --	117 --	118 --

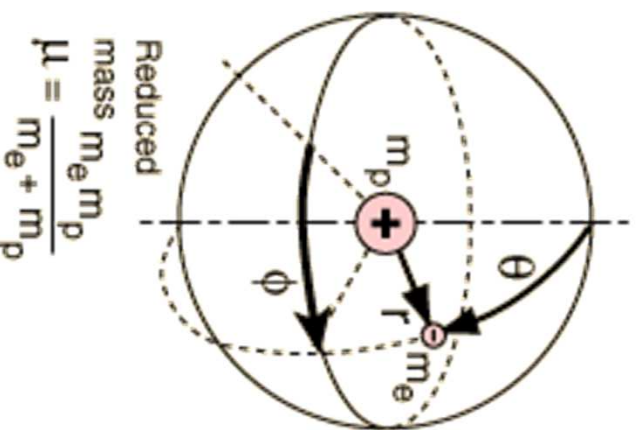
☒ Values

☐ Log scale

Ce 1803	Pr 1885	Nd 1885	Pm 1945	Sm 1879	Eu 1901	Gd 1880	Tb 1843	Dy 1886	Ho 1879	Er 1843	Tm 1879	Yb 1878	Lu 1907
Th 1828	Pa 1917	U 1789	Np 1940	Pu 1940	Am 1945	Cm 1944	Bk 1949	Cf 1950	Es 1952	Fm 1953	Md 1955	No 1966	Lr 1961

- 49 de 92 elementos naturais foram descobertos no século XIX!

Átomo de hidrogénio segundo a Mecânica Quântica



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

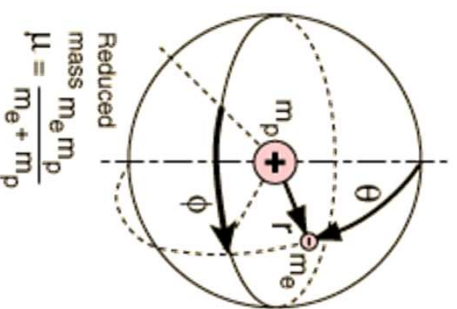
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + U(x, y, z) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi) \quad \rightarrow \quad \Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$

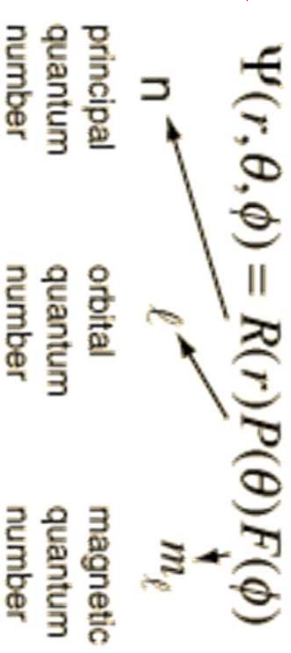
$$\begin{matrix} \nearrow n \\ \nearrow \ell \\ \downarrow m_\ell \end{matrix}$$

principal quantum number	orbital quantum number	magnetic quantum number
--------------------------------	------------------------------	-------------------------------

Átomo de hidrogénio segundo a Mecânica Quântica



$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi) \rightarrow \Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$



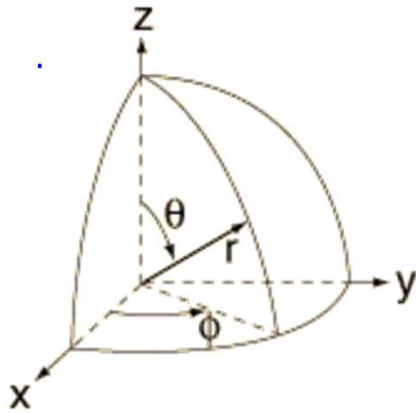
$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR}{dr} \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} (Er^2 + ke^2 r) = l(l+1) \rightarrow R_{n,l} = r^l L_{n,l} e^{-r/na_0}$$

$$R(r) \xrightarrow{\text{Solution exists if and only if ...}} n = 1, 2, 3 \dots \rightarrow E_n = \frac{-me^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{-13.6\text{eV}}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\frac{\sin\theta}{P} \frac{d}{d\theta} \left[\sin\theta \frac{dP}{d\theta} \right] + C_r \sin^2\theta = -C_\phi \rightarrow P(\theta) \xrightarrow{\text{Solution exists if and only if ...}} l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$\frac{1}{F} \frac{d^2 F}{d\phi^2} = C_\phi \rightarrow F(\phi) = A e^{im_\ell \phi} \rightarrow F(\phi) \xrightarrow{\text{Solution exists if and only if ...}} m_\ell = -l, -l+1, \dots, +l$$

Quantização da energia



The three spherical coordinates are associated with the three spatial quantum numbers.

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$

n

principal
quantum
number

ℓ

orbital
quantum
number

m_ℓ

magnetic
quantum
number

$R(r) \rightarrow$ Principal quantum number

$P(\vartheta) \rightarrow$ Orbital quantum number

$F(\varphi) \rightarrow$ Magnetic quantum number

n

ℓ

m_ℓ

Quantização da energia

$$E_n = \frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = \frac{-13.6eV}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Quantização do momento angular orbital

Quantização do momento angular orbital ($L = r m v \sin\theta$)

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

ℓ = angular momentum quantum number

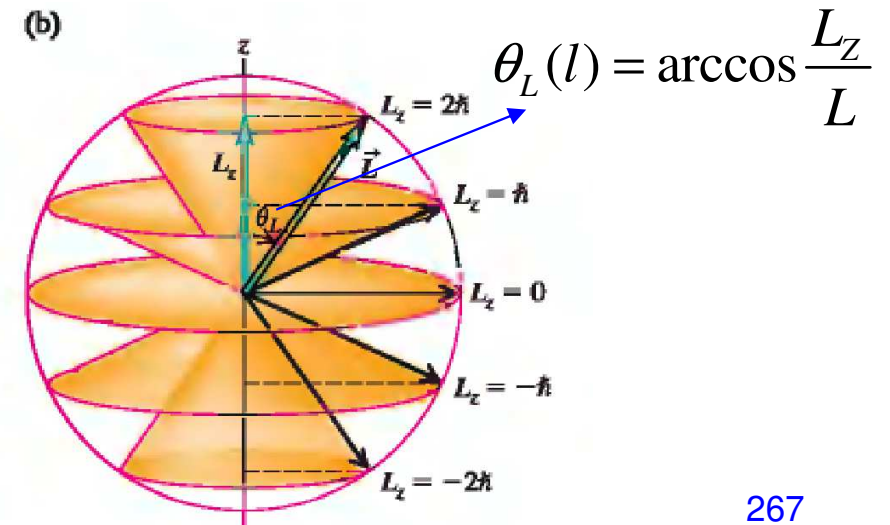
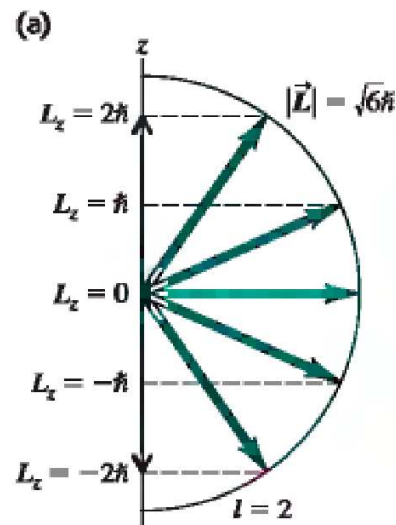
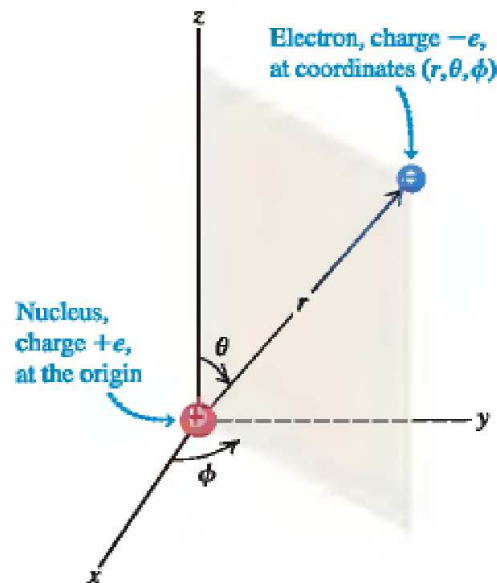
$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Os valores da componente de L numa dada direcção, e.g., componente z , também estão **quantizados**:

$$L_z = m_\ell \hbar$$

Número quântico magnético:

$$m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell$$



$$\theta_L(l) = \arccos \frac{L_z}{L}$$

Números quânticos n , ℓ e m_ℓ

Quantização da energia

$$E_n = \frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = \frac{-13.6\text{eV}}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Quantização do momento angular orbital

($L = r m v \sin\theta$):

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

ℓ = angular momentum quantum number

$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$

Número quântico magnético: os valores da componente de L numa dada direcção, e.g., componente z , estão **quantizados**:

$$L_z = m_\ell \hbar \quad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, +\ell$$

Table 41.1 Quantum States of the Hydrogen Atom

n	ℓ	m_ℓ	Spectroscopic Notation	Shell
1	0	0	1s	K
2	0	0	2s	L
2	1	-1, 0, 1	2p	
3	0	0	3s	M
3	1	-1, 0, 1	3p	
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	
4	0	0	4s	N

and so on

"sharp"	s	$\ell = 0$
"principal"	p	$\ell = 1$
"diffuse"	d	$\ell = 2$
"fundamental"	f	$\ell = 3$

For example, if $n=2$, $\ell=1$, the state is designated 2p

Notação espectroscópica

Números quânticos

Os **números quânticos** caracterizam os estados e as energias dos átomos e são de enorme relevância quando se trata de descrever a distribuição dos electrões nos átomos.

O **número quântico principal** n pode tomar como valor qualquer número inteiro positivo. Como o próprio nome o sugere, este número quântico é o mais importante, pois o seu valor define a energia do átomo de hidrogénio (ou de qualquer outro átomo **mono-electrónico** de carga nuclear Z) por meio da equação:

$$E_n = -E_0 Z^2 / n^2.$$

Números quânticos

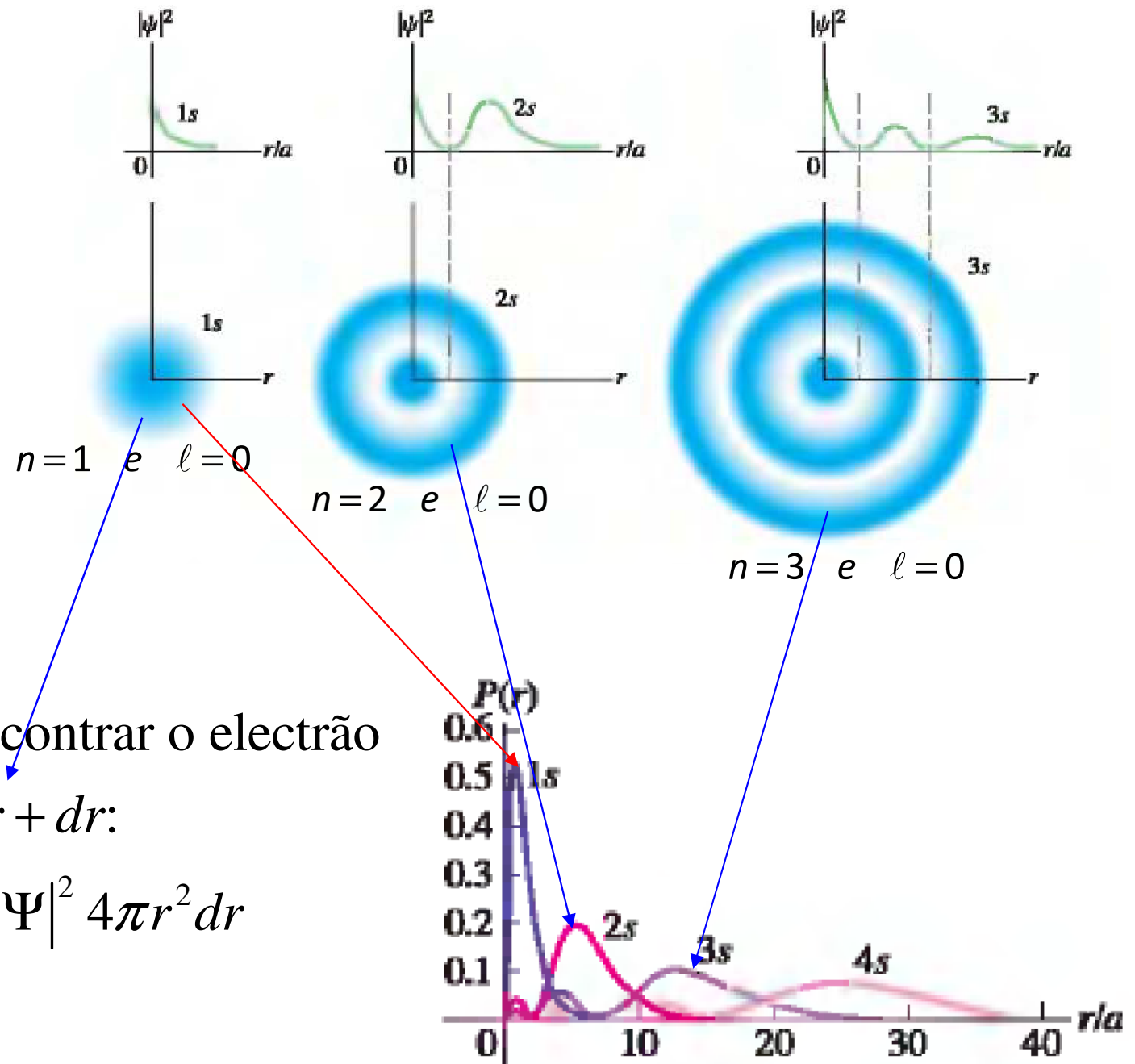
O **número quântico de momento angular**, ou azimutal, l , caracteriza a forma das orbitais. Como o próprio nome indica, o valor de l define o momento angular do electrão, sendo que o aumento do seu valor implica o aumento correspondente do valor do momento angular. Deste modo, a energia cinética do electrão é associada ao movimento angular e está dependente da energia total do electrão, pelo que é natural que os valores permitidos de l estejam associados ao número quântico principal. Para um dado valor de n , l pode ter como valores possíveis os números inteiros de 0 a $(n - 1)$.

O **número quântico magnético**, m_l , especifica a orientação permitida para uma nuvem electrónica no espaço, sendo que o número de orientações permitidas está directamente relacionado à forma da nuvem (designada pelo valor de l). Dessa forma, este número quântico pode assumir valores inteiros de $-l$, passando por zero, até $+l$.

Distribuição de probabilidade dos electrões

Átomo de hidrogénio

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$



Probabilidade de encontrar o electrão
na região entre r e $r + dr$:

$$P(r)dr = |\Psi|^2 dV = |\Psi|^2 4\pi r^2 dr$$

Raio de Bohr

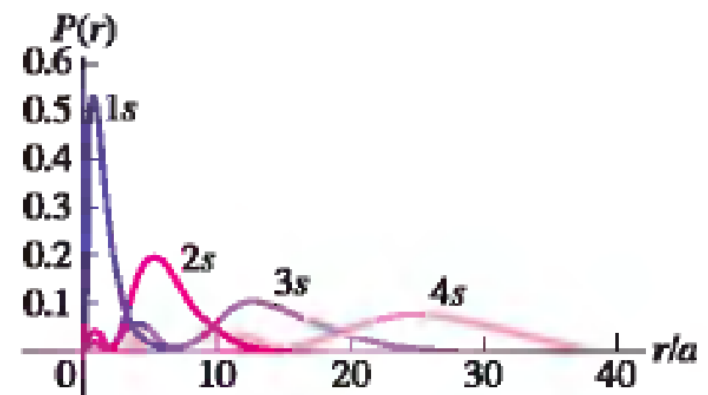
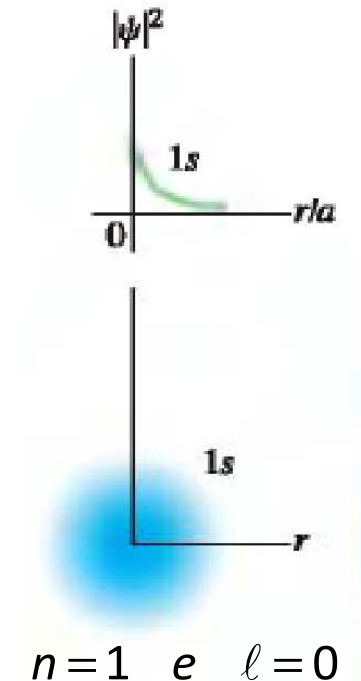
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

Valor médio da distância do electrão ao núcleo no átomo de hidrogénio no estado fundamental

$$\langle r \rangle = \int_0^{+\infty} \left(|\Psi|^2 |\Psi|^2 4\pi r^2 \right) r dr = a_0$$

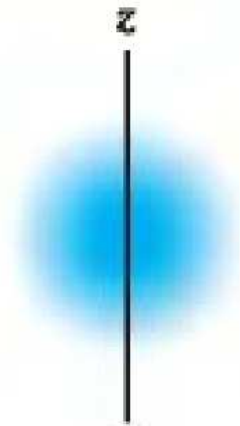
Raio de Bohr: $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \sim 52,9 \text{ pm}$

Massa reduzida: $m_r = \frac{m_e m_N}{m_e + m_N}$, $m_e \equiv$ massa do electrão, $m_N \equiv$ massa do núcleo



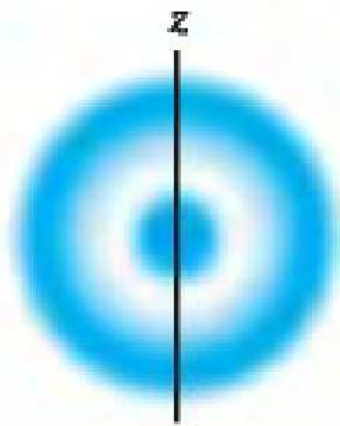
Distribuição de probabilidade dos electrões

$n=1$ e $\ell=0$



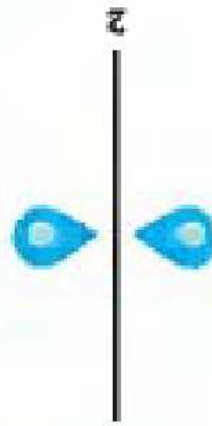
$1s, m_l = 0$

$n=2$ e $\ell=0$



$2s, m_l = 0$

$n=2$ e $\ell=1$



$2p, m_l = \pm 1$

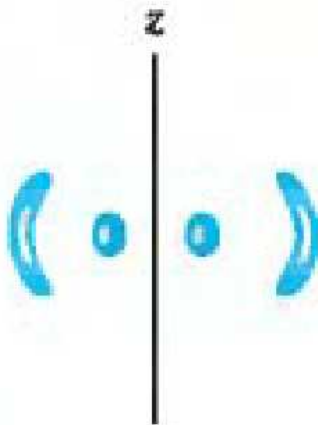
$n=2$ e $\ell=1$



$2p, m_l = 0$



$3p, m_l = 0$



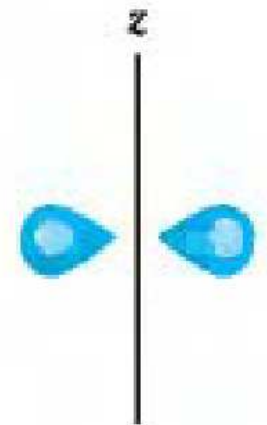
$3p, m_l = \pm 1$



$3d, m_l = 0$



$3d, m_l = \pm 1$



$3d, m_l = \pm 2$

$n=3$ e $\ell=1$

$n=3$ e $\ell=1$

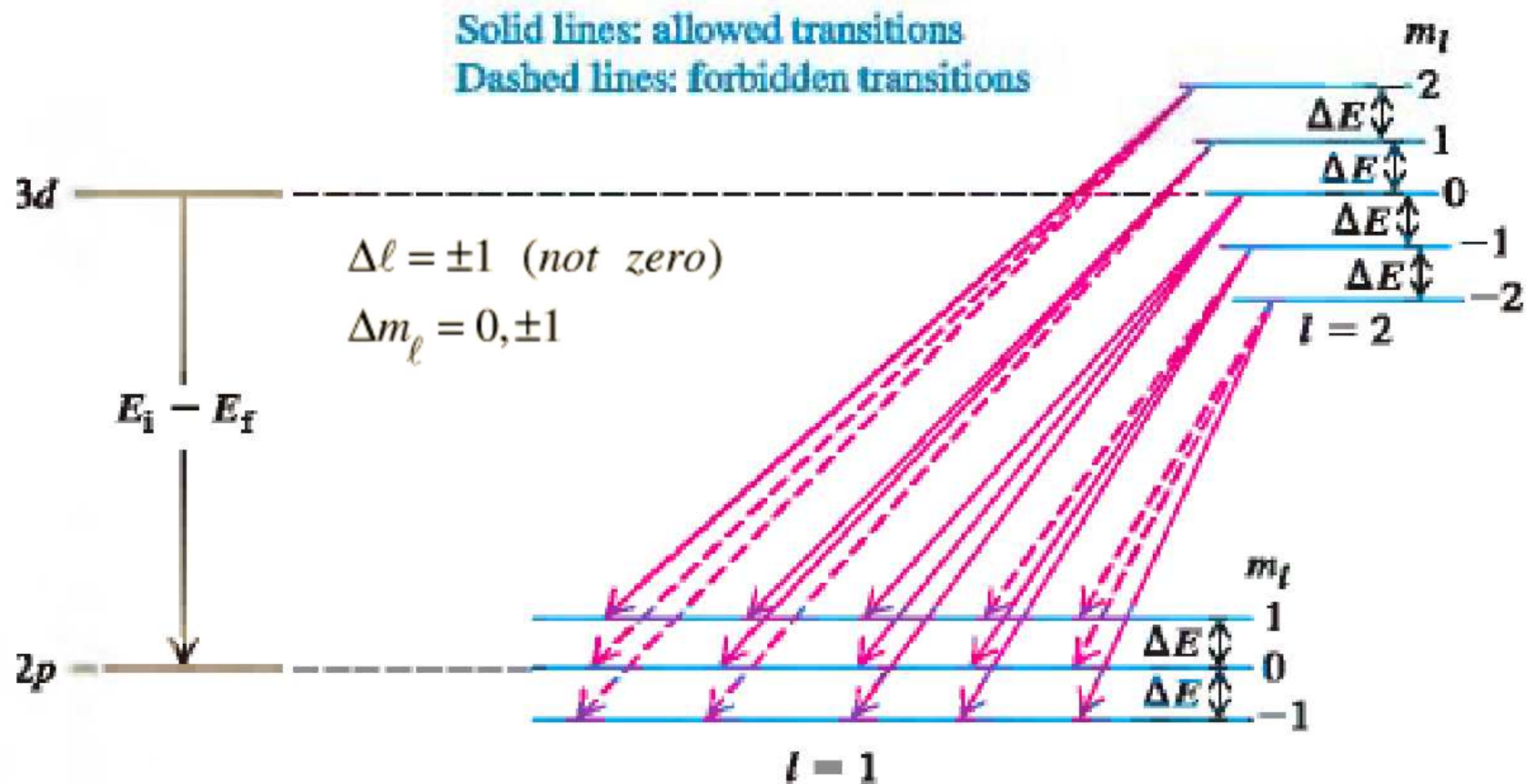
$n=3$ e $\ell=2$

$n=3$ e $\ell=2$

$n=3$ e $\ell=2$

Regras de selecção para as transições atómicas

Segundo a Mecânica Quântica um fóton tem um momento angular intrínseco (ou “spin”) igual a $\hbar$ (e, portanto, número quântico de *spin* igual a 1). Por isso, do ponto de vista quântico a emissão de um fóton é sempre acompanhada pela variação de uma unidade no valor do número quântico do momento angular. O número quântico magnético pode não variar ou variar de uma unidade.



Regras de selecção para as transições atómicas

Em geral, nos fenómenos espectrais não se observam todas as transições possíveis entre os diferentes pares de níveis de energia. Algumas transições são “**proibidas**” (i.e., **são muito pouco prováveis**), enquanto outras são “**permitidas**”. As regras de selecção para as transições atómicas do tipo eléctrico dipolo impõe que nas transições o número quântico l apenas pode variar de uma unidade, e o número quântico magnético pode tomar os valores 0 ou ± 1 . (O campo eléctrico oscilante associado às transições assemelha-se a um dipolo eléctrico oscilante)

Porque é que l tem de variar de uma unidade?

Segundo a Mecânica Quântica **um fóton tem um momento angular intrínseco** (ou “**spin**”) igual a $\hbar$ (e, portanto, **número quântico de *spin* igual a 1**).

A lei da conservação do momento angular exige que a emissão de um fóton tenha como consequência que o momento angular do átomo varie de uma unidade. Se o número quântico de momento angular varia de uma unidade, o número quântico magnético pode não variar ou variar ± 1 .

Efeito Zeeman

O efeito Zeeman, descoberto em 1896, é o desdobramento de algumas riscas espectrais de um espectro em resposta à aplicação de um campo magnético B à amostra. **Este efeito confirma a quantização do momento angular.**

Revisões: Momento magnético

$$\vec{\mu} = I\vec{A} \rightarrow \mu = \frac{e}{2m}L$$

Energia potencial

$$U = \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

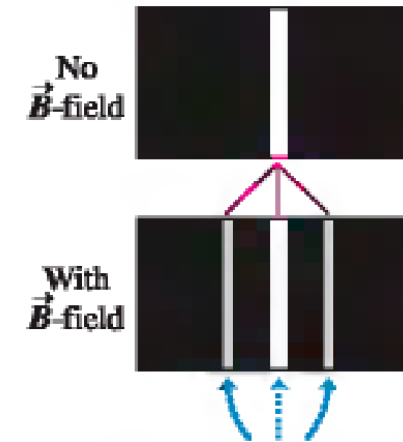
Se o campo magnético for segundo z

$$U = -\mu_z B \rightarrow \mu_z = -\frac{e}{2m}L_z \rightarrow \mu_z = -\frac{e}{2m}L_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

Energia de interacção

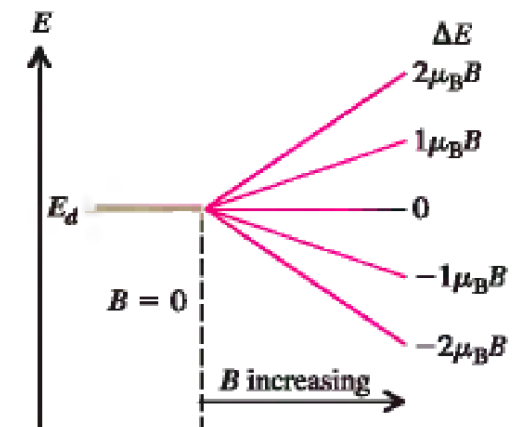
$$U = -\mu_z B = m_l \frac{e\hbar}{2m} B \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

(orbital magnetic interaction energy)



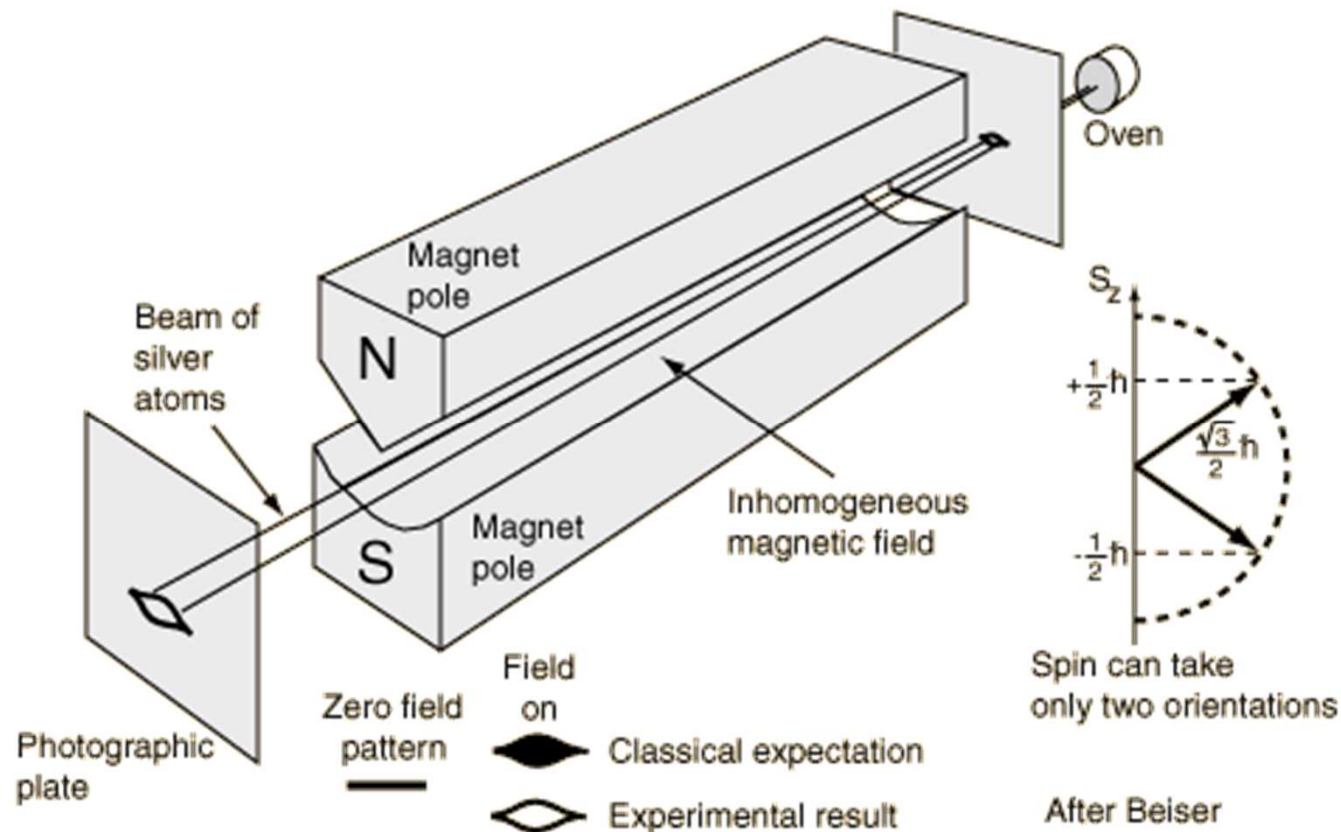
When an excited gas is placed in a magnetic field, the interaction of orbital magnetic moments with the field splits individual spectral lines of the gas into sets of three lines.

41.10 Splitting of the energy levels of a d state ($l = 2$) caused by an external magnetic field, assuming only an orbital magnetic moment.

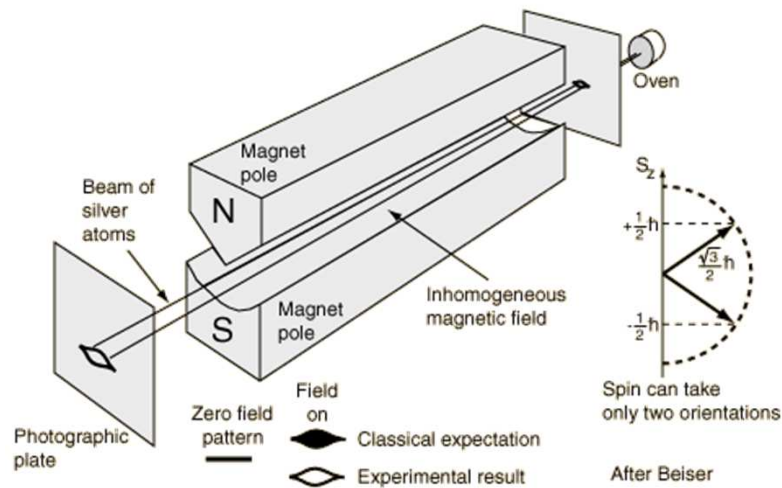


Spin do electrão e número quântico de spin

Spin é a designação do momento cinético intrínseco do electrão e de outras partículas. O spin não é devido ao facto de a partícula estar a descrever qualquer órbita. É uma propriedade quântica que caracteriza as possíveis orientações que partículas sub-atómicas, como protões, electrões, neutrões, alguns núcleos atómicos, etc., têm quando estão numa região onde existe um campo magnético.



Spin do electrão e número quântico de spin



O *spin* não possui uma interpretação clássica, ou seja, é um fenómeno estritamente quântico. Embora o termo tenha surgido considerando que os electrões tinham movimento de rotação, e por isso produziram um campo magnético, da mesma forma que uma *volta* (espira) de fio percorrido por uma corrente eléctrica produz um campo magnético (ver [Oersted](#)).

Esta descrição não é adequada para os neutrões, que não possuem carga eléctrica, nem explica valores de spin para certos núcleos atómicos como $7/2$ (neste caso, ^{235}U). Assim, o termo *spin* é encarado como um quarto **número quântico**, que é necessário para caracterizar os estados possíveis de um sistema, como os níveis de energia no átomo.

Momento angular de spin do electrão, $\vec{S}$: $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$,

onde s representa o número quântico de spin. Para o electrão $s = \pm \frac{1}{2}$,

$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$. A componente de $\vec{S}$ segundo z : $S_z = m_s \hbar = s\hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

Fermiões e Bosões. Acoplamento *Spin* - órbita

Fermião s. m. (fig.) nome dado a partículas que obedecem à estatística de Fermi-Dirac (E. Fermi, físico italiano, 1901-1954; P. Dirac, físico inglês, 1902-1984) e cujo spin é semi-inteiro (eléctron, protão, positrão, neutrão, neutrino, núcleos de número de massa ímpar). (De férmio + -ão)

Bosão s. m. (fís.) nome dado a partículas que obedecem à estatística de Bose-Einstein e cujo spin é ou nulo ou um número inteiro (fótons, mésons p, núcleos de número de massa par, partículas alfa). (De S. Bose, físico indiano, 1894-1974)

Pelo facto de ter spin semi-inteiro o electrão é um **fermião**.

O fóton tem spin inteiro e pertence ao grupo dos bosões.

Interacção entre os momentos angulares orbital e de spin

Momento angular orbital $\vec{L} : L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$; componente de $\vec{L}$ segundo $z : L_z = m_s \hbar$

Momento angular de spin do electrão, $\vec{S} : \text{número quântico de spin: } s = \pm \frac{1}{2}$

Momento angular total $\vec{J} : J = \sqrt{j(j+1)}\hbar; j = |l \pm \frac{1}{2}|$

Energia de interacção (acoplamento spin-órbita): $U = \chi \vec{J} \cdot \vec{S}$

Princípio de exclusão de Pauli

O princípio de exclusão de Pauli é uma *lei* da Mecânica Quântica proposta por Wolfgang Pauli em 1925. Esta *lei* estabelece que dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico *simultaneamente*. Uma forma mais rigorosa de enunciar este princípio é dizer que a função de onda total de um sistema composto por dois férmions idênticos deve ser anti-simétrica. **Aplicado a um átomo, significa que dois electrões não podem ter os mesmos quatro números quânticos, isto é, se n , l , e m_l são os mesmos, m_s têm que ser diferentes, e, portanto, os dois electrões têm que ter *spins* opostos.**

Princípio de exclusão de Pauli e a tabela periódica

Table 41.2 Quantum States of Electrons in the First Four Shells

n	l	m_l	Spectroscopic Notation	Number of States	Shell
1	0	0	1s	2	K
2	0	0	2s	2	
2	1	-1, 0, 1	2p	6	L
3	0	0	3s	2	
3	1	-1, 0, 1	3p	6	M
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	10	
4	0	0	4s	2	N
4	1	-1, 0, 1	4p	6	
4	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d	10	
4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f	14	

Table 41.3 Ground-State Electron Configurations

Element	Symbol	Atomic Number (Z)	Electron Configuration
Hydrogen	H	1	1s
Helium	He	2	1s ²
Lithium	Li	3	1s ² 2s
Beryllium	Be	4	1s ² 2s ²
Boron	B	5	1s ² 2s ² 2p
Carbon	C	6	1s ² 2s ² 2p ²
Nitrogen	N	7	1s ² 2s ² 2p ³
Oxygen	O	8	1s ² 2s ² 2p ⁴
Fluorine	F	9	1s ² 2s ² 2p ⁵
Neon	Ne	10	1s ² 2s ² 2p ⁶
Sodium	Na	11	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s
Magnesium	Mg	12	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²
Aluminum	Al	13	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p
Silicon	Si	14	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²
Phosphorus	P	15	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³
Sulfur	S	16	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴
Chlorine	Cl	17	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵
Argon	Ar	18	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
Potassium	K	19	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s
Calcium	Ca	20	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²
Scandium	Sc	21	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d
Titanium	Ti	22	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ²
Vanadium	V	23	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ³
Chromium	Cr	24	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹ 3d ⁵
Manganese	Mn	25	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁵
Iron	Fe	26	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁶
Cobalt	Co	27	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁷
Nickel	Ni	28	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁸
Copper	Cu	29	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹ 3d ¹⁰
Zinc	Zn	30	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ¹⁰

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Prof. MARCELO POLACHINI
© Quimicatural (2000) - todos os direitos reservados
www.quimicatural.com.br

Legend: ■ Hidrogénio ■ Metais ■ Semimetais ■ Ametais ■ Gases Nobres ■ Lantanóides ■ Actinóides

* De acordo com a última deliberação da Comissão de Massa Atómica e Abundâncias Isotópicas da IUPAC, durante a 40.ª Reunião Geral da IUPAC em Berlim, Alemanha (Agosto de 1999).

<http://fisica-com-quimica.blogspot.com/2008/04/friedrich-hund.html>

http://w3.ualg.pt/~jlongras/tabela_periodica.swf 281

Regra de Hund

A regra de Hund, formulada em 1927 pelo físico Friedrich Hund estabelece que:

"Os electrões são distribuídos isoladamente e com o mesmo spin." "Os electrões são emparelhados com spins contrários." Ou seja, durante o preenchimento das orbitais de um mesmo nível energético, deve-se colocar em primeiro lugar em todas elas um só electrão, todos com o mesmo spin, antes de se proceder à lotação completa dessas orbitais. Os próximos electrões a serem colocados deverão apresentar spins anti-paralelos em relação aos já presentes.

Átomos poli-electrónicos e efeito de blindagem

Até agora a nossa análise incidiu sobre átomo hidrogenóides, i.e., átomos (iões) com apenas um electrão. Em geral, um átomo no seu estado “normal” é electricamente neutro possuindo Z electrões e Z protões. Z designa-se o número atómico do elemento. A carga total do átomo é zero porque os neutrões, outro constituinte do núcleo atómico, não tem carga eléctrica.

A aplicação da equação de Schrödinger a átomos com mais do que um electrão é um problema complexo, cuja complexidade aumenta rapidamente com Z , uma vez que os electrões para além de interagirem com o núcleo interagem com os outros electrões. O potencial e a função de onda passam a ser função de $3Z$ coordenadas e a equação contém segundas derivadas de todas elas. A complexidade matemática é tal que mesmo para o hélio neutro não se consegue resolver o problema de forma exacta.

Átomos poli-electrónicos e efeito de blindagem

Para facilitar a compreensão qualitativa das características dos átomos poli-electrónicos usam aproximações que ignoram as interações entre todos os electrões. Nestas condições a função de onda de cada electrão é semelhante à do electrão no átomo de hidrogénio, sendo especificada pelos quatro números quânticos (n, l, m_l, m_s), e a carga nuclear é Ze em vez de e .

Esta aproximação requer a substituição do termo e^2 na expressão da função de onda e da energia pelo termo Ze^2 . Em particular a expressão da energia toma forma (e^4 passa a Z^2e^4):

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} (13.6 \text{ eV}) \quad (41.25)$$

Convém referir que em geral o valor da energia de um dado nível (orbital) depende dos números quânticos n e l . Para além disso, alguns dos electrões mais exteriores “nunca” penetram nas regiões mais interiores do átomo. Para estes electrões, o átomo comporta-se como se tivesse uma carga nuclear efectiva $Z_{\text{eff}}e$. Este efeito designa-se por **efeito de blindagem**.

Para o sódio, por exemplo, $Z_{\text{eff}}=1$. Para mais detalhes ver manual recomendado.

Átomos poli-electrónicos e efeito de blindagem

Em geral o valor da energia de um dado nível (orbital) depende dos números quânticos n e l . Para além disso, alguns dos electrões mais exteriores “nunca” penetram nas regiões mais interiores do átomo. Para estes electrões, o átomo comporta-se como se tivesse uma carga nuclear efectiva Z_{eff} . Este efeito designa-se por **efeito de blindagem**, e pode ser explicado da seguinte forma.

A carga do núcleo do átomo por ser positiva "puxa" (atrai) os electrões para perto de si. Tendo em vista que existem várias *camadas* de electrões rodeando o núcleo, os electrões na camada mais distante do núcleo sentem menos a intensidade desse(a) "puxão" (atracção), porque os electrões mais próximos do núcleo blindam a carga do núcleo (como se fosse um escudo) e assim os electrões nas camadas mais distantes do núcleo não sentem a mesma atracção núcleo-electrão que os electrões mais próximos do núcleo.

Para estes electrões mais exteriores, os valores da energia do átomo são dados, de forma aproximada, pela expressão da energia do átomo de hidrogénio com e^2 substituído por $Z_{\text{eff}}e^2$:

$$E_n = -\frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2} (13.6 \text{ eV}) \quad (\text{energy levels with screening}) \quad (41.27)$$

Para o sódio, por exemplo, $Z_{\text{eff}}=1$. Para mais detalhes ver manual recomendado.

Moléculas Sólidos Dielétricos e Metais

Moléculas e matéria condensada
(Molecules and Condensed Matter)

Espectros moleculares

Molécula s. f. (quím.) espécie química, electricamente neutra, formada por um ou mais átomos, sempre em número limitado, de um elemento ou elementos diferentes e que é a menor porção dessa espécie capaz de participar em reacções químicas. (Do lat. escol. molecûla-, dim. de moles, -is, «massa»)

Espectros moleculares

Uma molécula é uma entidade electricamente neutra que, em geral, possui mais do que um átomo. Um antigo conceito diz que a molécula é a menor parte de uma substância que mantém suas características de composição e propriedades químicas, entretanto tem-se conhecimento actualmente que as propriedades químicas de uma substância não são determinadas por uma molécula isolada, mas por um conjunto mínimo destas.

A energia de uma molécula pode ter as seguintes componentes: energia potencial, energias cinéticas de translação e de rotação, e energias potenciais e cinética de vibração.

Nos átomos, as transições electrónicas correspondem a valores de energia bem definidos, enquanto que nas moléculas, embora a energia esteja também quantizada, verificam-se bandas de frequências próximas e não tão separadas como o que acontece nos espectros atómicos. Por essa razão, as moléculas apresentam **espectros de bandas e não espectros de riscas**.

Espectros moleculares

O processo de emissão de radiações nas moléculas pode resultar de:

Incandescência: quando moléculas excitadas por acção do calor emitem radiações ao sofrerem desexcitação, como é o caso da combustão de hidrocarbonetos, como o propano e o butano.

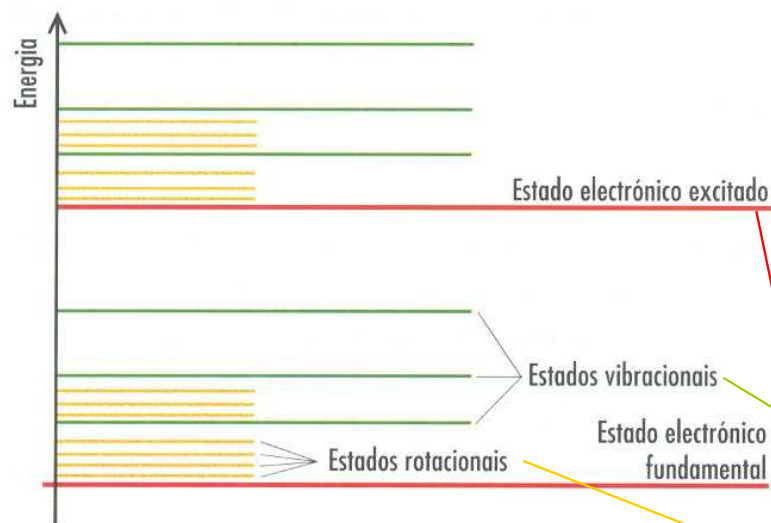
Luminiscência: quando moléculas excitadas por acção de radiações UV emitem radiações visíveis.

Fluorescência: quando certas moléculas, que revestem os tubos interiores de certas lâmpadas, excitadas por acção de luz UV, emitem de imediato radiações visíveis ao voltarem ao estado fundamental. A energia absorvida pelas moléculas, e que não é emitida sob a forma de radiação visível, é libertada sob a forma de calor, por exemplo.

Fosforescência: quando moléculas excitadas por acção de radiações UV ficam nesse estado durante um certo intervalo de tempo, que pode demorar minutos ou horas, e só depois emitem radiações visíveis.

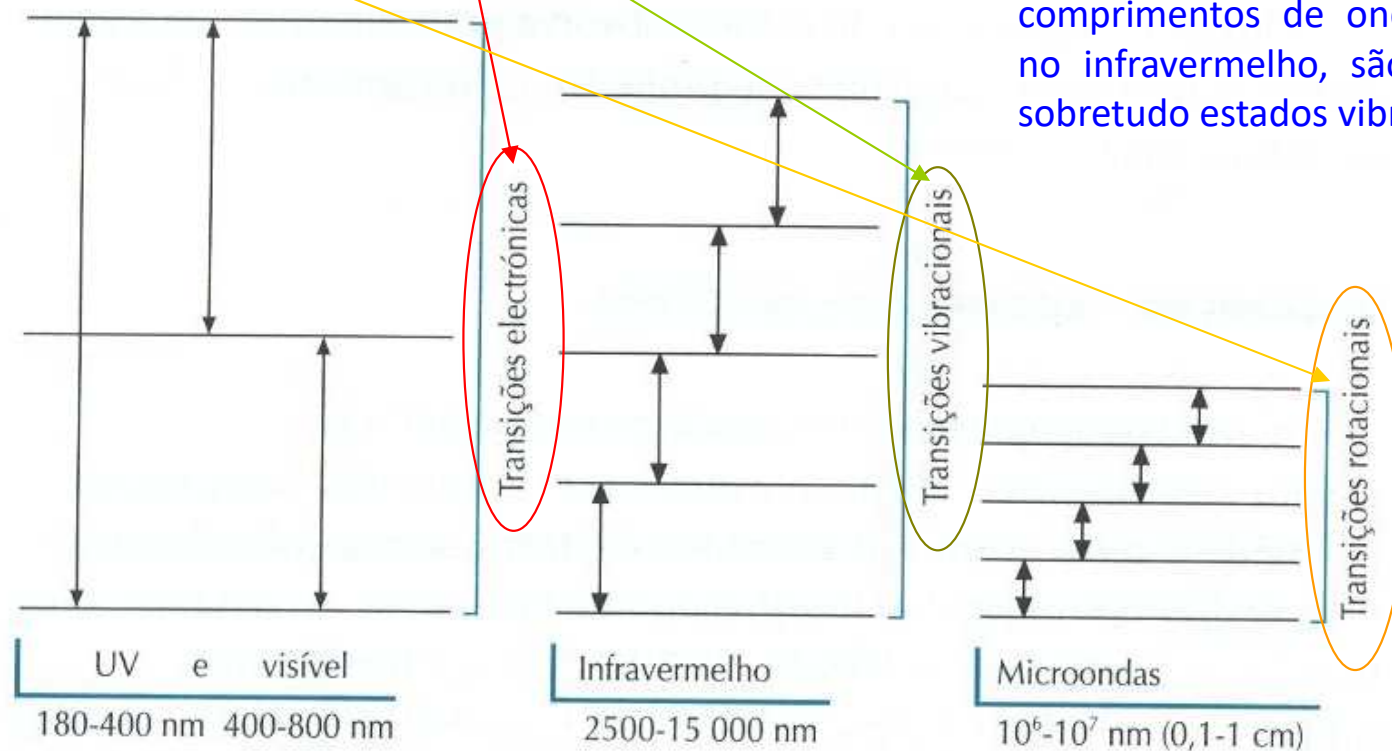
Quimioluminiscência: quando, numa reacção química, se forma um produto num estado excitado que, ao passar ao estado fundamental, emite luz visível.

Espectros moleculares



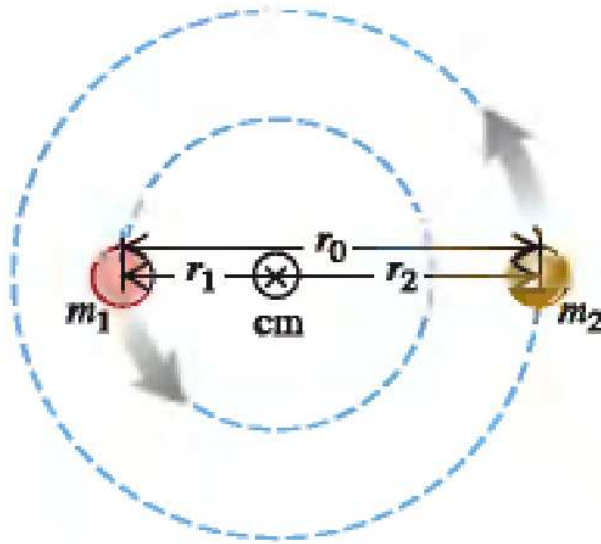
O mesmo estado electrónico da molécula pode ter associados vários estados energéticos relativos à vibração e à rotação. No entanto, a diferença de energia entre estados sucessivos de rotação ou de vibração é muito inferior à diferença de energia entre estados electrónicos sucessivos.

Se as moléculas são sujeitas a radiação incidente na zona das microondas, apenas são afectados estados rotacionais. Se a gama de comprimentos de onda se situa no infravermelho, são afectados sobretudo estados vibracionais.



Níveis de energia rotacional

42.4 A diatomic molecule modeled as two point masses m_1 and m_2 separated by a distance r_0 . The distances of the masses from the center of mass are r_1 and r_2 , where $r_1 + r_2 = r_0$.



$$E_R = E_C = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

Como o momento angular está quantizado:

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Níveis de energia rotacional

$$E_{R,l} = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I}$$

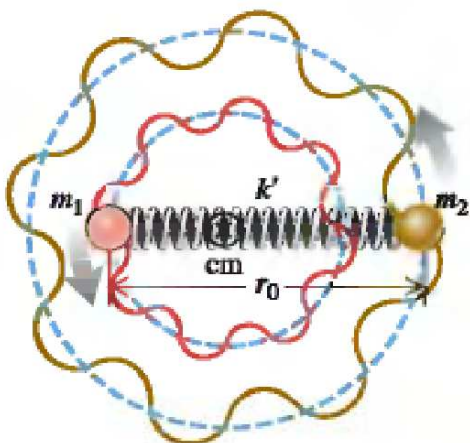
$$I = m_r r_0^2, \quad \text{com } m_r^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$$

A diferença de energia entre níveis rotacionais é da ordem de alguns meV. Para a molécula de CO, obtém-se para os dois primeiros níveis uma diferença de ~ 0.5 meV, entre o 2º e o 3º, é ~ 0.96 meV.

Nota: A conservação do momento angular exige que nas transições radiativas permitidas o número quântico orbital só pode variar de uma unidade.

Níveis de energia vibracional

42.6 A diatomic molecule modeled as two point masses m_1 and m_2 connected by a spring with force constant k' .



Oscilador harmónico quântico

$$E_V = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{k'}{m_r}}$$

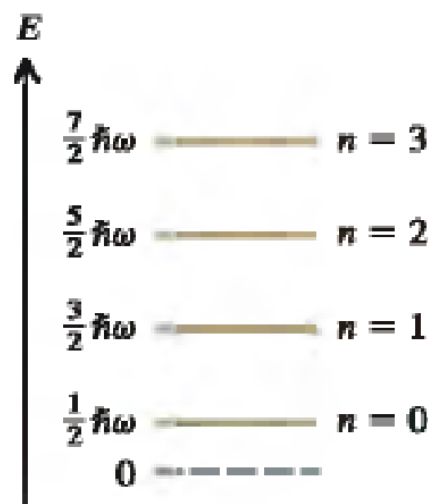
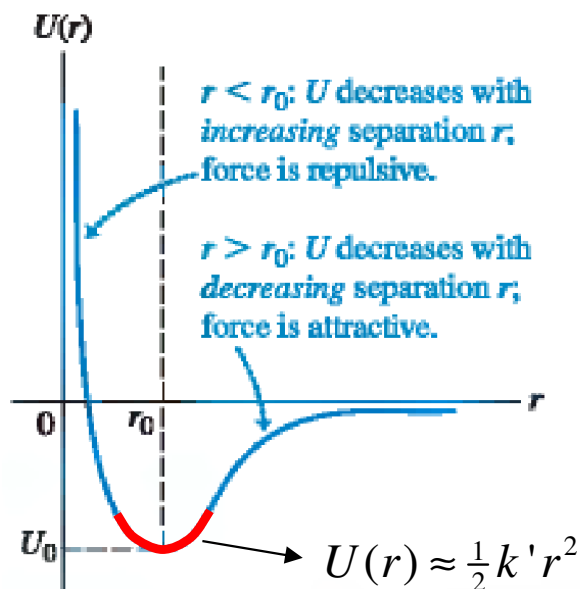
Separação entre níveis de energia:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar \omega = \hbar \sqrt{\frac{k'}{m_r}}$$

42.7 The ground level and first three excited vibrational levels for a diatomic molecule, assuming small oscillations. The levels are equally spaced, with spacing $\Delta E = \hbar \omega$.

A diferença de energia entre níveis é da ordem de décimas de eV. Para a molécula de monóxido de carbono a separação entre níveis de energia vibracional é ~ 0.2690 eV.

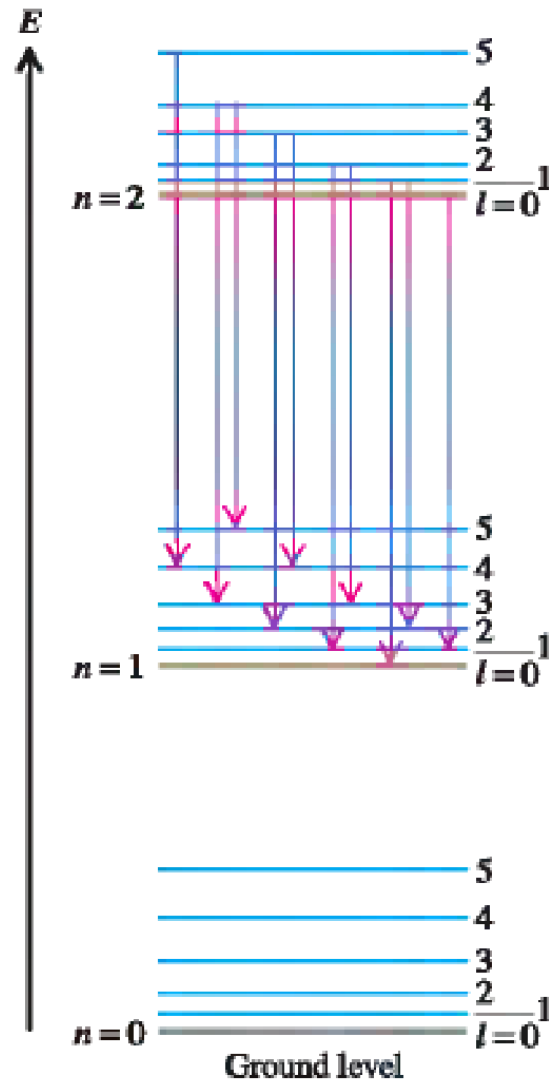
Qual é o comprimento de onda da radiação electromagnética com essa energia?



Níveis de energias vibracional e rotacional

$$E_{nl} = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I} + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{k'}{m_r}}$$

Para cada valor de n , existem vários valores de l , formando um conjunto de níveis pouco espaçados.



42.8 Energy-level diagram for vibrational and rotational energy levels of a diatomic molecule. For each vibrational level (n) there is a series of more closely spaced rotational levels (l). Several transitions corresponding to a single band in a band spectrum are shown. These transitions obey the selection rule $\Delta l = \pm 1$.

As an illustration of these selection rules, Fig. 42.8 shows that a molecule in the $n = 2, l = 4$ level can emit a photon and drop into the $n = 1, l = 5$ level ($\Delta n = -1, \Delta l = +1$) or the $n = 1, l = 3$ level ($\Delta n = -1, \Delta l = -1$), but is forbidden from making a $\Delta n = -1, \Delta l = 0$ transition into the $n = 1, l = 4$ level.

O dióxido de carbono, o metano e o aquecimento global.

O **efeito estufa** (português brasileiro) ou **efeito de estufa** (português europeu) é um processo que ocorre quando uma parte da radiação solar reflectida pela superfície terrestre é absorvida por determinados gases presentes na atmosfera. Como consequência disso, o calor fica retido, não sendo libertado para o espaço. O efeito estufa dentro de uma determinada faixa é de vital importância pois, sem ele, a vida como a conhecemos não poderia existir.

O que se pode tornar catastrófico é a ocorrência de um agravamento do efeito estufa que destabilize o equilíbrio energético no planeta e origine um fenómeno conhecido como aquecimento global.

O IPCC (Painel Intergovernamental para as Mudanças Climáticas, estabelecido pelas Organização das Nações Unidas e pela Organização Meteorológica Mundial em 1988) no seu relatório mais recente^[1] diz que a maior parte deste aquecimento, observado durante os últimos 50 anos, se deve *muito provavelmente* a um aumento dos gases do efeito estufa.

http://pt.wikipedia.org/wiki/Efeito_estufa

Bolhas de metano: uma bomba-relógio prestes a explodir

http://suprememastertv.com/pt/bbs/board.php?bo_table=sos_pt&wr_id=14&goto_url=&sca=sos_1&url=

Estruturas cristalinas **(estrutura dos sólidos)**

Prof. MARCELO POLACHINI
Quimicattual (2000) - todos os direitos reservados
www.quimicattual.com.br

De acordo com a última deliberação da Comissão de Massas Atômicas e Abundâncias Isotópicas da IUPAC, durante a 40.ª Reunião Geral da IUPAC em Berlim, Alemanha (Agosto de 1999).

Classificação dos Materiais

- materiais moleculares
- sólidos cristalinos
 - iónicos
 - covalentes
 - metais
 - semicondutores
- sólidos poli-cristalinos
- sólidos amorfos
- vidros e cerâmicas
- materiais orgânicos
- cristais líquidos
- polímeros
- novos materiais e filmes finos – nanotecnologia

Principais Propriedades Macroscópicas da Matéria

- **propriedades mecânicas:** estão nesta categoria a dureza, a coesão e a maleabilidade de sólidos e a viscosidade de líquidos. Por exemplo, as duas formas alotrópicas do carbono, diamante e grafite, são muito diferentes em dureza.
- **propriedades térmicas:** caem nesta categoria a condutibilidade calorífica, a dilatação e as temperaturas de mudança de estado físico. No que respeita a esta última, os pontos de fusão de sólidos e os pontos de ebulição de líquidos são muito importantes na caracterização de substâncias e seu grau de pureza.
- **propriedades ópticas:** entre estas contam-se a cor, o brilho, o índice de refração e o coeficiente de absorção.
- **propriedades eléctricas:** a condutibilidade eléctrica é a propriedade eléctrica por excelência.
- **propriedades magnéticas:** entre estas conta-se o ferromagnetismo exibido por alguns metais, designadamente o ferro, o cobalto e o níquel. Estes metais adquirem uma elevada magnetização quando actuados por um campo magnético e mantêm-na na ausência desse campo.

Líquidos e sólidos: ordem de curto e longo alcance

Certos autores consideram o vidro um sólido amorfo, ou seja, sem estrutura cristalina, porém, o vidro apresenta características de um líquido em sua ordenação atômica, mesmo em temperatura ambiente, ou seja, quando tem a aparência de sólido, por se tratar de uma substância de alta viscosidade (1040 Pa·s a 20 °C). O vidro comum se obtém por fusão em torno de 1.250 °C de dióxido de silício, (SiO₂), carbonato de sódio (Na₂CO₃) e carbonato de cálcio (CaCO₃). Sua manipulação só é possível enquanto fundido, quente e maleável.

<http://pt.wikipedia.org/wiki/Vidro>

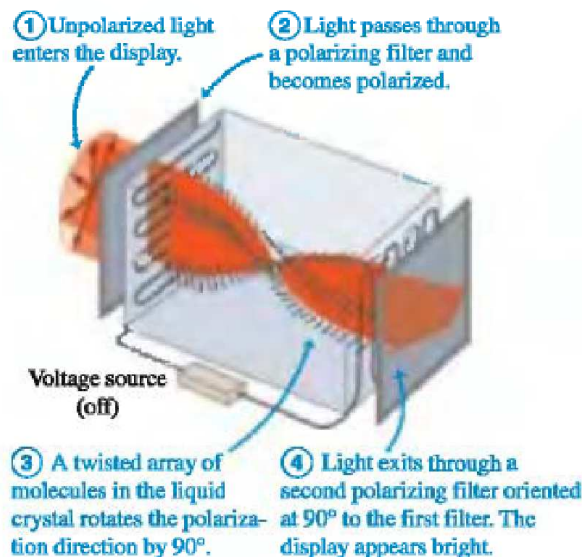
Os cristais líquidos

Os cristais líquidos são uma classe de materiais que se podem apresentar em estados da matéria compreendidos entre o Líquido e o Sólido.

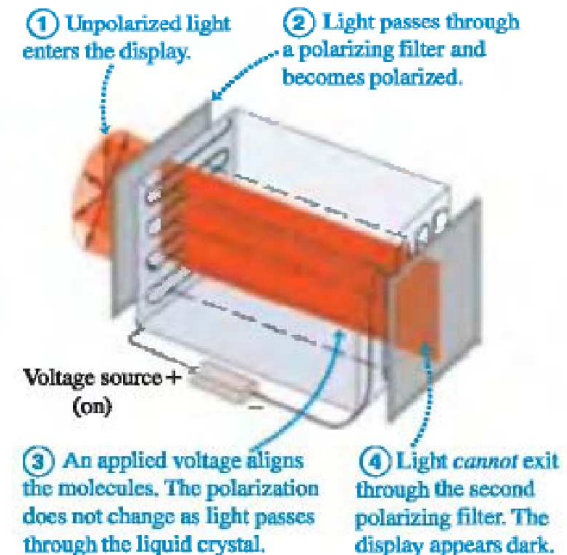
<http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo7/>

42.11 A simple version of a liquid-crystal display (LCD). A thin layer of liquid crystal—an organic compound whose cylindrical molecules tend to line up parallel to each other—is confined between two parallel glass plates and placed between two crossed polarizing filters. (a) The molecules tend to align with fine scratches on the glass plates, twisting them so that the light can pass through the second polarizing filter. (b) Each glass plate also has a pattern of fine electrodes. When a voltage is applied between the plates, the molecules align with the electric field and the light does not pass through the second polarizing filter. Hence switching the voltage on changes the display from light to dark.

(a) Liquid crystal display (voltage off)

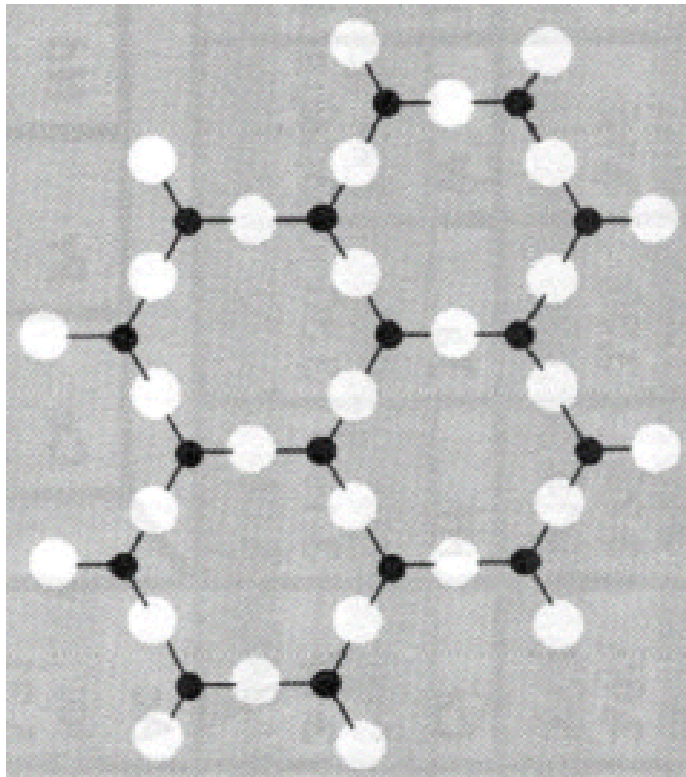


(b) Liquid crystal display (voltage on)

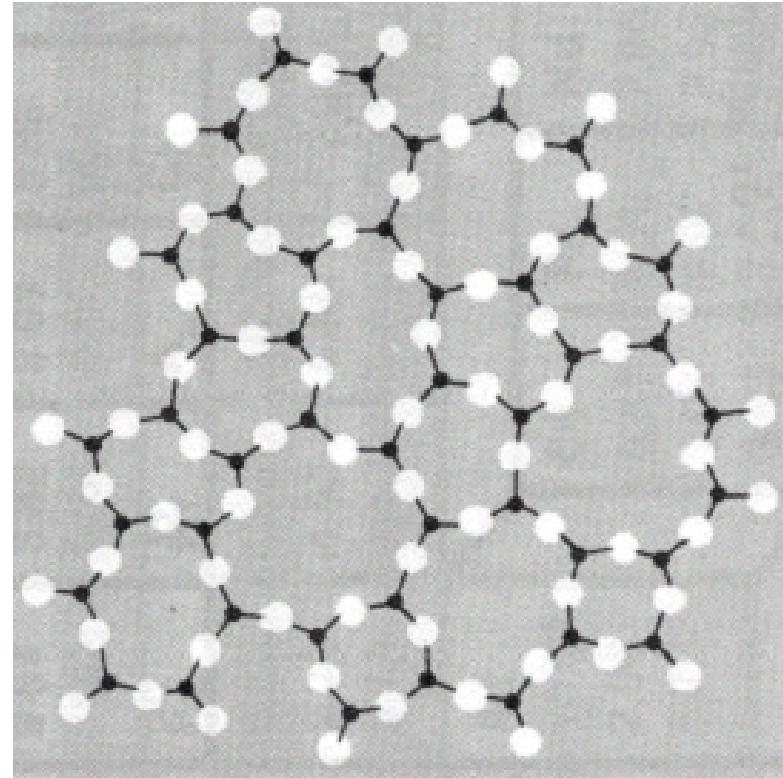


Agrupamentos cristalinos e não cristalinos

Estrutura regular de um cristal



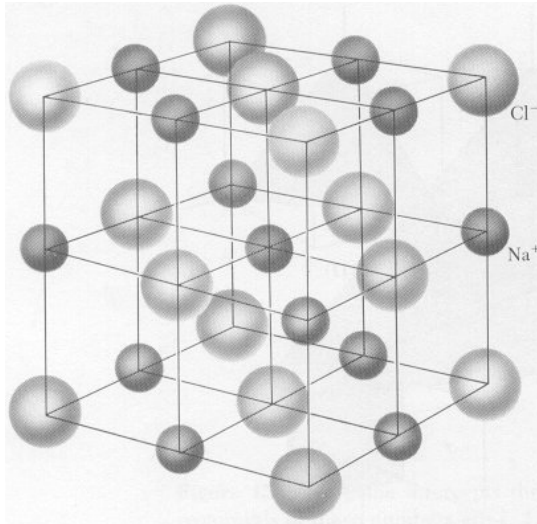
Rede caótica de um vidro



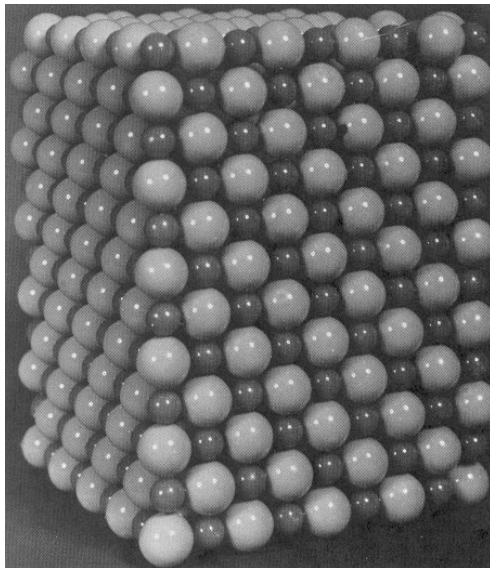
Exemplos de Estruturas Cristalinas

Redes cfc (cúbica de faces centradas)

Cloreto de sódio



Cloreto de sódio



Árgon

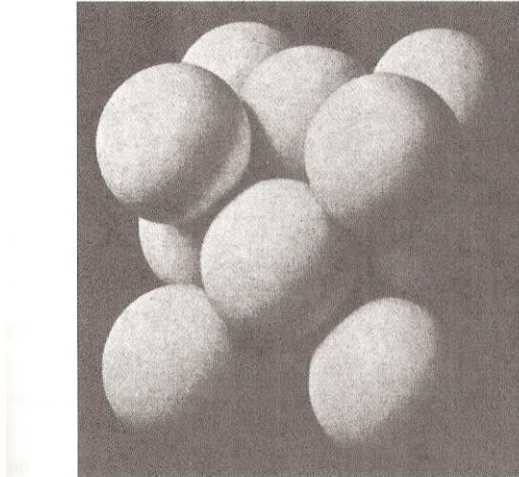
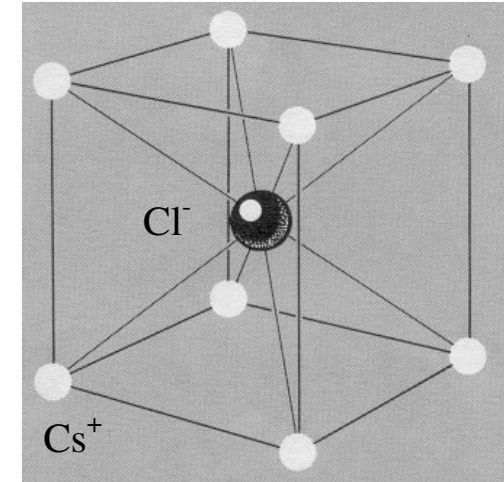


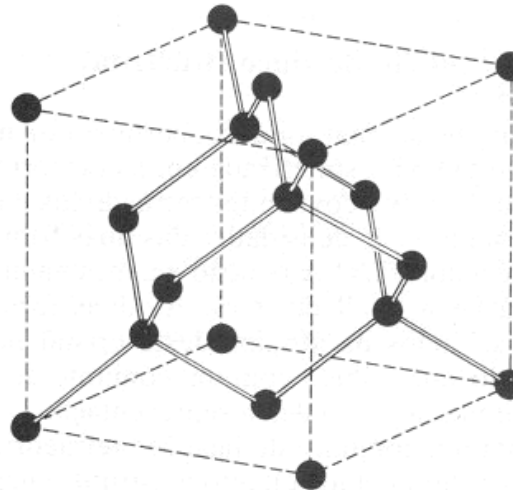
Figure 2 Cubic close-packed (fcc) crystal structure of the inert gases Ne, Ar, Kr, and Xe. The lattice parameters of the cubic cells are 4.46, 5.31, 5.64, and 6.13 Å, respectively, at 4 K.

Rede cúbica simples (CS)

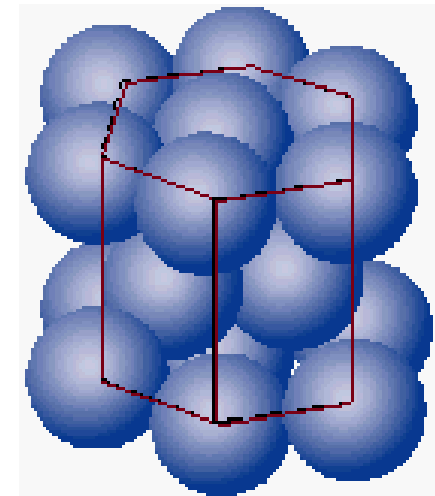
Cloreto de célio (CsCl)



Diamante, Silício, etc. (cfc)

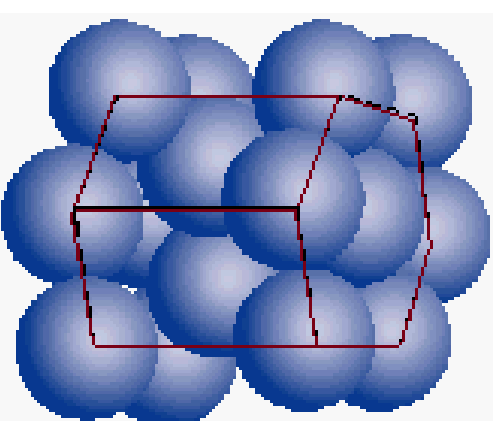
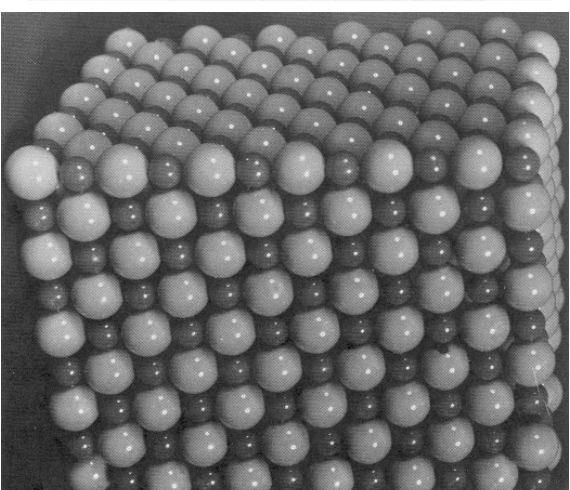
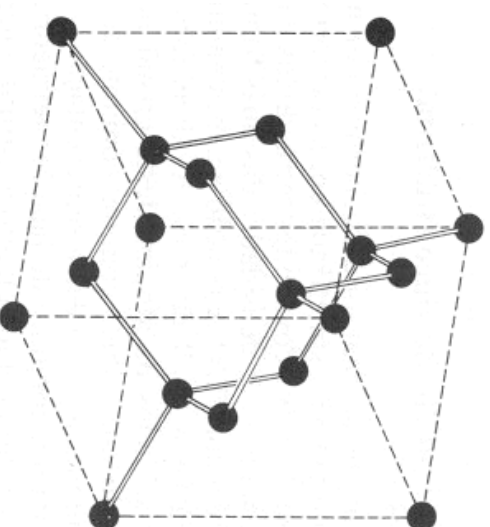
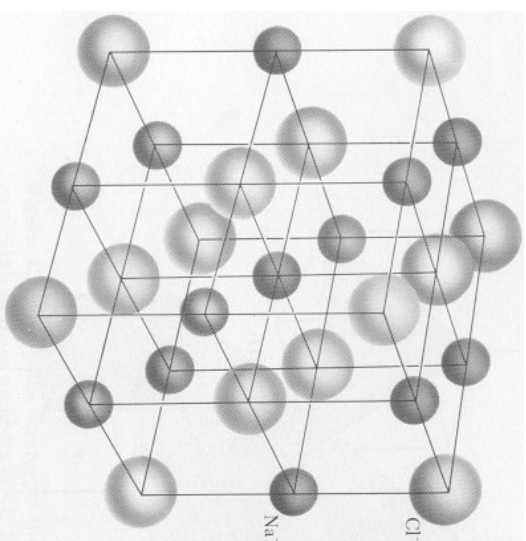
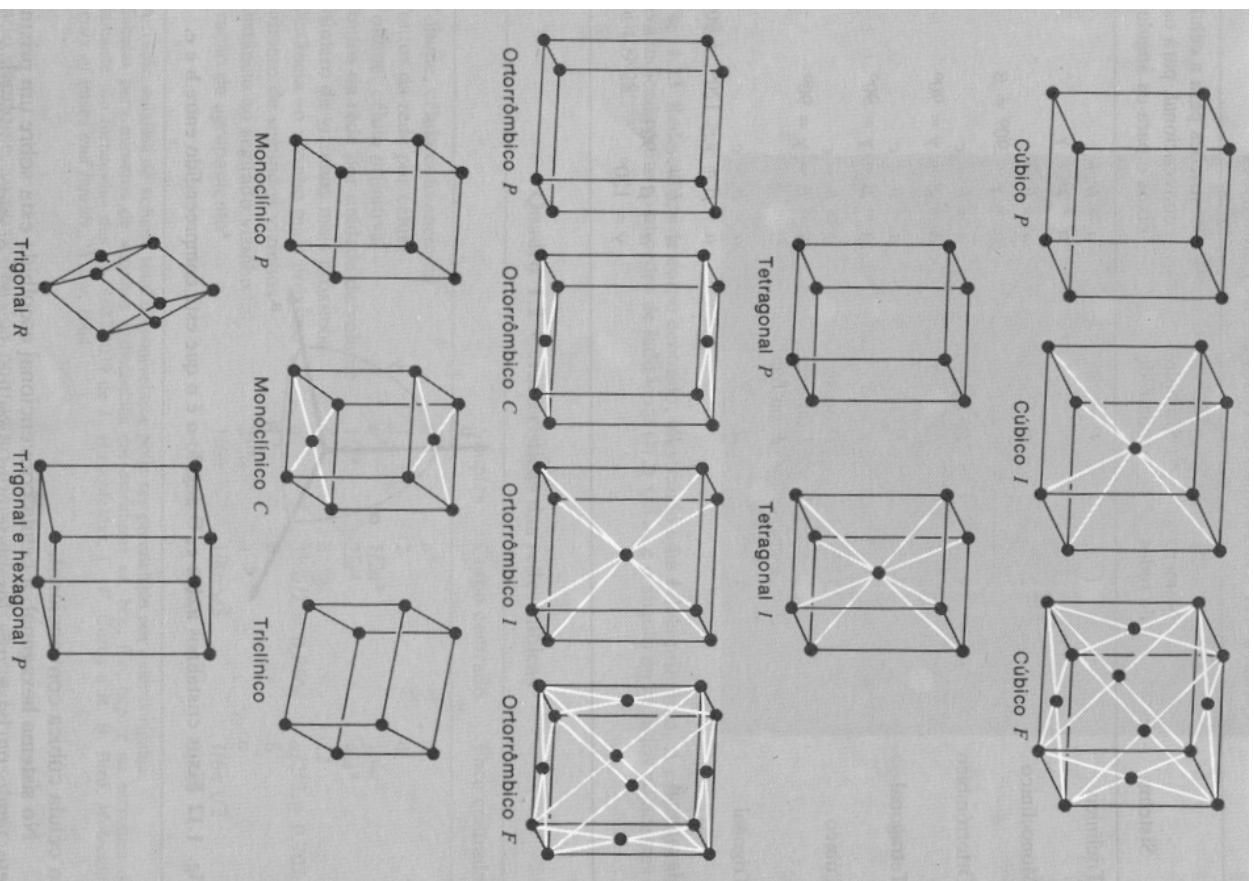


Magnésio (hexagonal)



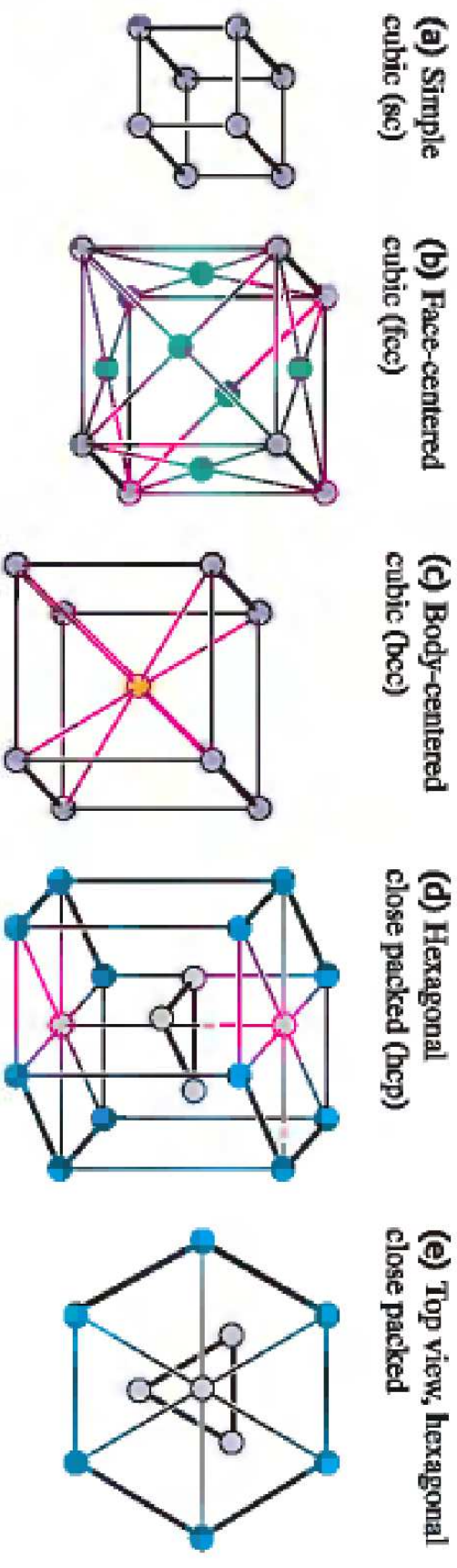
Redes cristalinas

Redes de Bravais espaciais



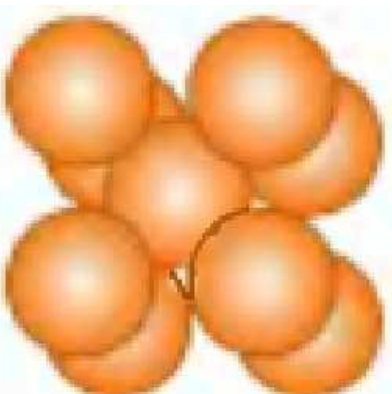
Redes cristalinas mais comuns

42.12 Portions of some common types of crystal lattices.

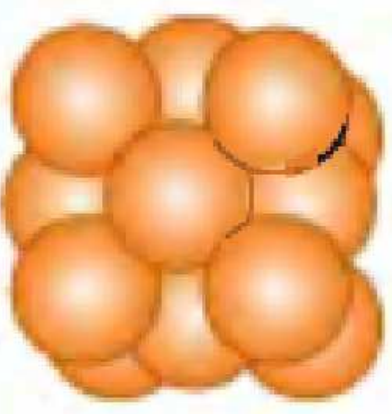


42.13 (a) The bcc structure is composed of a bcc lattice with a basis of one atom for each lattice point. (b) The fcc structure is composed of an fcc lattice with a basis of one atom for each lattice point. These structures repeat precisely to make up perfect crystals.

(a) The bcc structure



(b) The fcc structure



Redes cúbica simples

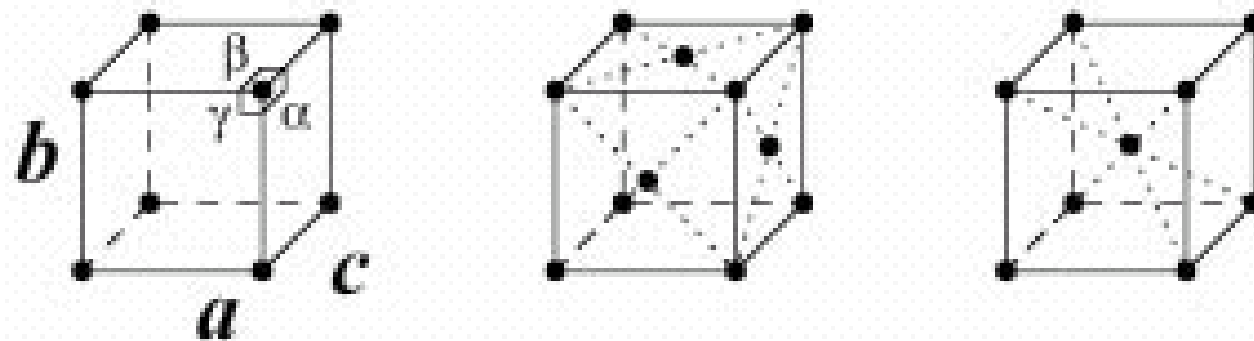


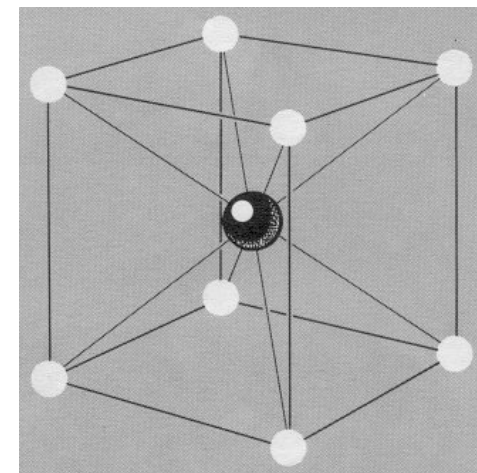
Figura 2.9: Redes cúbicas: simples, de faces centradas, e de corpo centrado.

Parâmetros fundamentais da rede cúbica $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$

As redes cúbicas são definidas por um único parâmetro, a constante da rede a .

A rede cúbica simples (cs) **não é energeticamente favorável** para substâncias simples e poucos elementos a adoptam. Exemplo, polónio α .

Contudo, é comum em compostos, como o CsCl, o CsBr, o CsI, etc. As constantes da rede destes compostos é da ordem de 0,4 nm. Reparar que neste caso as estruturas não são redes cúbicas de corpo centrado (ccc), pois os os átomos de cloro e cézio são diferentes, e, portanto, não podem ocupar, ambos, posições da rede cristalina, que por definição é um conjunto de pontos equivalentes. O número de coordenação do cúbico simples é 6.



Rede cúbica de corpo centrado

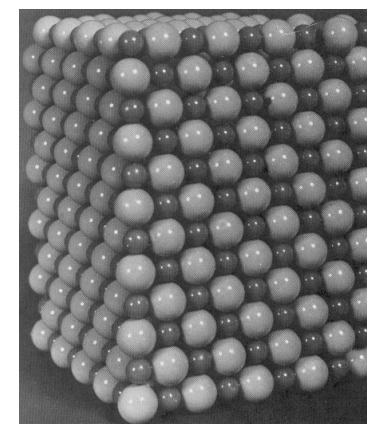
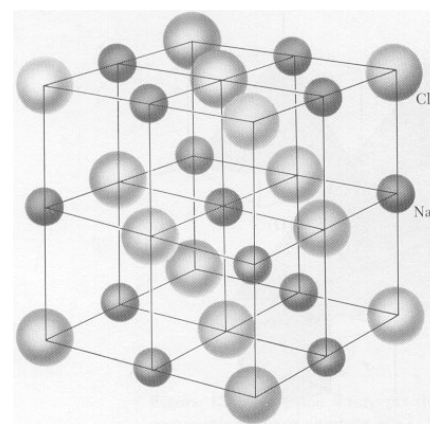
Os metais alcalinos cristalizam todos em redes cúbicas de corpo centrado (ccc). Neste caso a **célula unitária** tem dois átomos, um num vértice (compartilhado) e outro no centro. O número de **coordenação** é **8**, i.e., cada átomo está rodeado por outros oito átomos.

Elemento	<i>a</i> (nm)	Elemento	<i>a</i> (nm)
Li	0,350	V	0,303
Na	0,428	Nb	0,329
K	0,525	Ta	0,329
Rb	0,569	Cr	0,288
Cs	0,608	Mo	0,314
Ba	0,501	W	0,316

Rede cúbica de faces centradas

A Rede cúbica de faces centradas (cfc) é uma das redes que apresenta empacotamento máximo. É energeticamente muito favorável, e, por isso, muitos elementos apresentam esta estrutura cristalina. A célula unitária contém 4 átomos ($1/8 \times 8 + 1/2 \times 6$). No cloreto de sódio, que cristaliza nestas estrutura, cada ião está imediatamente rodeado de 6 iões de carga contrária. Diz-se que se trata de um exemplo de **coordenação 6:6**.

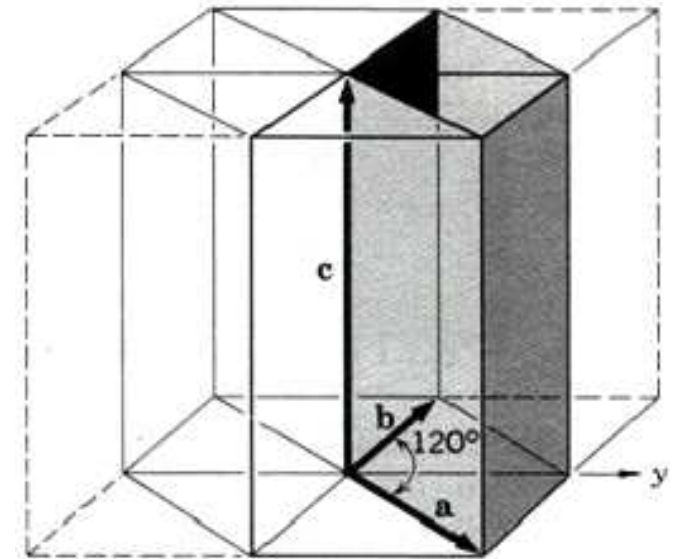
Elemento	<i>a</i> (nm)	Substância	<i>a</i> (nm)
Cu	0,361	NaCl	0,563
Ag	0,408	LiF	0,402
Au	0,407	KCl	0,628
Al	0,404	LiBr	0,549



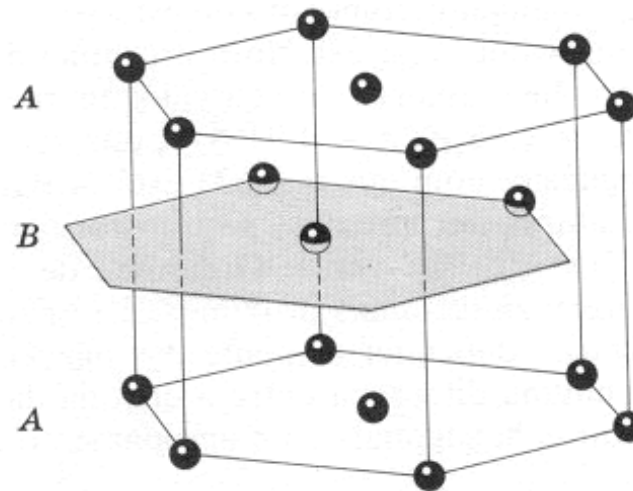
Redes hexagonais

As relações entre os parâmetros de rede, neste tipo de estrutura, são $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=\pi/2$, $\gamma=2\pi/3$.

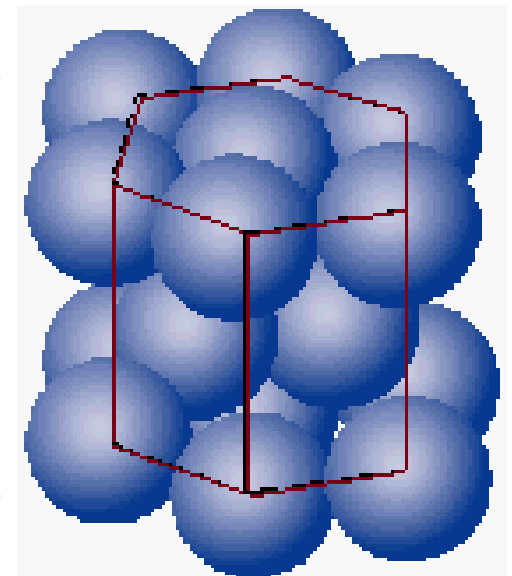
Muitos compostos semicondutores, incluindo o diamante hexagonal, o GaAs, o GaN, o SiC, e o ZnS, podem apresentar quer a estrutura cristalina cúbica quer a estrutura hexagonal.



As estruturas hexagonais são caracterizadas pela constante de rede no plano hexagonal a e pela distância entre planos hexagonais c . Numa estrutura hexagonal com agrupamento compacto (hcp) ideal, $c \sim 1,633 a$.

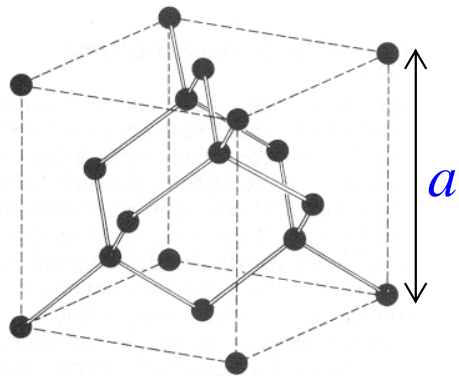


magnésio



Estrutura do diamante, silício, germânio ...

A estrutura do diamante é cúbica de faces centradas (cfc), com uma base, formada por dois átomos de carbono, associada a cada ponto da rede. Os dois átomos da base ocupam as posições (0, 0, 0) e (1/4, 1/4, 1/4). O valor do parâmetro de rede do diamante é $a = 0,356$ nm.

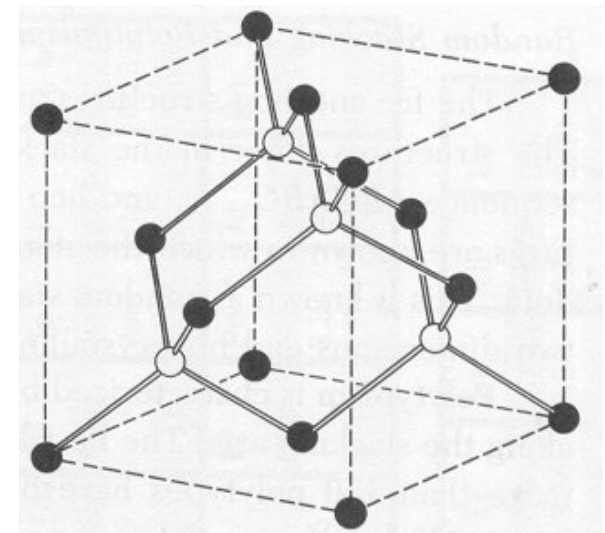


A ligação associada a esta estrutura é designada por ligação tetraédrica. Há oito átomos por célula unitária. Note-se que nesta estrutura cada átomo está rodeado por 4 vizinhos mais próximos, que formam um tetraedro regular cujo centro é o átomo em questão. Esta configuração é comum nos cristais semicondutores elementares mais usados (silício e germânio, muito importantes na indústria de semicondutores). O Si e o Ge cristalizam na rede cúbica de faces centradas, com valores para o parâmetro de rede a de 0,543 nm e de 0,545 nm, respectivamente.

Estrutura do diamante, silício, germânio ...

O sulfeto de zinco têm uma estrutura idêntica à do diamante, sendo, no entanto, a base formada por dois átomos diferentes, i.e., Zn e S. Cada célula unitária tem quatro moléculas de ZnS e cada átomo de Zn (ou S) encontra-se no centro de um tetraedro formado por átomos do outro elemento.

Vários compostos semicondutores como o arsenieto de gálio (GaAs), o *fosfeto* de índio (“indium phosphide”, InP), o arsenieto de índio (InAs), o SiC, o InSb, e o GaSb, apresentam a estrutura do sulfeto de zinco.

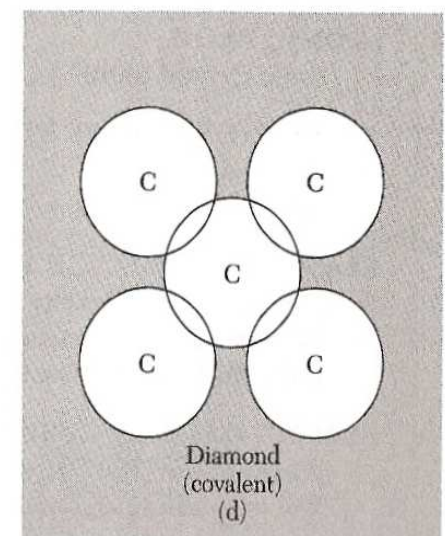
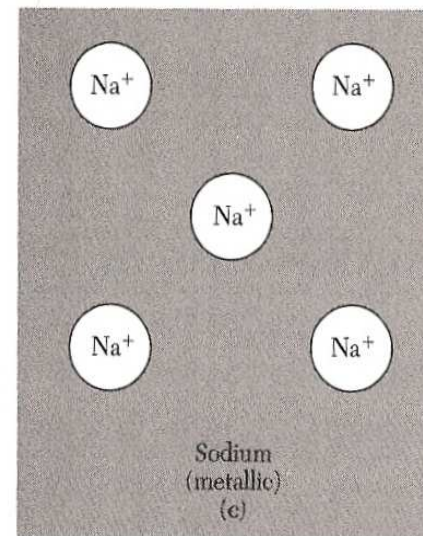
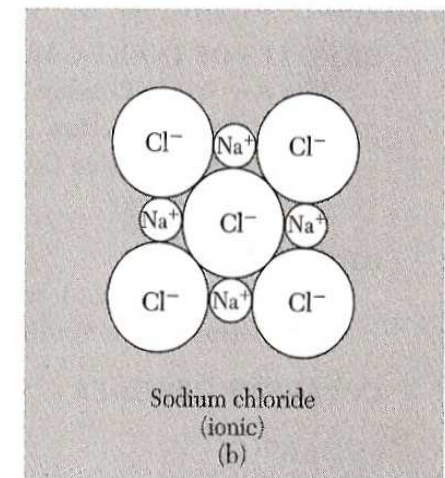
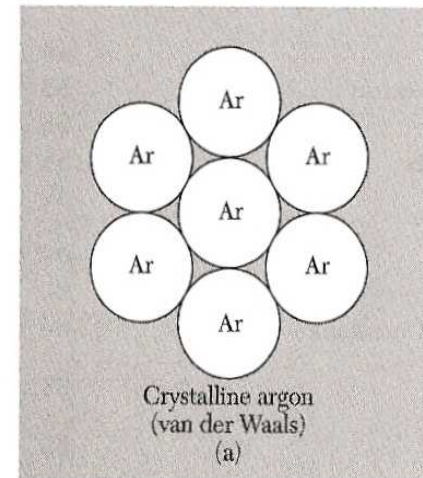


Ligações em Cristais

Tipos Principais de Ligações Cristalinas

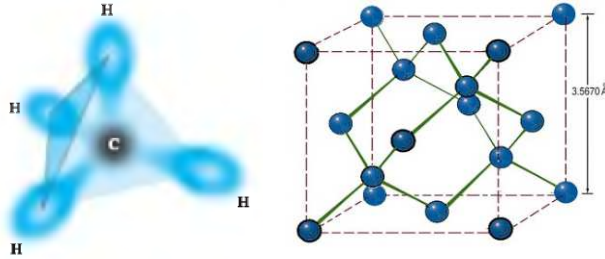
- As propriedades macroscópicas dos materiais dependem essencialmente do tipo de ligação entre os átomos;
- O tipo de ligação depende fundamentalmente da distribuição e do número de electrões de valência;
- O comportamento dos electrões são influenciados pelos protões e neutrões do núcleo atómico;
- O número de protões e neutrões caracteriza quimicamente o elemento e os seus isótopos;
- A massa de um elemento está praticamente toda concentrada no núcleo;
- Se se fornecer energia suficiente a um electrão, este pode abandonar o átomo, sendo o último ionizado.

- Ligação van der Waals
- Ligação iónica
- Ligação covalente
- Ligação metálica
- Ligação de hidrogénio

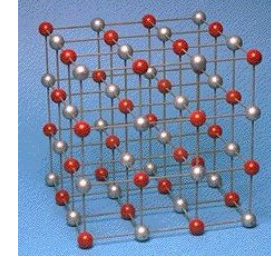


Tipos de Ligação entre átomos

covalente, *diamante*



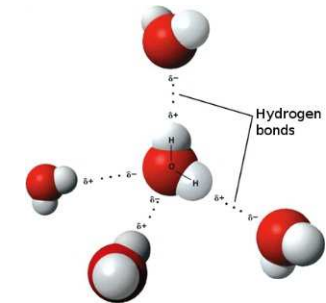
iónica, *cloreto de sódio*



metálica, *cobre*



pontes de hidrogénio, água, compostos orgânicos



de van der Waals-London, *sólidos de gases nobres*

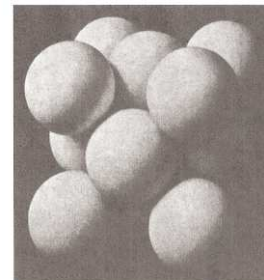
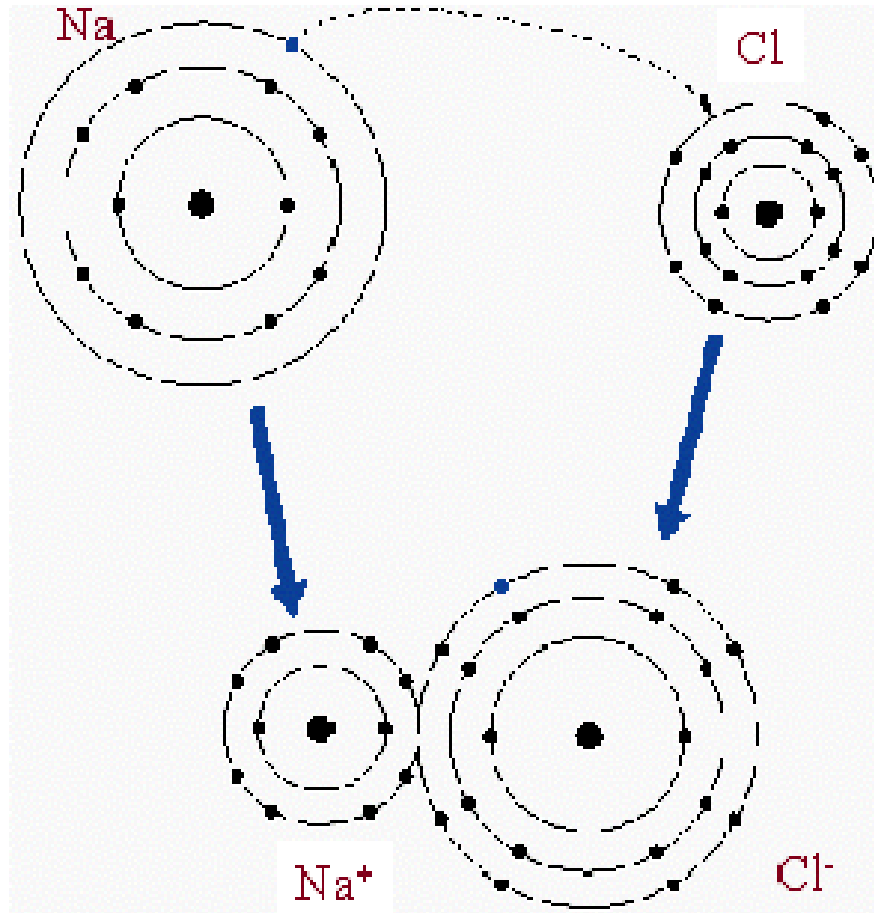


Figure 8. Cubic close-packed (fcc) crystal structure of the inert gases Ne, Ar, Kr, and Xe. The lattice parameters of the cubic cells are 4.40, 5.31, 5.64, and 6.13 Å, respectively, at 4 K.

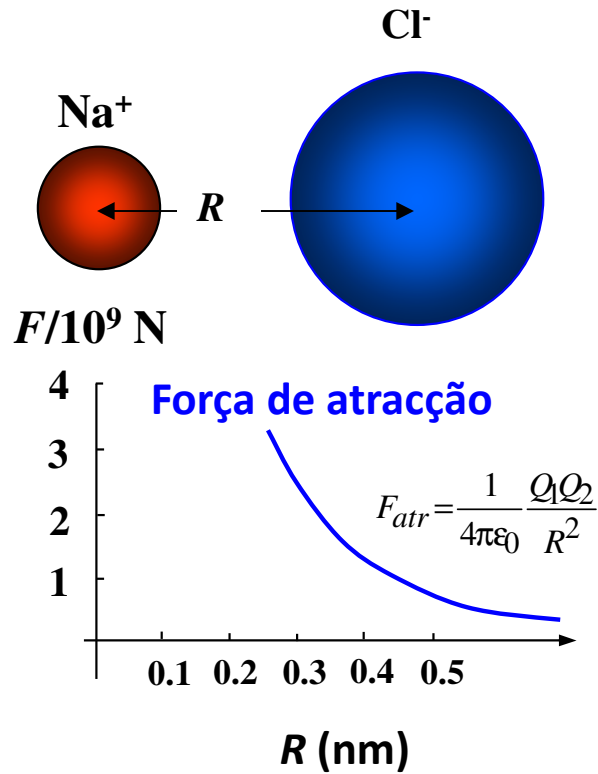
Ligações iónicas



A ligação iónica resulta da interacção electrostática entre iões de cargas opostas. Um exemplo típico é o cloreto de sódio (NaCl), o sal das cozinhas, em que cada átomo de sódio cede o **electrão de valência** ao átomo de cloro vizinho, resultando em iões positivos Na^+ e negativos Cl^- .

A força de atracção entre os iões é contrabalançada pela força de repulsão entre as nuvens electrónicas.

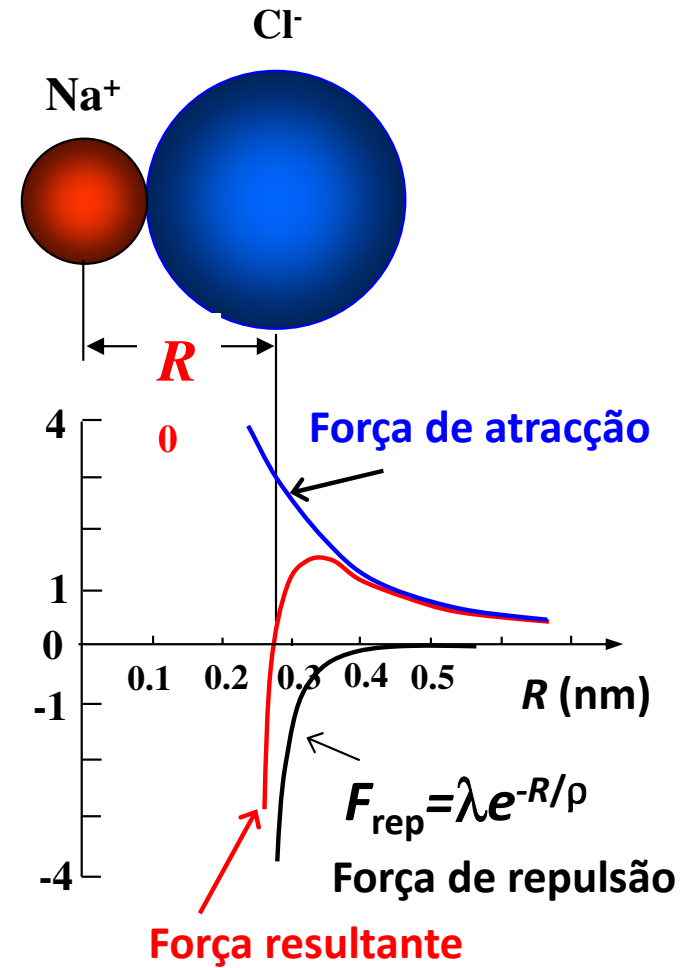
Ligações iónicas



$$F_{atr}(R_0 \sim 0.281 \text{ nm}) \sim 3 \times 10^{-9} \text{ N}$$

A energia por *molécula* de um cristal de NaCl é 6,4 eV (7,9-5,14+3,61) menor que a energia dos átomos separados.

A força de atracção entre os iões é contrabalançada pela força de repulsão entre as nuvens electrónicas.



Força e energia de ligação

Calcule a força de atração em uma molécula de Na_2O

↪ Neste caso temos Na^+ (valência 1) e O^{2-} (valência 2)

↪ $F = \frac{kZ_1qZ_2q}{a^2}$ onde Z_1 e Z_2 são as valências

↪ $a = R_{\text{Na}^+} + R_{\text{O}^{2-}} = 0.098\text{nm} + 0.132\text{nm} = 0.231\text{ nm}$

$$F = \frac{(9 \times 10^9 \text{ V}\cdot\text{m} / \text{C})(1)(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(2)(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})}{(0.231 \times 10^{-9} \text{ m})^2} = 8.64 \times 10^{-9} \text{ N}$$

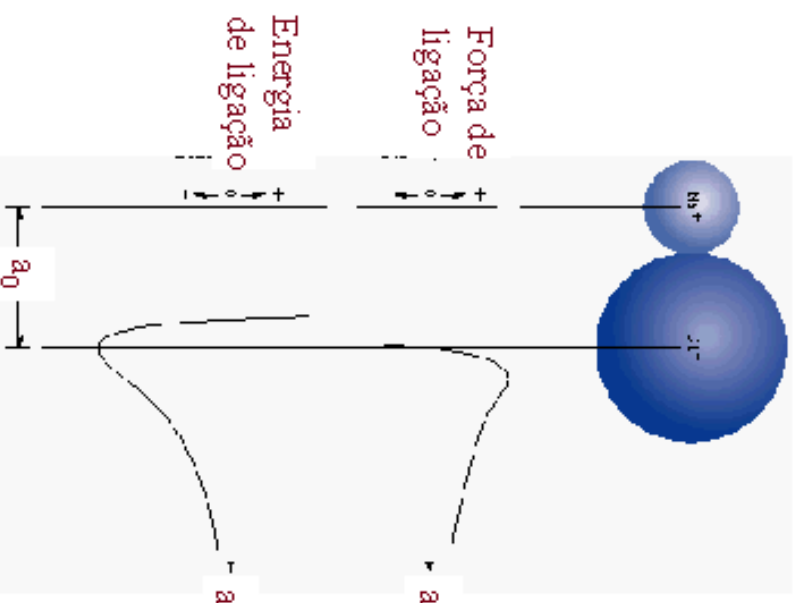
Na_2O (0,098 nm +0,132 nm=0,231 nm); $F=8,64 \times 10^{-9} \text{ N}$.

Find the electric potential energy of Na^+ and Cl^- ions separated by 0.24 nm if they can be treated as point charges.

EXECUTE: The two charges are $q = +e$ (for Na^+) and $q_0 = -e$ (for Cl^-), and the separation is $r = 0.24 \text{ nm} = 0.24 \times 10^{-9} \text{ m}$. From Eq. (23.9),

$$\begin{aligned} U &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_0} = -(9.0 \times 10^9 \text{ N}\cdot\text{m}^2/\text{C}^2) \frac{(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})^2}{0.24 \times 10^{-9} \text{ m}} \\ &= -9.6 \times 10^{-19} \text{ J} = -6.0 \text{ eV} \end{aligned}$$

Força e Energia de Ligação



$$F = dE/da$$

O ponto em que a força de ligação é zero corresponde ao ponto de mínima energia

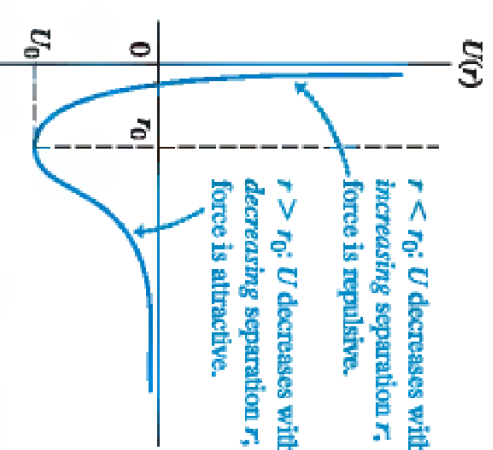
Configuração estável

Valores típicos para a_0 são da ordem de 0.3nm ($0.3 \times 10^{-9}\text{m}$)

Valores típicos para a energia de ligação são entre 600 e 1500 kJ/mol

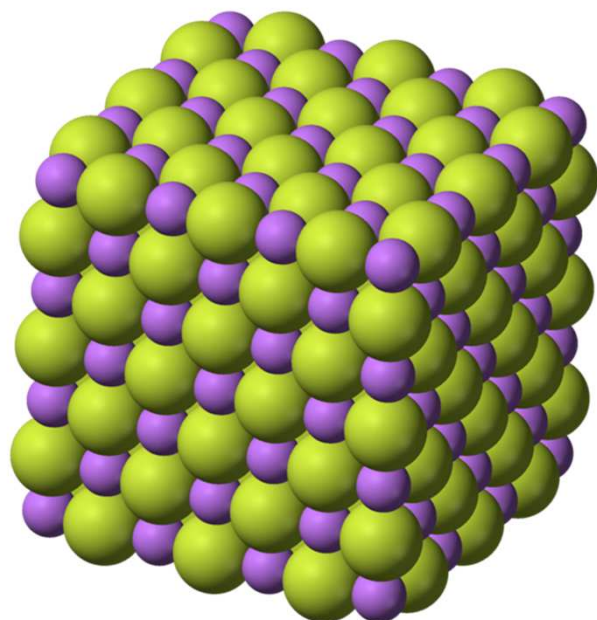
A energia de ligação está diretamente relacionada com o **ponto de fusão do material**.

42.1 When the separation r between two oppositely charged ions is large, the potential energy $U(r)$ is proportional to $1/r$ as for point charges and the force is attractive. As r decreases, the charge clouds of the two atoms overlap and the force becomes less attractive. If r is less than the equilibrium separation r_0 , the force is repulsive.

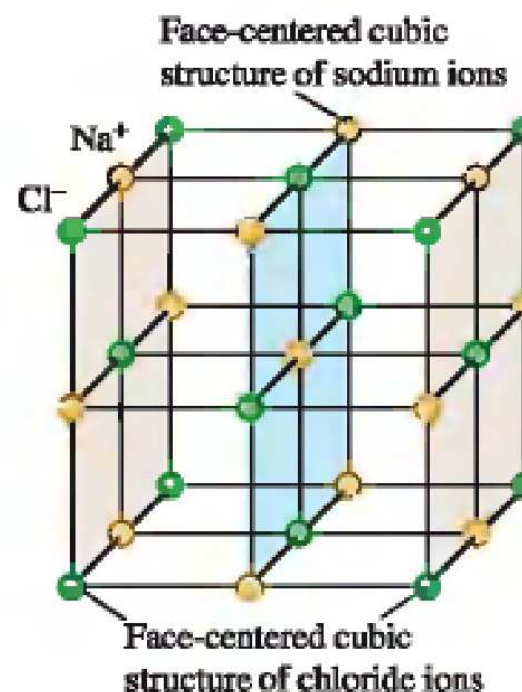


Ligações iónicas

Fluoreto de lítio (LiF)



42.14 Representation of part of the sodium chloride crystal structure. The distances between ions are exaggerated.



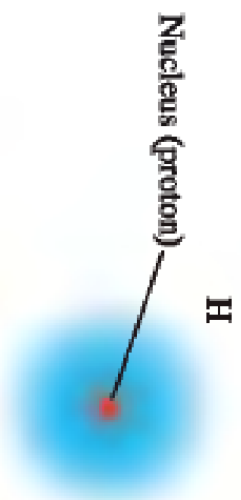
A estrutura resultante da ligação iónica é muito estável, sendo a energia de ligação de um par de átomos da ordem de 5 eV, que resulta da elevada intensidade da força de Coulomb entre os iões.

Em geral, os sólidos iónicos apresentam temperaturas de fusão elevadas: cerca de 801 °C no caso do NaCl (comparar com os 97,8 °C do metal Na).

Ligação Covalente (1)

42.2 Covalent bond in a hydrogen molecule.

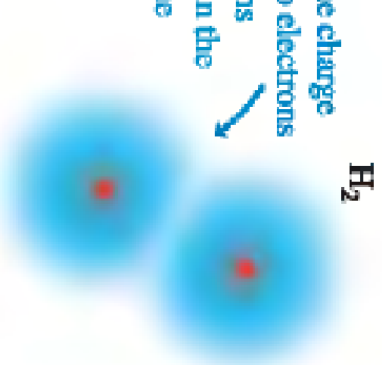
(a) Separate hydrogen atoms



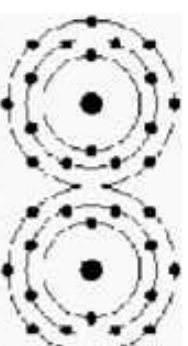
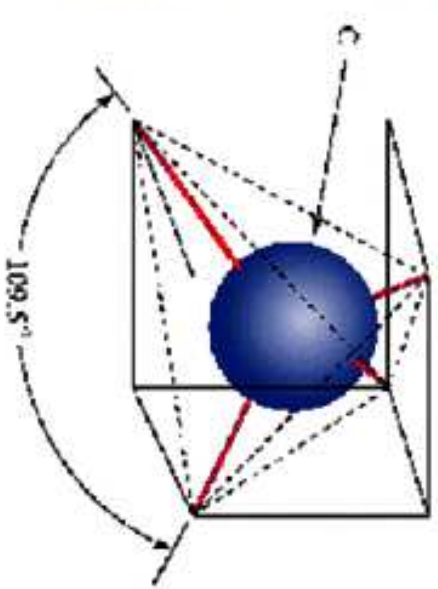
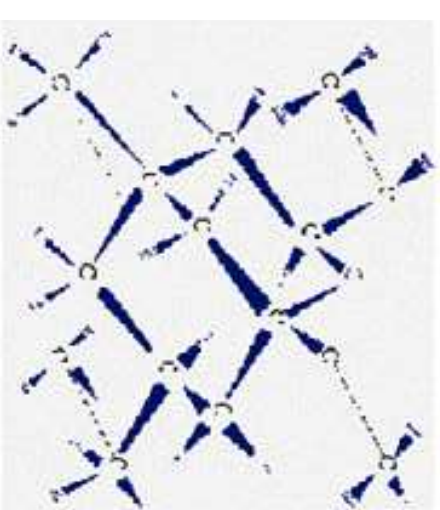
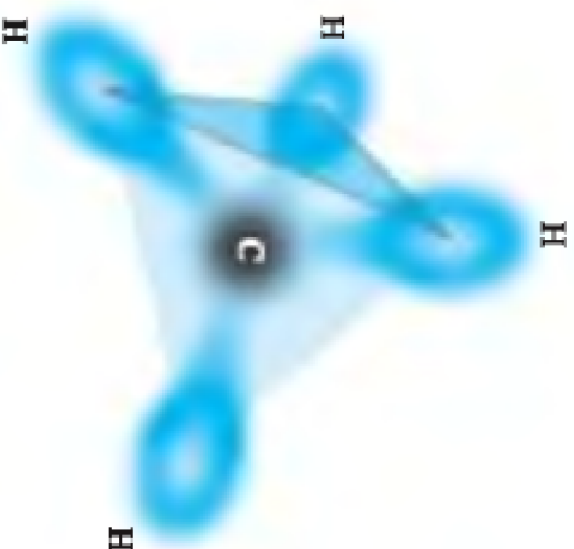
Individual H atoms are usually widely separated and do not interact.

(b) H_2 molecule

Covalent bond: the charge clouds for the two electrons with opposite spins are concentrated in the region between the nuclei.



42.3 Schematic diagram of the methane (CH_4) molecule. The carbon atom is at the center of a regular tetrahedron and forms four covalent bonds with the hydrogen atoms at the corners. Each covalent bond includes two electrons with opposite spins, forming a charge cloud that is concentrated between the carbon atom and a hydrogen atom.



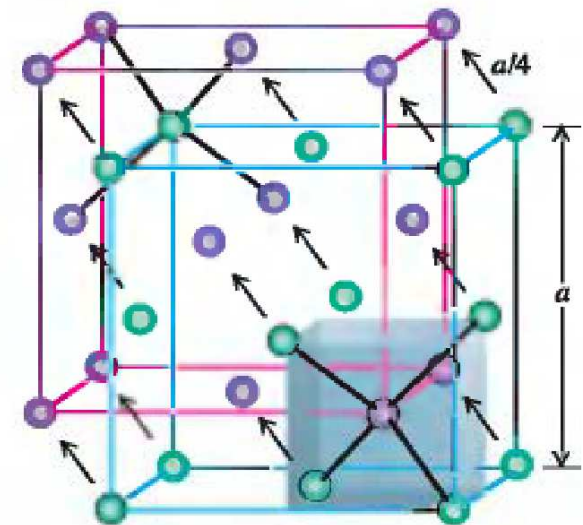
Carbono e silício

O diamante é formado por átomos de carbono numa estrutura cúbica, **em que cada átomo está rodeado por quatro**, formando um tetraedro regular, onde cada átomo de carbono mantém os seus electrões, não havendo formação de iões. Os quatro electrões de valência do carbono são usados para formar ligações com quatro átomos vizinhos mais próximos. **Cada ligação é formada por 2 electrões, um de cada átomo.** A matéria condensada que resulta do estabelecimento de ligações covalentes apresenta energias de ligação muito variáveis e, por consequência, pontos de fusão muito distintos (por exemplo: bismuto $-270\text{ }^{\circ}\text{C}$; diamante $+3550\text{ }^{\circ}\text{C}$). No caso do carbono, cada átomo fica com oito electrões de valência (quatro primitivos e mais quatro, um de cada um dos quatro átomos vizinhos), o que assegura uma estrutura atómica mais estável. Esta ligação covalente é, em geral, muito forte, como comprova a dureza e o elevado ponto de fusão do diamante.

42.15 The crystal structure of diamond is similar to that of many other, less highly coveted materials. What makes diamond unique are its beautiful optical properties. A large index of refraction makes diamond sparkle due to total internal reflection, and a large amount of dispersion turns white light into a rainbow of colors.



42.16 The diamond structure, shown as two interpenetrating face-centered cubic structures with distances between atoms exaggerated. Relative to the corresponding green atom, each purple atom is shifted up, back, and to the left by a distance $a/4$.



Oito formas alotrópicas do carbono

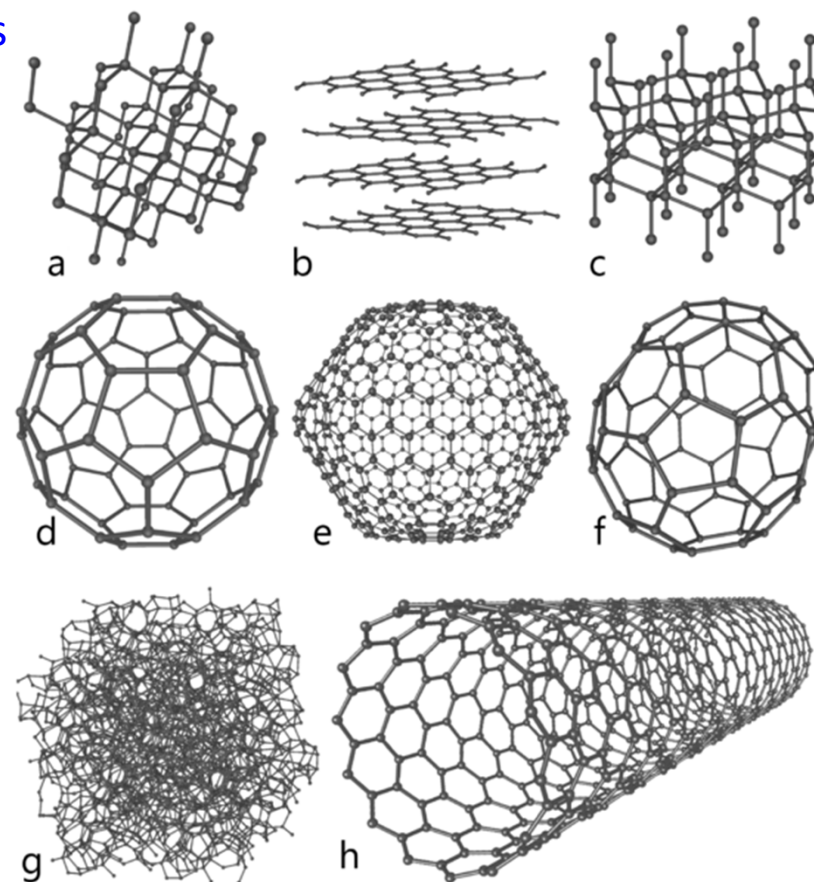
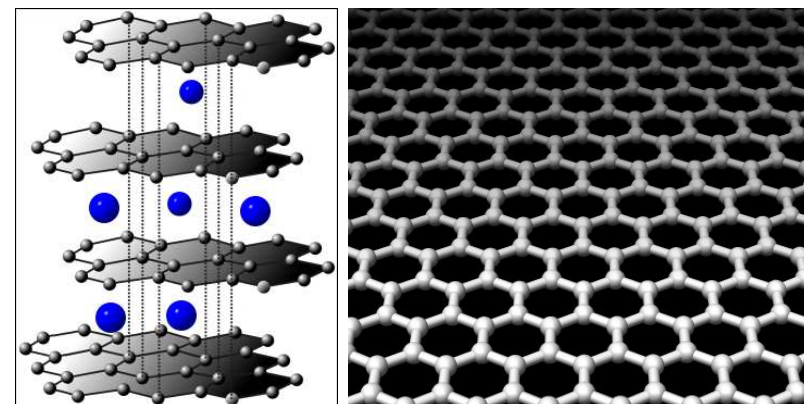
O grafeno é um material encontrado na grafite e em outros compostos de carbono. Bastante abundante e de estrutura significativamente estável e resistente, ele pode ser a chave para a produção de transístores de apenas 0.01 micrómetros, indo além do limite teórico de 0.02 micrómetros, onde os transístores possuiriam apenas dois ou três átomos de espessura e poucas dezenas de átomos de comprimento, aproximando-se dos limites físicos da matéria.

<http://www.guiadohardware.net/noticias/2008-04/480F1066.html>

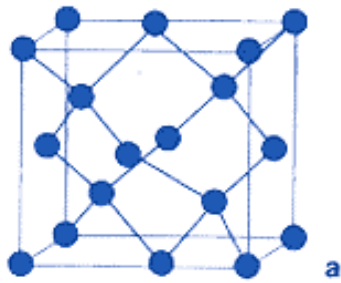
Alotropia s. f. (quím.) propriedade que têm certos elementos químicos de se apresentar em formas diferentes, cada uma delas com características próprias, como é, por ex., o caso do diamante e da grafite, formados do mesmo elemento - o carbono. (De alótrofo + -ia).

Alotrópico adj. diz-se de cada uma das formas em que o mesmo elemento químico se apresenta por alotropia.

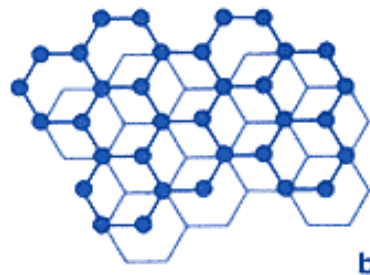
(De alótrofo + ico)



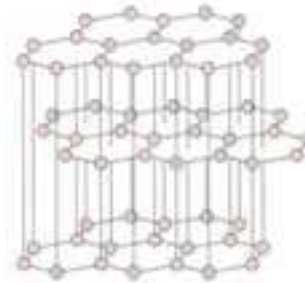
Formas alotrópicas de carbono mais comuns



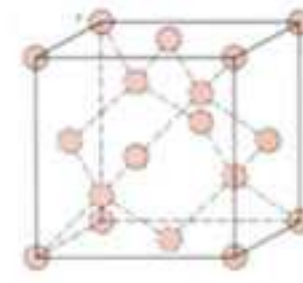
a



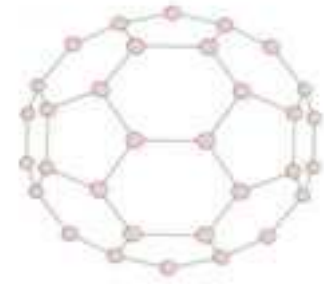
b



Grafite



Diamante

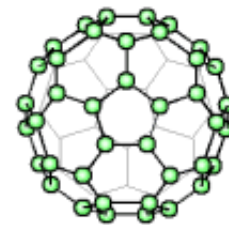
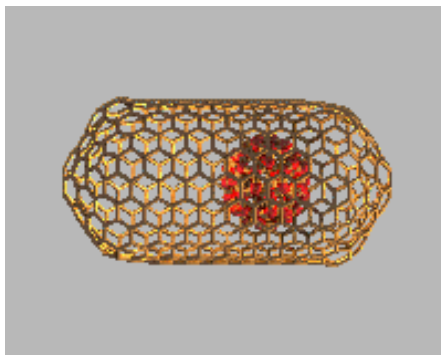
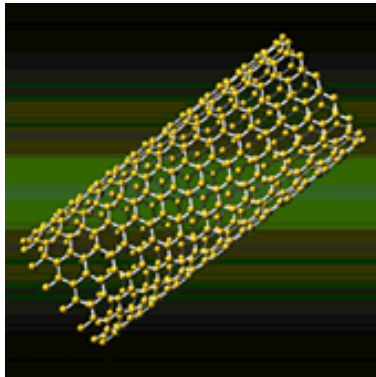


Fulereno

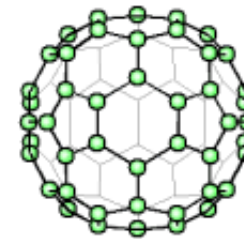
Os fulerenos são a terceira forma mais estável do carbono, após o diamante e a grafite.

Nanotubos de carbono

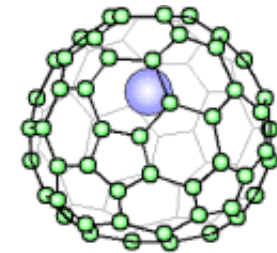
Nanotubos de carbono e fulerenos



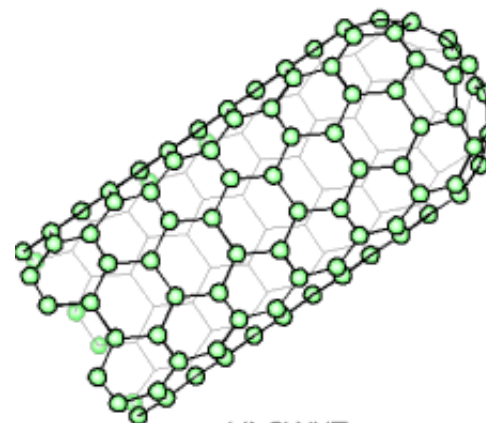
(a) C₆₀



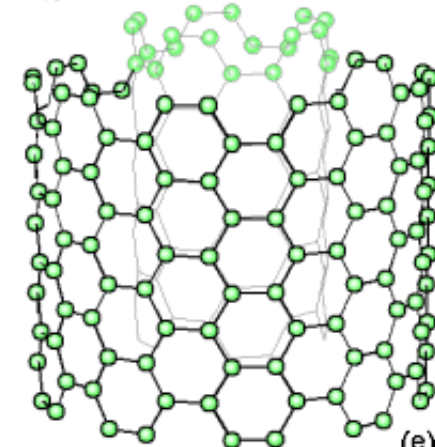
(b) C₇₀



(c) La@C₈₂



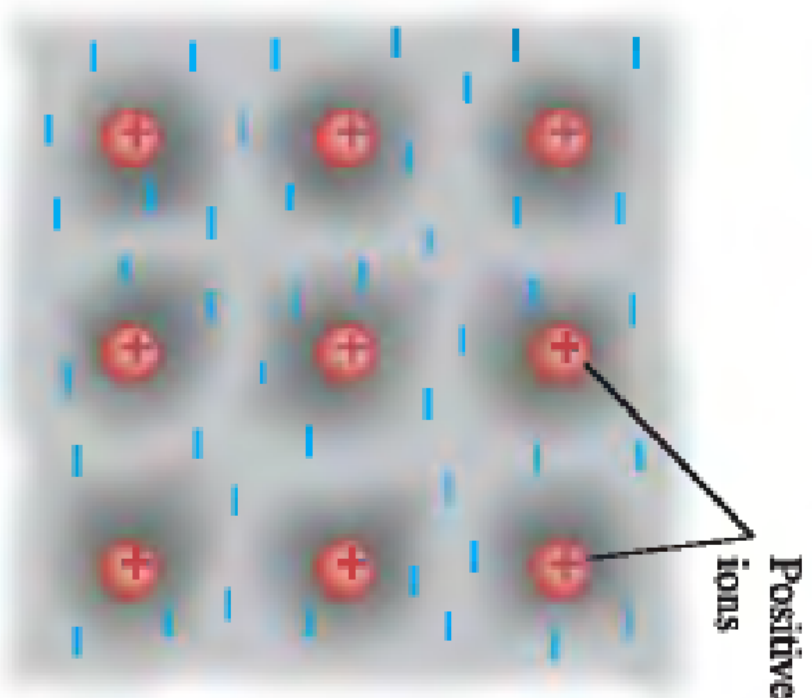
(d) SWNT



(e) MWNT

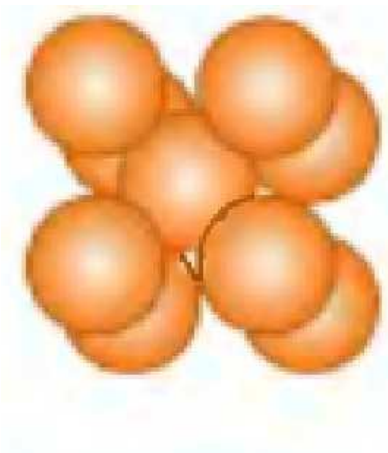
Ligação metálica (1)

42.17 In a metallic solid, one or more electrons are detached from each atom and are free to wander around the crystal, forming an “electron gas.” The wave functions for these electrons extend over many atoms. The positive ions vibrate around fixed locations in the crystal.

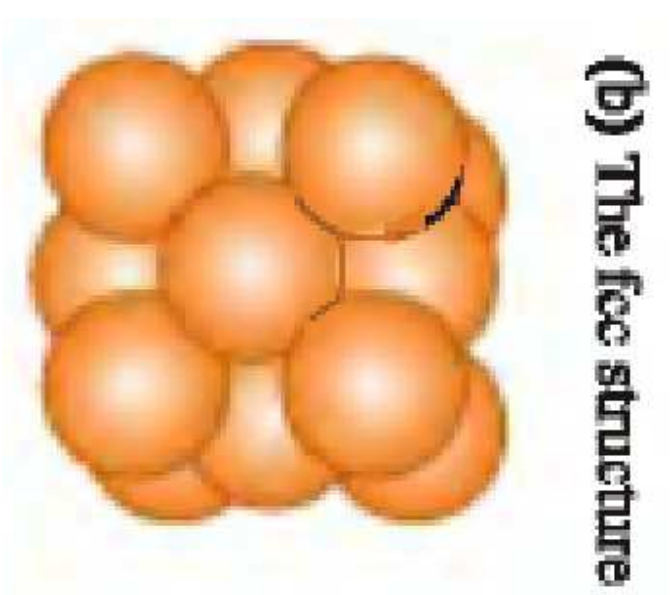


Ligação metálica (2)

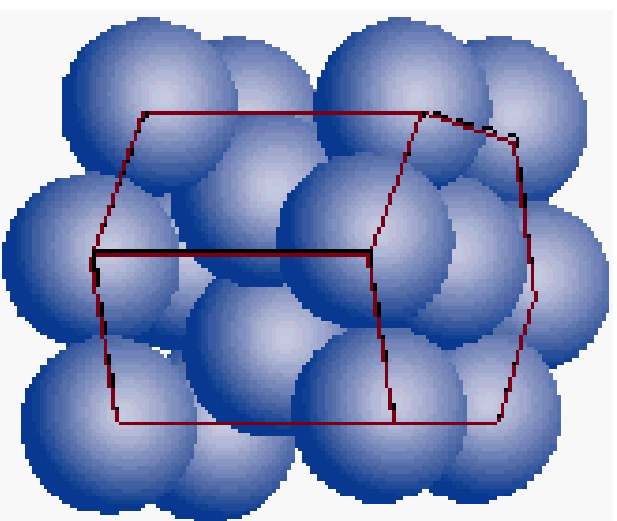
(a) The bcc structure



(b) The fcc structure

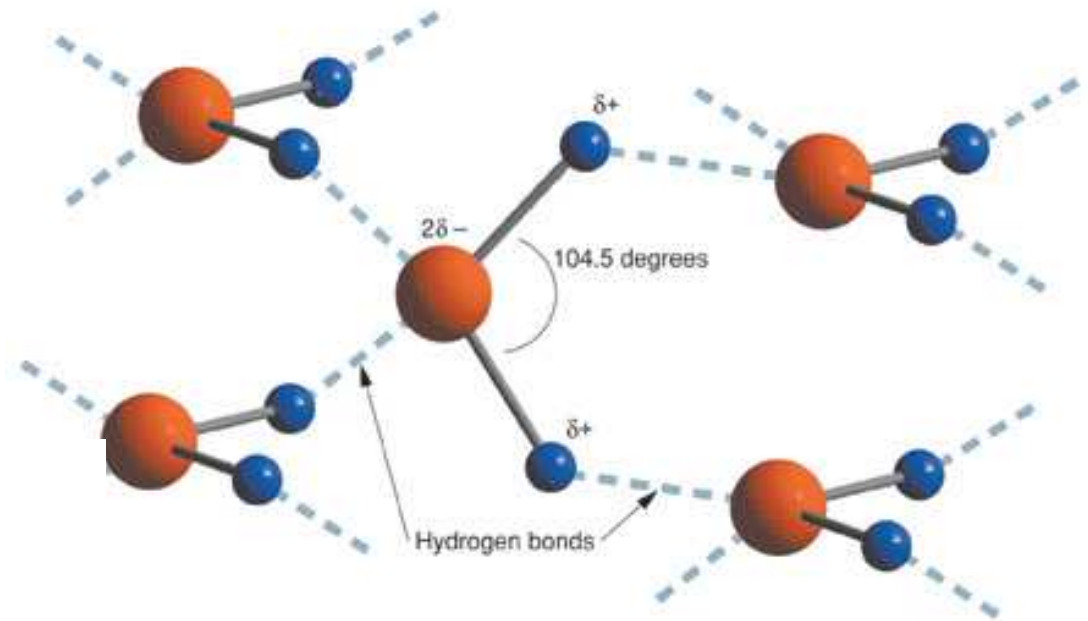
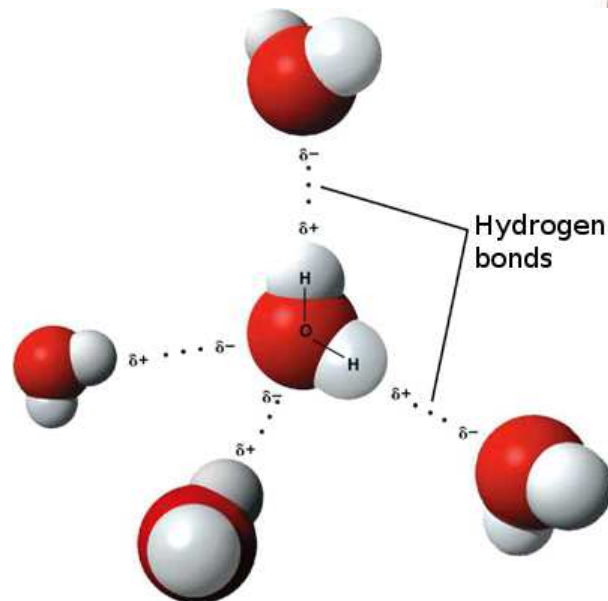
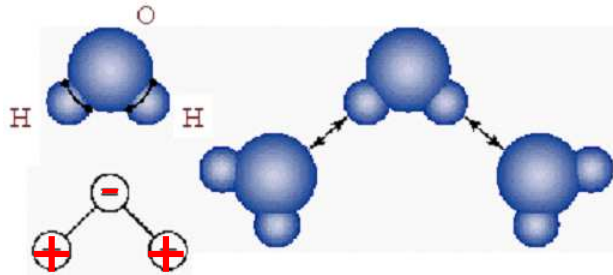


Magnésio (hexagonal)



Ligação de Hidrogénio

Este tipo de ligação é, em geral, comum em estruturas onde participa o ião hidrogénio (protão). É de esperar que o hidrogénio forme uma ligação covalente apenas com um outro átomo. Contudo, é possível que um átomo de hidrogénio seja atraído fortemente para dois átomos, formando-se ligações entre o hidrogénio e esses átomos com uma **energia de ligação** da ordem de 0,1 eV.



Ligações de van der Waals (2)

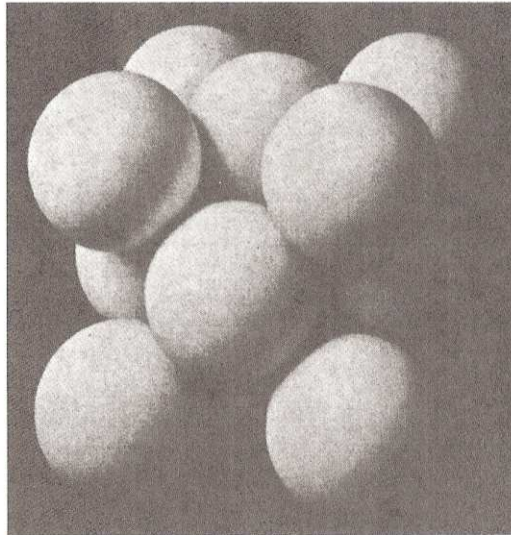
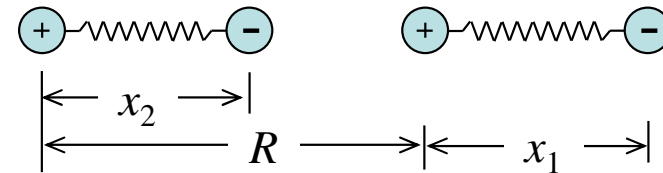


Figure 2 Cubic close-packed (fcc) crystal structure of the inert gases Ne, Ar, Kr, and Xe. The lattice parameters of the cubic cells are 4.46, 5.31, 5.64, and 6.13 Å, respectively, at 4 K.

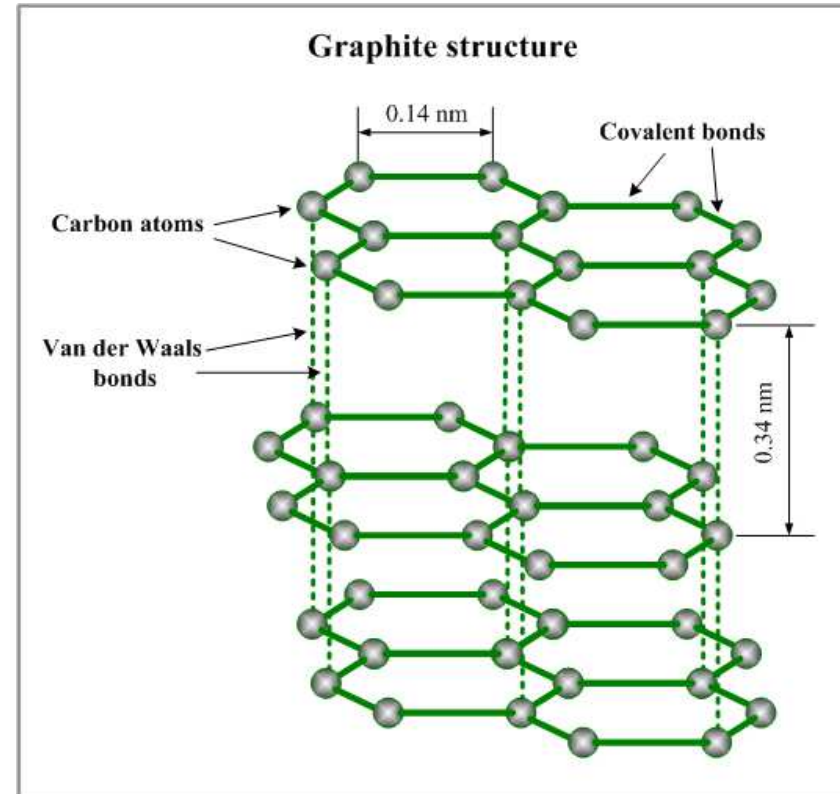
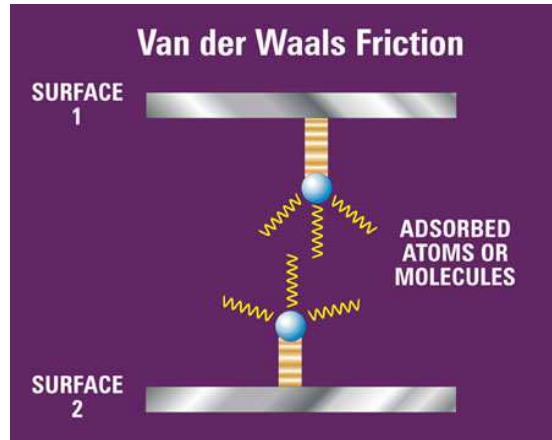


$$\Delta U = -\hbar\omega_0 \cdot \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{C \cdot R^3} \right)^2 = -\frac{A}{R^6}.$$

A interacção entre os dois osciladores é atractiva e varia com o inverso da sexta potência da distância entre os osciladores. Esta é a interacção de van der Waals, também conhecida como interacção de London ou interacção induzida dipolo-dipolo. Trata-se da **interacção atractiva** mais importante nos cristais de gases nobres e em muitos cristais moleculares orgânicos. A interacção é um efeito quântico no sentido em que $\Delta U \rightarrow 0$ quando $\hbar \rightarrow 0$. A interacção de van der Waals não depende, para a sua existência, de nenhuma sobreposição das densidades de carga dos dois átomos.

Forças de van der Waals (3)

<http://images.google.pt/images?q=Liga%C3%A7%C3%B5es%20de%20van%20der%20Waals&oe=utf-8&rls=org.mozilla:pt-PT:official&client=firefox-a&um=1&ie=UTF-8&sa=N&hl=pt-PT&tab=wi>

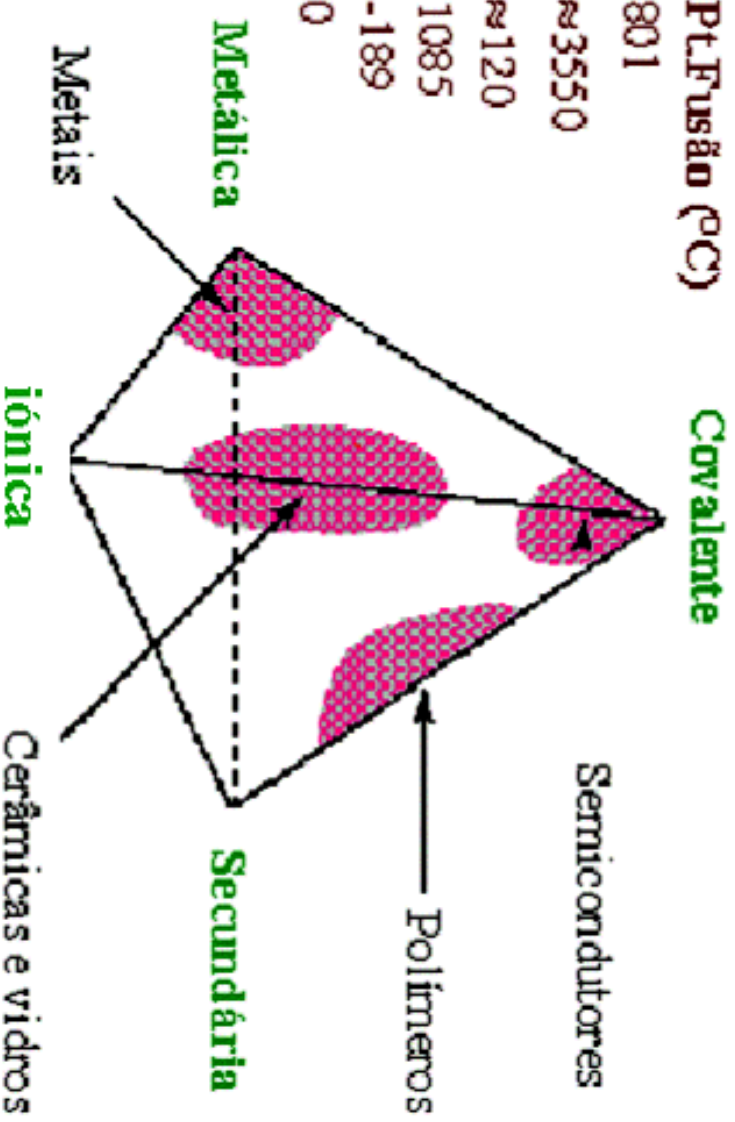


http://pt.wikipedia.org/wiki/For%C3%A7as_de_van_der_Waals



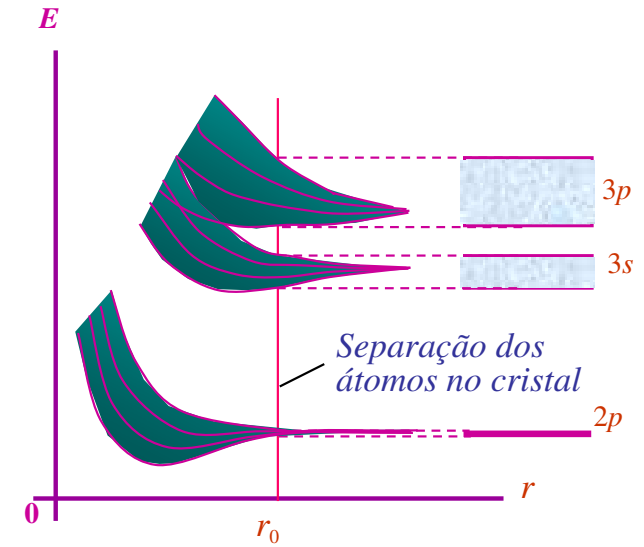
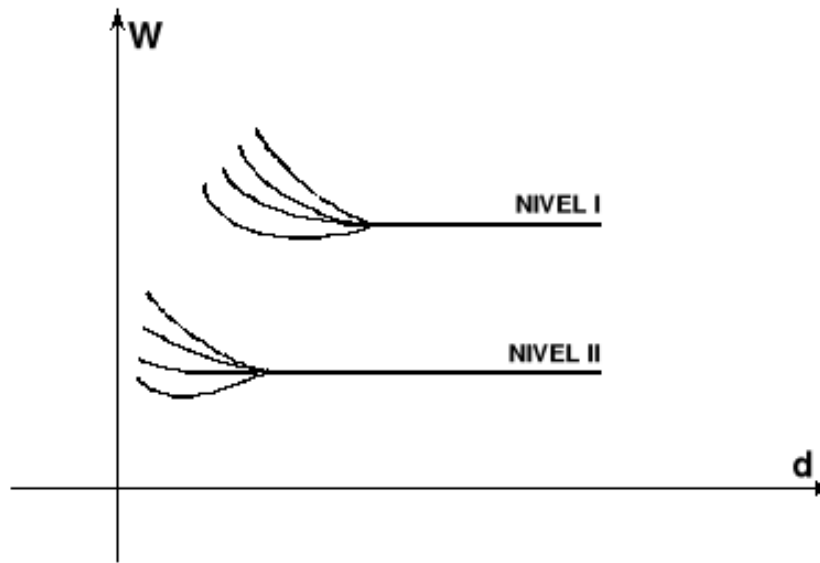
Ligação Covalente-Iônica e Ligação Covalente-Metálica

Material	Ligação	Pt.Fusão (°C)
NaCl	Iônica	801
C (diamante)	Cov.alente	≈3550
Polietileno	Cov./Sec.	≈120
Cu	Metálica	1085
Ar	Sec. (ind.)	-189
H ₂ O	Sec. (perm.)	0



Bandas de energia

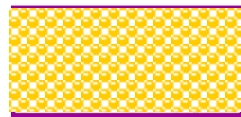
Bandas de energia



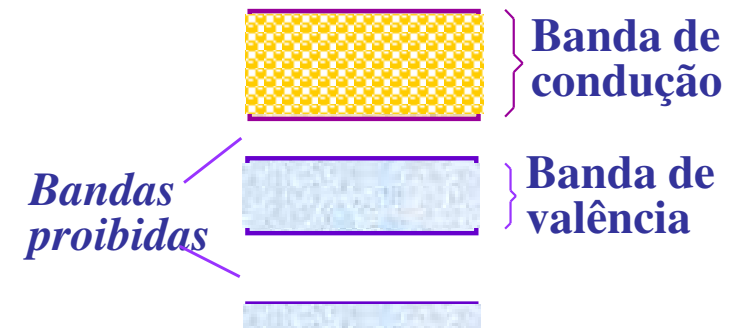
Isolador



Condutor

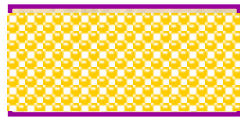


Semicondutor

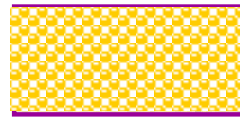


Dielétricos, semicondutores e condutores

Isolador



Condutor



Bandas proibidas

Semicondutor



Banda de condução

Bandas proibidas



Banda de valência

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Prof. MARCELO POLACHINI

Química (2009) - todos os direitos reservados

www.quimicafat.com.br

Hidrogênio 1,00784 (7) H		Lítio 6,941 (2) Li		Sódio 22,989770 (2) Na		Potássio 39,0983 (1) K		Rubídio 85,4678 (3) Rb		Césio 132,90545 (2) Cs		Frâncio [223] Fr		Hélio 4,002602 (2) He	
IIA		IIA		IIA		IIA		IIA		IIA		IIA		VIIA	
2		3		4		5		6		7		8		9	
Be 9,012182 (3) Be		Boro 10,811 (7) B		Carbono 12,0107 (4) C		Nitrogênio 14,0064 (2) N		Oxigênio 15,9994 (2) O		Fluor 18,9984032 (5) F		Neônio 20,1797 (6) Ne		10	
Mg 24,3050 (6) Mg		Alumínio 26,981538 (2) Al		Silício 28,0855 (3) Si		Fósforo 30,973761 (2) P		Enxofre 32,065 (5) S		Cloro 35,453 (2) Cl		Argônio 39,948 (1) Ar		11	
Ca 40,078 (4) Ca		Escândio 44,058 (10) (9) Sc		Titânio 47,867 (1) Ti		Vanádio 50,9415 (1) V		Cromo 51,9961 (6) Cr		Manganês 54,938045 (3) Mn		Ferro 55,845 (2) Fe		12	
Sr 87,62 (1) Sr		Ítrio 88,90585 (2) Y		Zircônio 91,224 (2) Zr		Níbio 92,90638 (2) Nb		Molibdênio 95,94 (1) Mo		Tecnécio [98] Tc		Rutênio 101,07 (2) Ru		13	
Ba 137,327 (1) Ba		Lantânio 138,905 (2) La		Hafnio 178,49 (2) Hf		Tântalo 180,9473 (1) Ta		Volfrâmio 183,84 (1) W		Rênio 186,207 (1) Re		Osmio 190,23 (2) Os		14	
Ra [226] Ra		Actínio [227] Ac		Rutênio [261] Rf		Dubnio [262] Db		Seabórgio [263] Sg		Bólio [264] Bh		Háshio [265] Hs		15	
103		104		105		106		107		108		109		16	
103		104		105		106		107		108		109		17	
103		104		105		106		107		108		109		18	
103		104		105		106		107		108		109		19	
103		104		105		106		107		108		109		20	
103		104		105		106		107		108		109		21	
103		104		105		106		107		108		109		22	
103		104		105		106		107		108		109		23	
103		104		105		106		107		108		109		24	
103		104		105		106		107		108		109		25	
103		104		105		106		107		108		109		26	
103		104		105		106		107		108		109		27	
103		104		105		106		107		108		109		28	
103		104		105		106		107		108		109		29	
103		104		105		106		107		108		109		30	
103		104		105		106		107		108		109		31	
103		104		105		106		107		108		109		32	
103		104		105		106		107		108		109		33	
103		104		105		106		107		108		109		34	
103		104		105		106		107		108		109		35	
103		104		105		106		107		108		109		36	
103		104		105		106		107		108		109		37	
103		104		105		106		107		108		109		38	
103		104		105		106		107		108		109		39	
103		104		105		106		107		108		109		40	
103		104		105		106		107		108		109		41	
103		104		105		106		107		108		109		42	
103		104		105		106		107		108		109		43	
103		104		105		106		107		108		109		44	
103		104		105		106		107		108		109		45	
103		104		105		106		107		108		109		46	
103		104		105		106		107		108		109		47	
103		104		105		106		107		108		109		48	
103		104		105		106		107		108		109		49	
103		104		105		106		107		108		109		50	
103		104		105		106		107		108		109		51	
103		104		105		106		107		108		109		52	
103		104		105		106		107		108		109		53	
103		104		105		106		107		108		109		54	
103		104		105		106		107		108		109		55	
103		104		105		106		107		108		109		56	
103		104		105		106		107		108		109		57	
103		104		105		106		107		108		109		58	
103		104		105		106		107		108		109		59	
103		104		105		106		107		108		109		60	
103		104		105		106		107		108		109		61	
103		104		105		106		107		108		109		62	
103		104		105		106		107		108		109		63	
103		104		105		106		107		108		109		64	
103		104		105		106		107		108		109		65	
103		104		105		106		107		108		109		66	
103		104		105		106		107		108		109		67	
103		104		105		106		107		108		109		68	
103		104		105		106		107		108		109		69	
103		104		105		106		107		108		109		70	
103		104		105		106		107		108		109		71	
103		104		105		106		107		108		109		72	
103		104		105		106		107		108		109		73	
103		104		105		106		107		108		109		74	
103		104		105		106		107		108		109		75	
103		104		105		106		107		108		109		76	
103		104		105		106		107		108		109		77	
103		104		105		106		107		108		109		78	
103		104		105		106		107		108		109		79	
103		104		105		106		107		108		109		80	
103		104		105		106		107		108		109		81	
103		104		105		106		107		108		109		82	
103		104		105		106		107		108		109		83	
103		104		105		106		107		108		109		84	
103		104		105		106		107		108		109		85	
103		104		105		106		107		108		109		86	
103		104		105		106		107		108		109		87	
103		104		105		106		107		108		109		88	
103		104		105		106		107		108		109		89	
103		104		105		106		107		108		109		90	
103		104		105		106		107		108		109		91	
103		104		105		106		107		108		109		92	
103		104		105		106		107		108		109		93	
103		104		105		106		107		108		109		94	
103		104		105		106		107		108		109		95	
103		104		105		106		107		108		109		96	
103		104		105		106		107		108		109		97	
103		104		105		106		107		108		109		98	
103		104		105		106		107		108		109		99	
103		104		105		106		107		108		109		100	
103		104		105		106		107		108		109		101	
103		104		105		106		107		108		109		102	
103		104		105		106		107		108		109		103	

* De acordo com a última deliberação da Comissão de Massas Atômicas e Abundâncias Isotópicas da IUPAC, durante a 40ª Reunião Geral da IUPAC em Berlim, Alemanha (Agosto de 1999).

Hidrogênio

Metais

Semimetais

Ametais

Gases Nobres

Lantanóides

Actinóides

Metais

Metais: modelo dos electrões livres

Um sólido metálico pode considerar-se, numa primeira aproximação, como uma caixa quântica a três dimensões para os electrões de valência, cuja função de onda dos estados possíveis é dada por (por conveniência, assume-se que se trata de uma caixa cúbica de volume V):

$$\psi(x, y, z) = A \sin(n_x \pi x / L) \sin(n_y \pi y / L) \sin(n_z \pi z / L)$$

[metallicbond.swf](#)

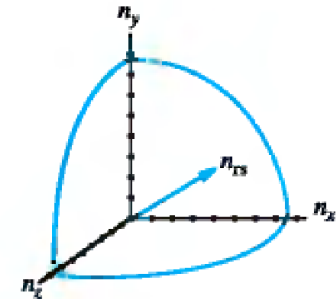
Os valores possíveis de energia correspondentes são:

$$E = \pi^2 \hbar^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) / 2mL^2$$

42.23 The allowed values of n_x , n_y , and n_z are positive integers for the electron states in the free-electron gas model. Including spin, there are two states for each unit volume in n space.

O número de estados possíveis numa esfera de raio

$$n_{rs} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2},$$



é igual a
$$N = \frac{\pi}{3} n_{rs}^3 = \frac{\pi}{3} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} = \frac{(2m)^{3/2} V E^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (\text{ver livro de texto}).$$

A densidade de estados, i.e., o número de estados por unidade de energia é dada por:

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{(2m)^{3/2} V}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}.$$

Concentração de electrões e energia de Fermi

A **energia de Fermi** no zero absoluto é a energia do nível de energia mais elevado ocupado por um sistema quântico à temperatura do zero absoluto, cuja notação é E_{F_0} . A zero kelvin, todos os estados com energia igual ou inferior à energia de Fermi estão ocupados.

Para um cristal metálico, o número de electrões está relacionado com a energia de Fermi no zero absoluto pela seguinte expressão:

$$N = \frac{(2m)^{3/2} V E_{F_0}^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (\text{ver livro de texto}). \quad \text{A concentração de electrões é : } n = \frac{N}{V} = \frac{(2m)^{3/2} E_{F_0}^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

A **Energia de Fermi** no zero absoluto, cuja notação é E_{F_0} , é dada por:

$$E_{F_0} = \frac{3^{2/3} \pi^{4/3} \hbar^2 n^{2/3}}{2m} \quad (\text{ver livro de texto}).$$

A baixas temperaturas pode-se considerar que a energia de Fermi não varia com a temperatura.

A **velocidade de Fermi** corresponde ao valor de velocidade dos electrões num gás de electrões livres com energia cinética média igual à energia de Fermi E_F :

$$v_F = \sqrt{2E_F / m_e}^*$$

A **energia média** de um electrão num gás de electrões livres num cristal metálico no zero absoluto é dada por:

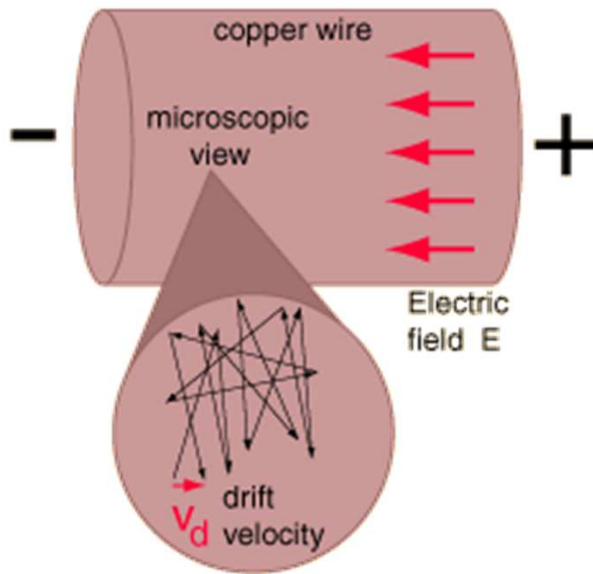
$$E_{med} = \frac{3}{5} E_{F_0}^* \quad (\text{ver livro de texto}).$$

Se os electrões se comportassem como um gás ideal, **o que não acontece por causa do princípio de exclusão de Pauli**, a sua energia cinética média e a velocidade, à temperatura T , seriam dadas por:

$$E_{med,T} = \frac{3}{2} k_B T \quad \text{e} \quad v_{med,T} = \sqrt{2E_{med,T} / m_e} \cdot (\text{Comparar com } ^* - \text{ para o cobre, ver página seguinte}).$$

Condutividade eléctrica

The electron moves at the Fermi speed, and has only a tiny drift velocity superimposed by the applied electric field.



Em primeira aproximação, a velocidade de arrastamento v_d dos portadores de carga num material é directamente proporcional ao campo eléctrico aplicado E : $v_d = \mu E$. A constante de proporcionalidade chama-se **mobilidade eléctrica do portador de carga**, $\mu = e\tau_0/m$, onde τ_0 é o tempo médio entre colisões.

A **densidade de corrente J** ($=I/A$ [A/m²]) num material, em resultado da aplicação de um campo eléctrico (ou diferença de potencial, ddp), é dada por: $J = en\mu E = \sigma E = env_d$, onde $\sigma = en\mu$ representa a **condutividade eléctrica** do material.

A condutividade eléctrica num metal é dada por

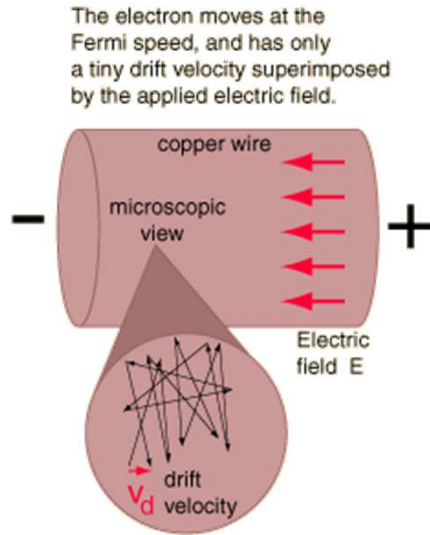
$$\sigma = \frac{ne^2 d}{m v_F}$$

onde v_F é a velocidade de Fermi, n é a densidade de portadores livres, m é massa dos portadores e d é o livre percurso médio dos portadores. Pode-se escrever $d = v_F \tau_0$.

A velocidade de arrastamento v_d dos electrões num metal é dada por

$$v_d = \frac{eE}{m} \tau = \frac{eE}{m} \frac{d}{v_F}$$

Condutividade eléctrica



Exemplo numérico: cobre

Sabendo que o valor experimental de σ a 295 K é determinar d e v_d .

$$\sigma = 5.9 \times 10^7 / \Omega m$$

$$n = \frac{(6.02 \times 10^{23} \text{ atoms / mole})(8.92 \times 10^3 \text{ kg / m}^3)}{63.5 \times 10^{-3} \text{ kg / mole}} = 8.46 \times 10^{28} / m^3$$

$$v_F = c \sqrt{\frac{2E_F}{mc^2}} = 3 \times 10^8 \text{ m / s} \sqrt{\frac{2 \times 7 \text{ eV}}{511000 \text{ eV}}} = 1.57 \times 10^6 \text{ m / s}$$

$$d = \frac{\sigma m v_F}{n e^2} = \frac{(5.9 \times 10^7 / \Omega m)(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.57 \times 10^6 \text{ m / s})}{(8.46 \times 10^{28} / m^3)(1.6 \times 10^{-19})^2} = 3.9 \times 10^{-8} \text{ m}$$

A resistência de um fio de cobre com 1 mm de diâmetro e 1 metro de comprimento é:

$$R = \frac{L}{\sigma A} = \frac{1 \text{ m}}{(5.9 \times 10^7 / \Omega m)(\pi (0.0005 \text{ m})^2)} = 0.0216 \Omega$$

Se a esse comprimento de fio for aplicada uma ddp de 1 volt, a densidade de corrente que percorre o fio é:

obtendo-se:

$$J = 5.9 \times 10^7 \text{ A / m}^2 \quad v_d = \frac{J}{n e} = \frac{5.9 \times 10^7 \text{ A / m}^2}{(8.46 \times 10^{28} / m^3)(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})} = 0.0043 \text{ m / s}$$

Supercondutividade

Condutor (fís.) substância ou corpo que oferece uma resistência relativamente pequena à passagem de uma corrente eléctrica, do calor, etc. (por ex., um metal);

Supercondutividade s. f. (fís.) propriedade que têm certos metais (mercúrio, chumbo, estanho, alumínio, cádmio, etc.) de, quando arrefecidos a temperatura extremamente baixa - característica para cada metal (temperatura de transição) - verem a sua condutividade eléctrica extremamente aumentada e de maneira brusca. (De super- + condutividade)

Supercondutor adj. (fís.) diz-se do estado de um metal que foi arrefecido, de modo a adquirir supercondutividade. (De super- + condutor)

<http://pt.wikipedia.org/wiki/Supercondutividade>

<http://en.wikipedia.org/wiki/Superconductivity>

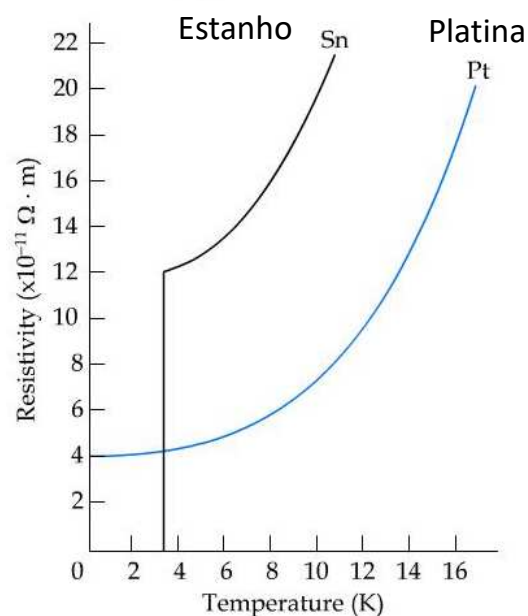
Supercondutores

Condutor (fís.) substância ou corpo que oferece uma resistência relativamente pequena à passagem de uma corrente eléctrica, do calor, etc. (por ex., um metal);

No caso dos metais a condutividade aumenta à medida que diminui a temperatura.

Supercondutividade s. f. (fís.) propriedade que têm certos materiais (mercúrio, chumbo, estanho, alumínio, cádmio, etc.) de, quando arrefecidos a temperatura extremamente baixa - característica do material (temperatura de transição) - verem a sua condutividade eléctrica extremamente aumentada e de maneira brusca.

Superconductor Characteristics

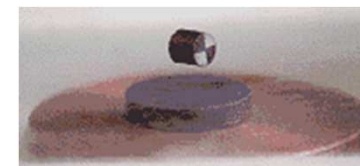
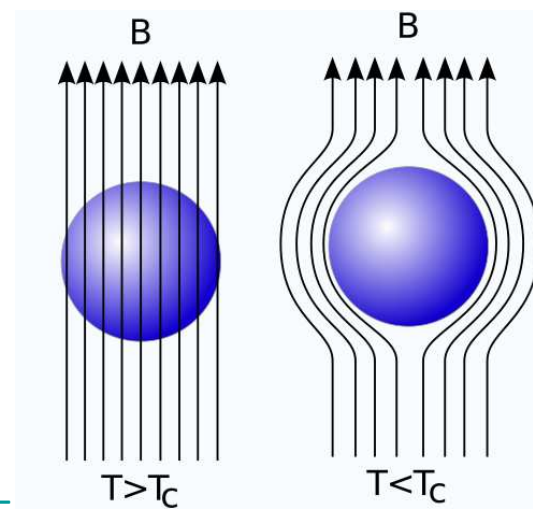


- Resistivity drops to zero at critical temperature, T_C .
- In general, good conductors make bad superconductors.
- Superconductors have two characteristics: zero resistivity and the Meissner effect.

<http://www.youtube.com/watch?v=2--43eAS1iY&feature=related>

<http://superconductors.org/>

http://pt.wikipedia.org/wiki/Efeito_Messner



http://super.abril.com.br/superarquivo/1987/conteudo_110921.shtml

Os fios de cerâmica poderão ser em pouquíssimo tempo supercondutores, capazes de transmitir electricidade sem nenhuma perda de energia

[meissner video.swf](#)

<http://www.youtube.com/watch?v=Oqqs3OfCny8>

http://w3.ualg.pt/%7Ejlongras/meissner_video.swf

Efeitos termoeléctricos

(ver trabalho prático)

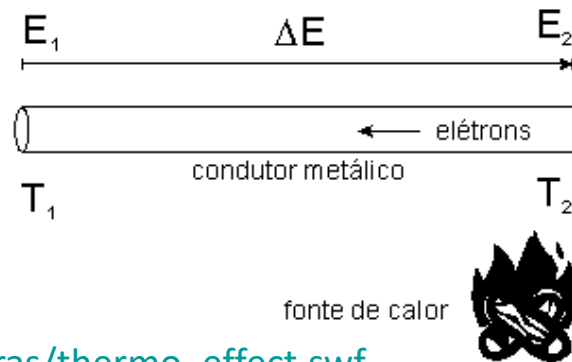
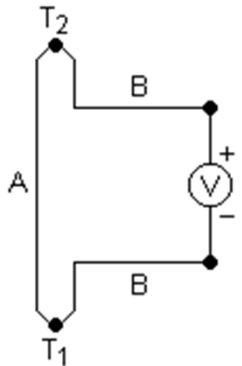
Termoelectricidade s. f. capítulo da física que se ocupa da electricidade desenvolvida por meio do calor; electricidade desenvolvida por diferença de temperatura; estudo das relações entre os fenómenos térmicos e os fenómenos eléctricos. (De termo- + electricidade)

Termoeléctrico adj. relativo à electricidade desenvolvida por meio de calor;

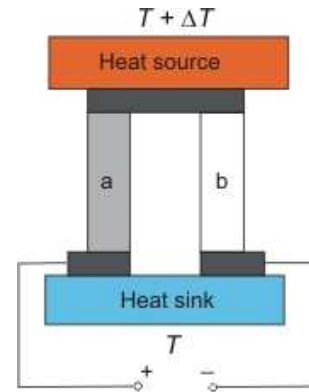
Efeitos ~s: conjunto de fenómenos produzidos por diferenças de temperatura entre diversas partes de um circuito eléctrico. (De termo- + eléctrico)

Efeitos Seebeck e Peltier

O **efeito Seebeck** corresponde à produção de uma diferença de potencial (tensão eléctrica) entre duas junções de condutores (ou semicondutores) de materiais diferentes quando elas estão a diferentes temperaturas (força electromotriz térmica).



fonte de calor



Cassini spacecraft

Heat source: radioactive materials PuO_2

Heat sink: outer space

http://w3.ualg.pt/%7Ejlongras/thermo_effect.swf

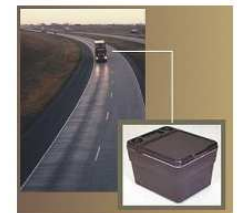
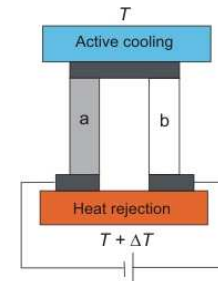
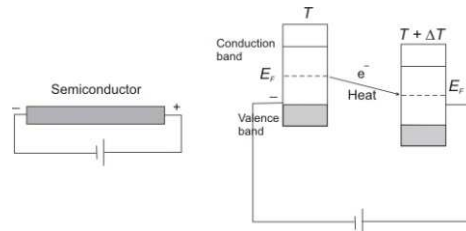
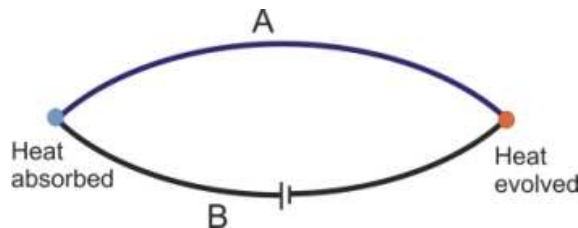
http://w3.ualg.pt/%7Ejlongras/appl_ther_effect.swf

[thermo_effect.swf](#)

Aplicações: por exemplo, na geração de energia eléctrica em missões espaciais

[appl_ther_effect.swf](#)

O **efeito Peltier** corresponde à produção de um gradiente de temperatura em duas junções de dois condutores (ou semicondutores) de materiais diferentes quando submetidos a uma diferença de potencial (tensão eléctrica) em circuito fechado (consequentemente, percorrido por uma corrente eléctrica).



Portable coolers



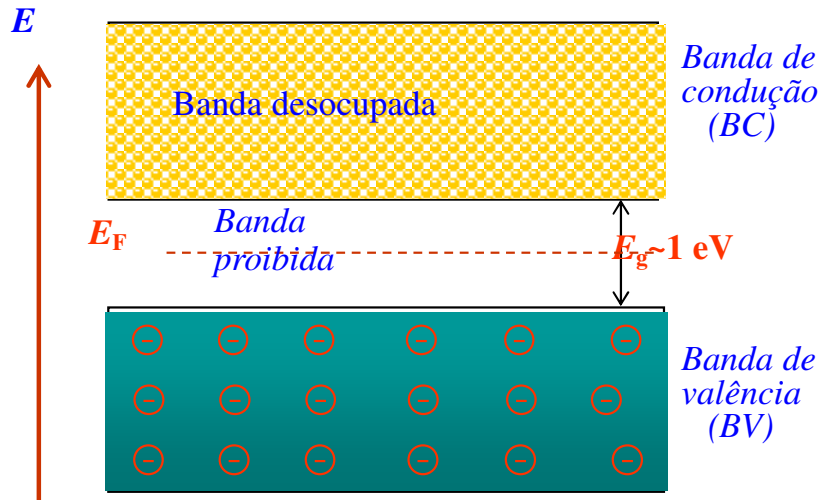
CCD camera and other electronics

Estes dois efeitos são muitas vezes denominados em conjunto como **efeito Peltier-Seebeck** ou **efeito termelétrico**.

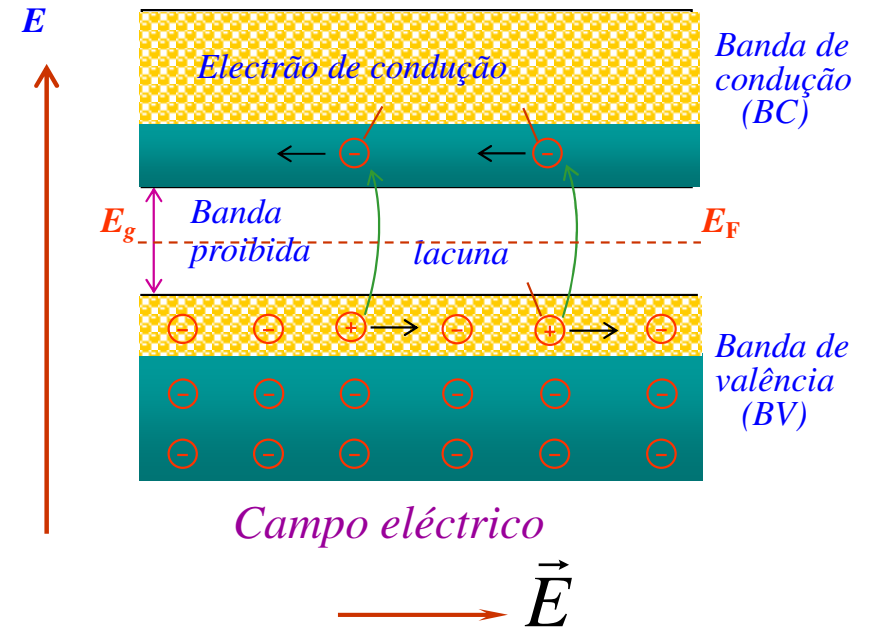
Semicondutores e dispositivos

Semicondutores intrínsecos

Semicondutor intrínseco a 0 K



Semicondutor intrínseco ($T > 0$ K)



À temperatura $T > 0$ K, a probabilidade de um electrão ocupar um nível de energia E , é dada pela distribuição de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left[\frac{(E-E_F)}{k_B T}\right] + 1},$$

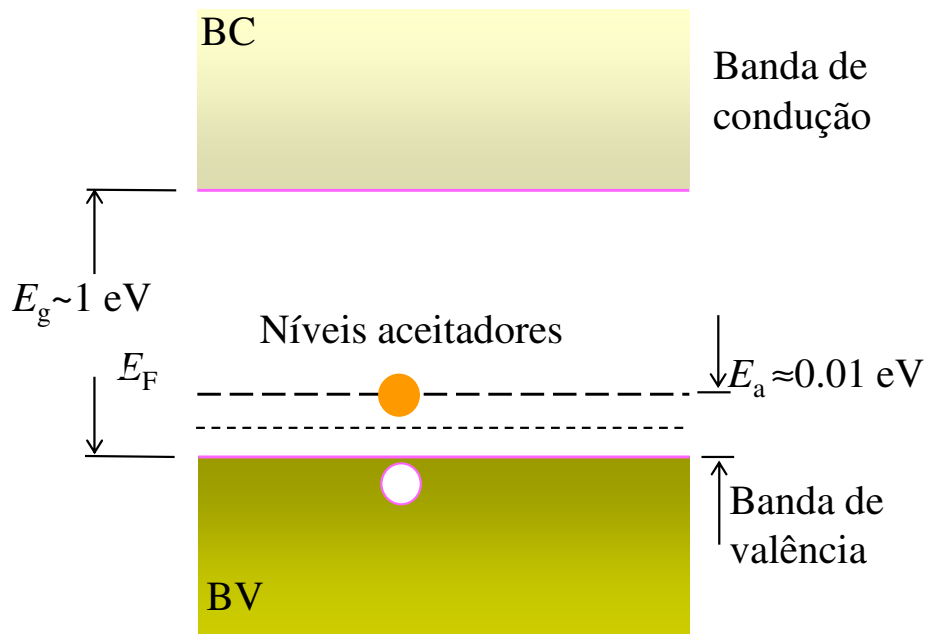
onde o índice F identifica o nível de energia com probabilidade de ocupação igual a $\frac{1}{2}$ (50%), que se designa por **nível de Fermi**.

Num SC intrínseco, o nível de Fermi situa-se sensivelmente a meio da banda proibida que separa a banda de valência da banda de condução.

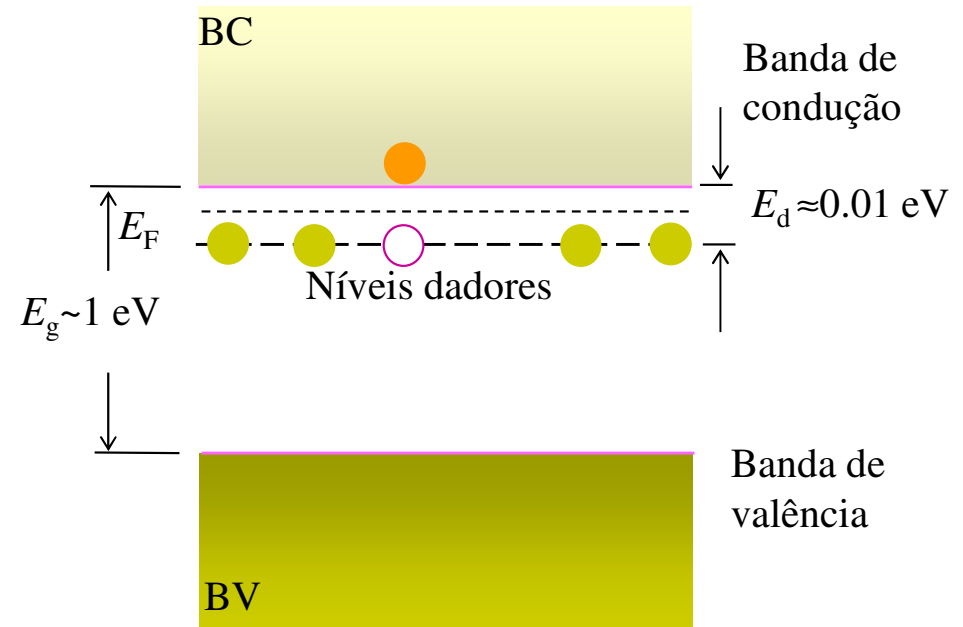
Semicondutores extrínsecos

Este processo é designado por **dopagem**, e o material SC torna-se **extrínseco** (*impuro*). Quando os átomos são substituídos por elementos de valência inferior ao do elemento base, o semiconductor obtido diz-se de **tipo p**; quando a impureza possui uma valência superior, o SC designa-se de **tipo n**.

Semiconductor tipo p

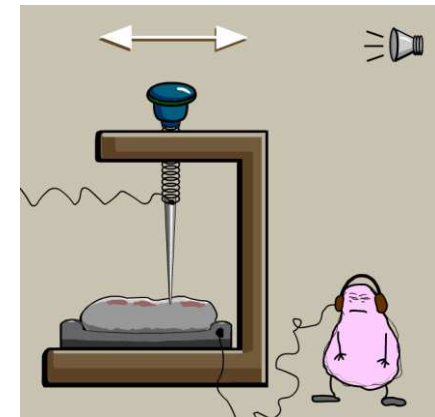


Semiconductor tipo n



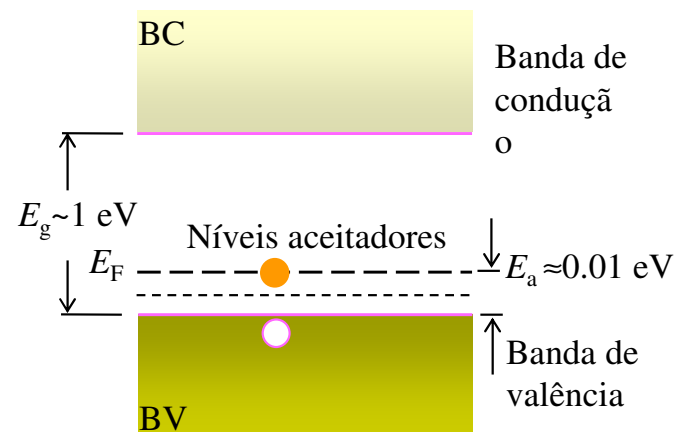
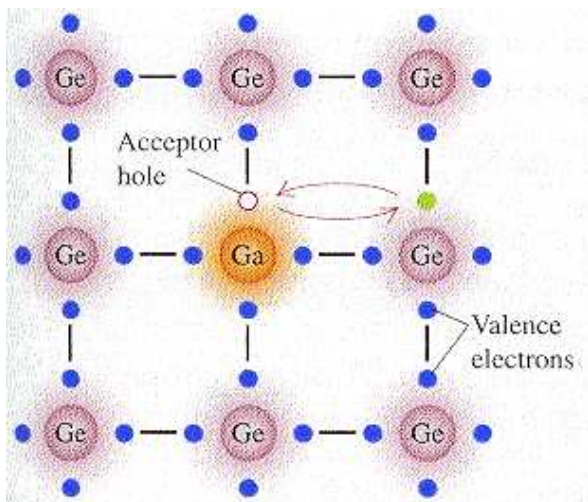
http://pt.wikipedia.org/wiki/Dopagem_eletr%C3%B4nica

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/crystalBillFinal.swf>

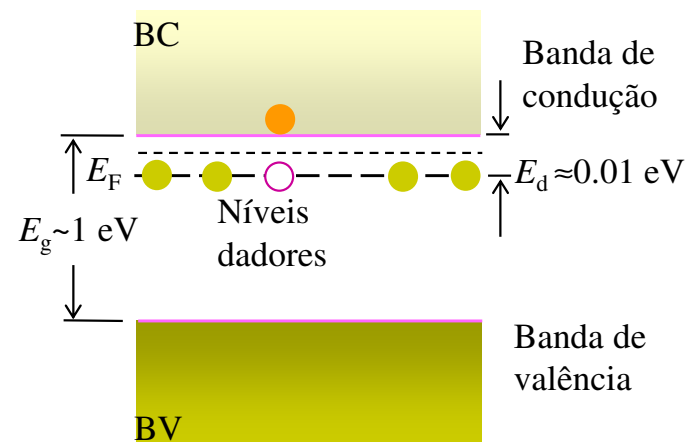
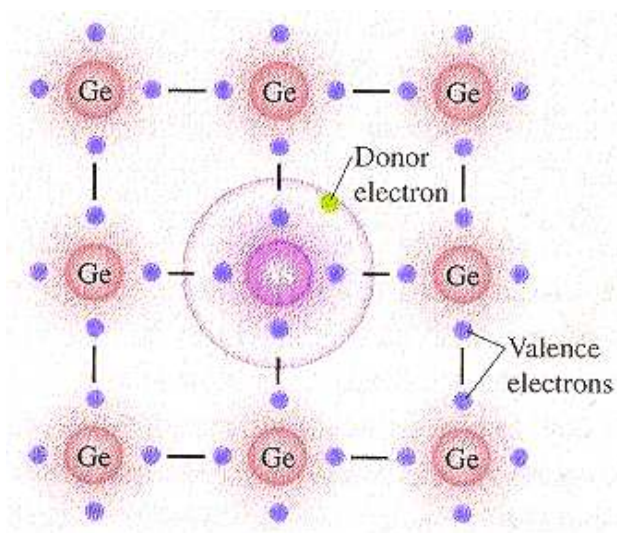


Impurezas aceitadoras e impurezas dadoras

Semicondutores tipo-p

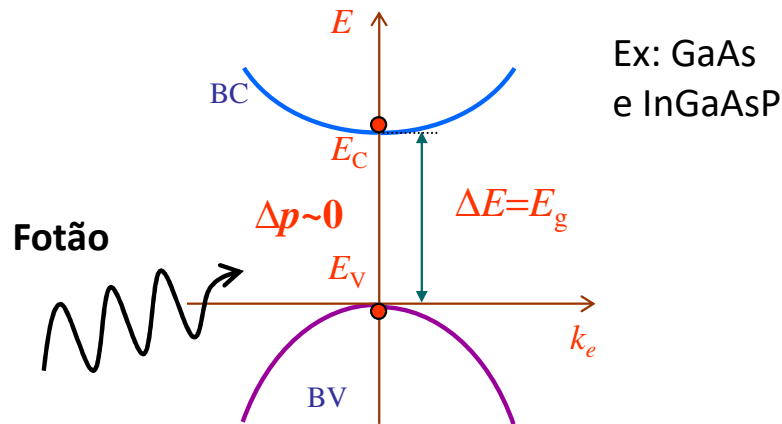


Semicondutores tipo-n

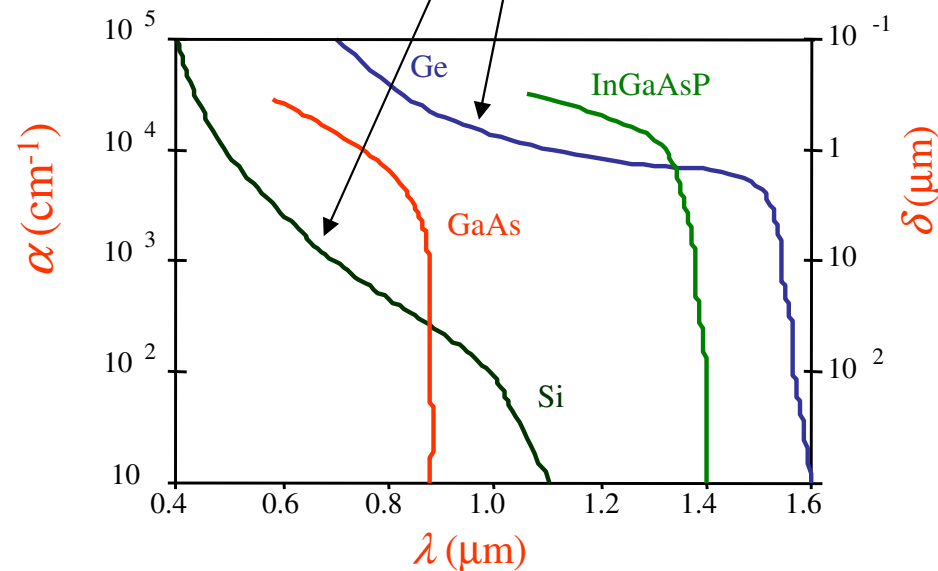
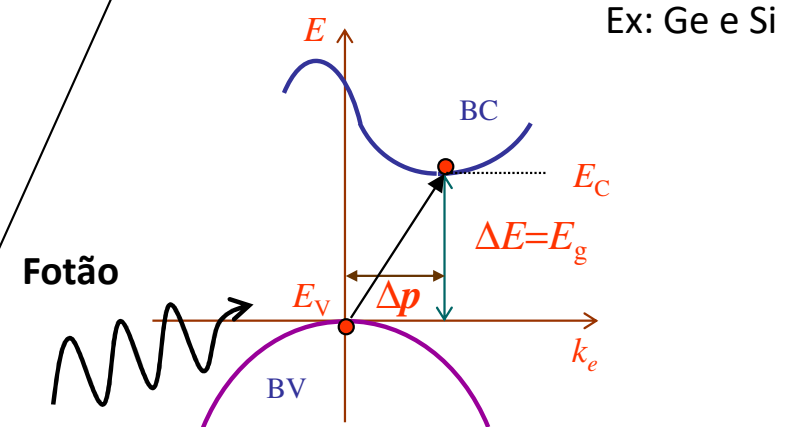


Propriedades ópticas dos semicondutores

Semicondutor de banda proibida directa

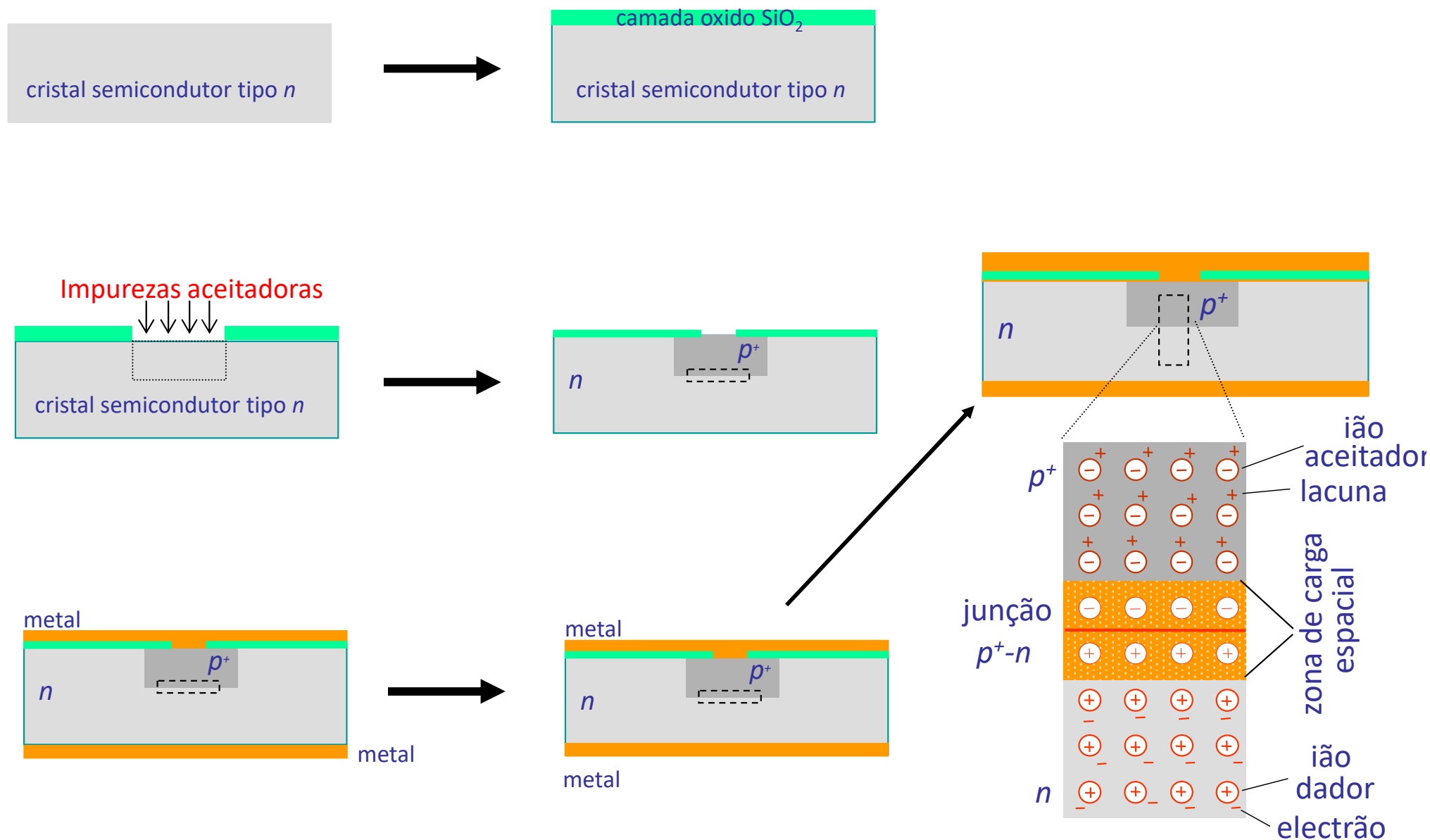


Semicondutor de banda proibida indirecta



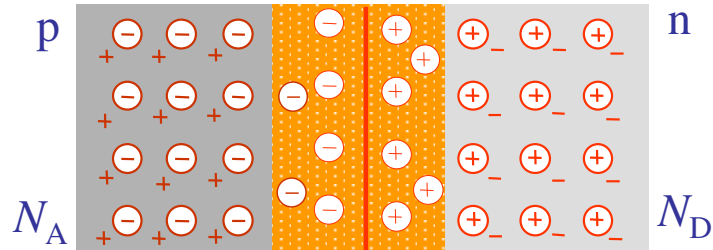
Homojunções semicondutoras

Fabricação de uma homojunção p^+-n

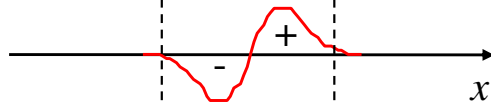


Bandas de energia numa Junção *p-n*

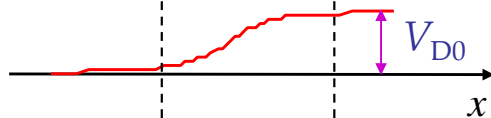
Junção *p-n* em equilíbrio ($V_{pn}=0$ V)



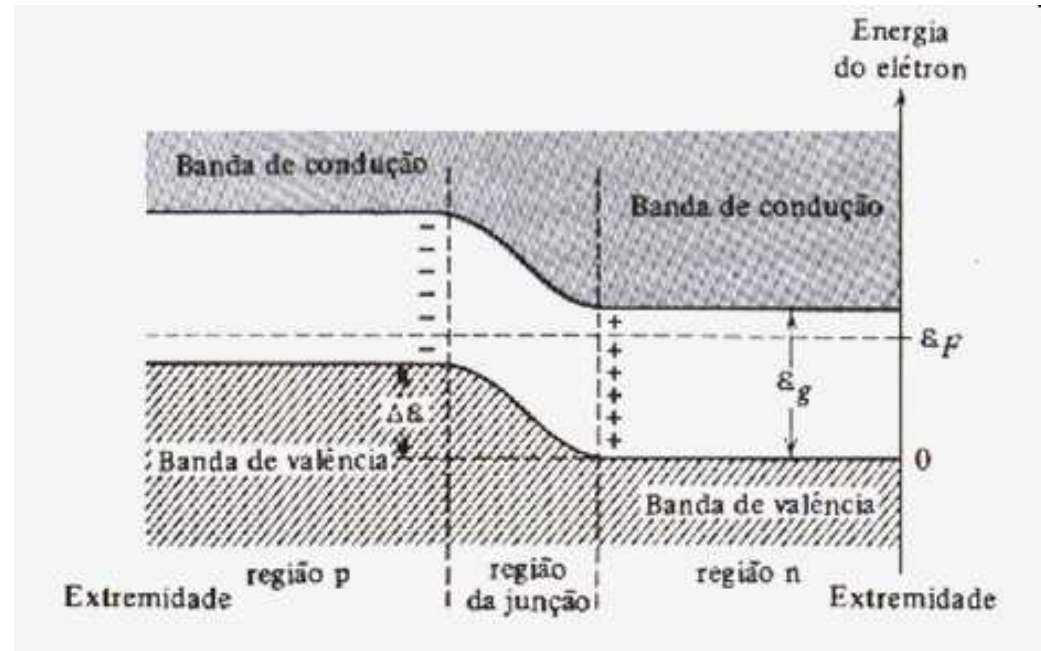
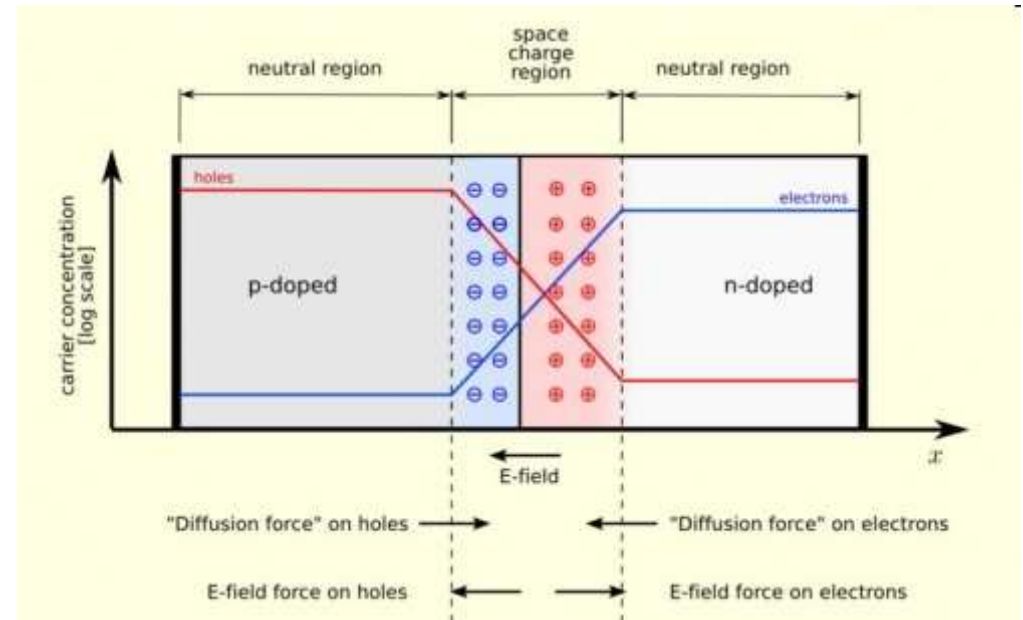
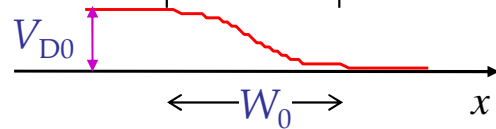
Densidade de carga ρ



Barreira de potencial (para as lacunas)

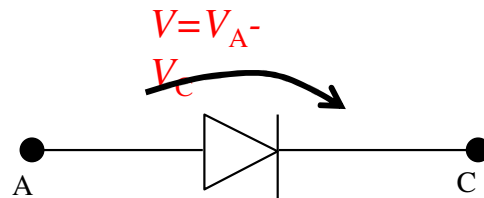


Barreira de potencial (para os electrões)



Característica corrente-tensão (I - V) de uma Junção p - n

O dispositivo mais simples baseado numa junção p - n é o **díodo semiconductor rectificador**, cujo símbolo é:

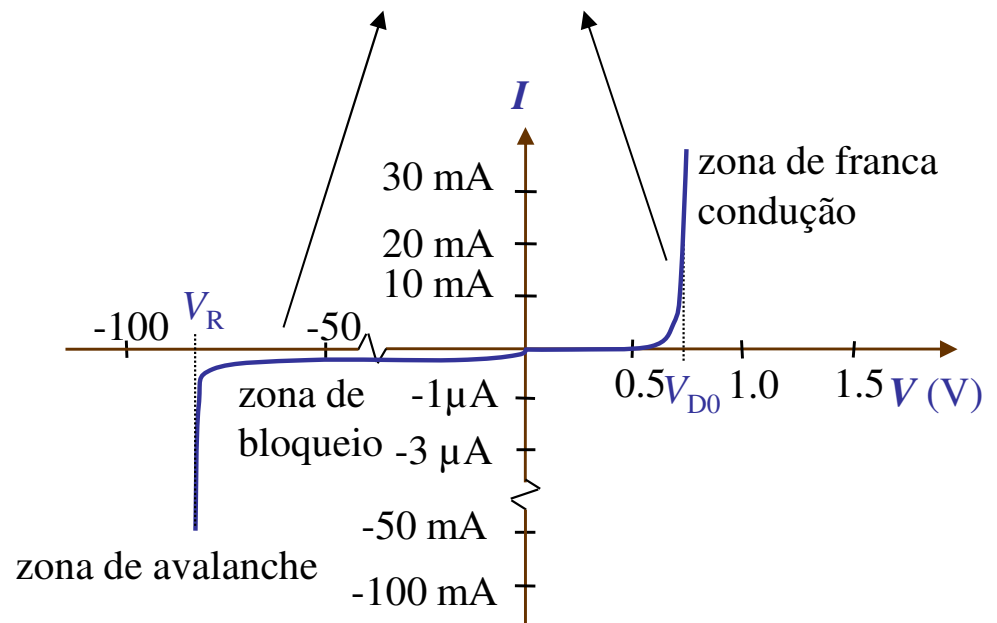
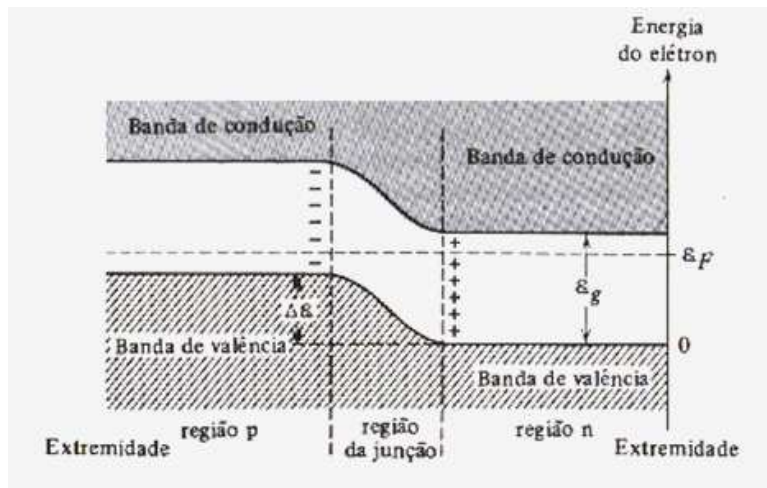


onde **A** representa o terminal ânodo (lado p da junção) e **C** indica o cátodo (região n da junção).

Característica corrente-tensão (I - V)

$$I(V) = I_s \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right]$$

$$\text{com } I_s \propto \exp\left(-\frac{eV_{D0}}{k_B T}\right)$$



V positivo diminui a altura da barreira para os electrões e para as lacunas: passagem de corrente de A para C. V negativo aumenta a altura da barreira para os electrões e para as lacunas: praticamente não passa corrente através do dispositivo de C para A.

Dispositivos baseados em junções p-n

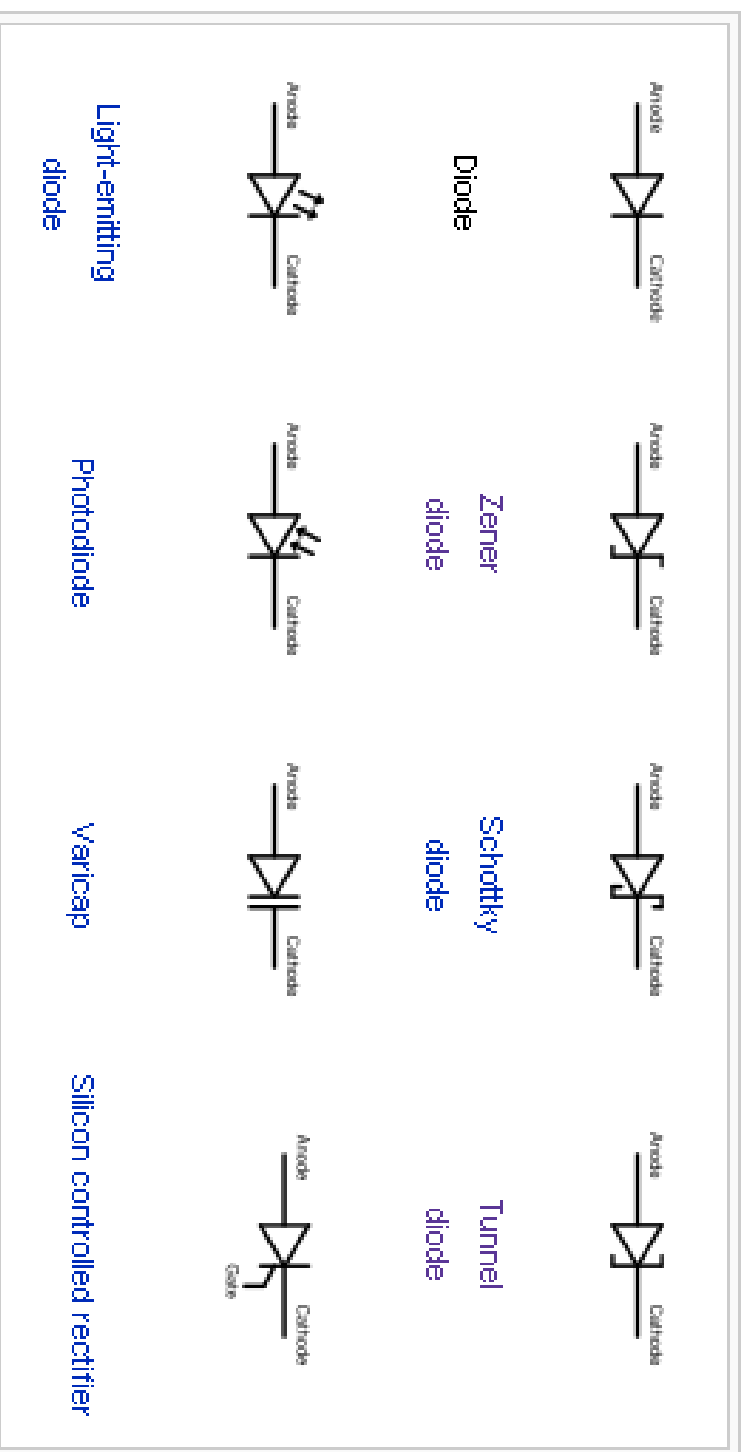
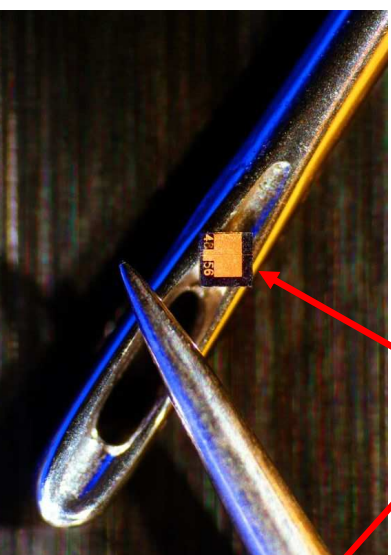
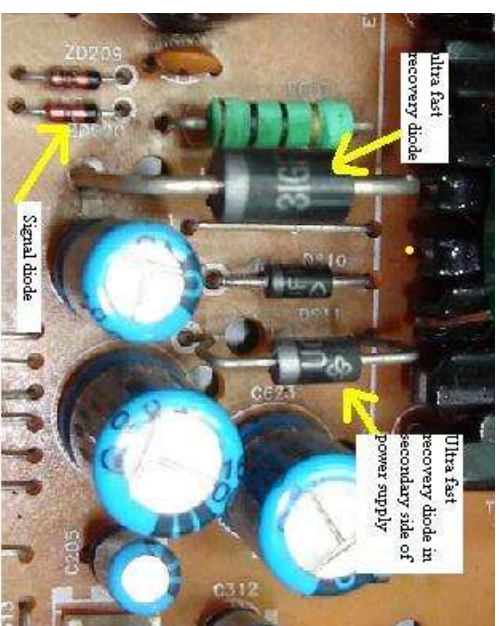


Figure 7: Some diode symbols

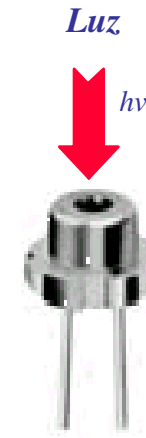
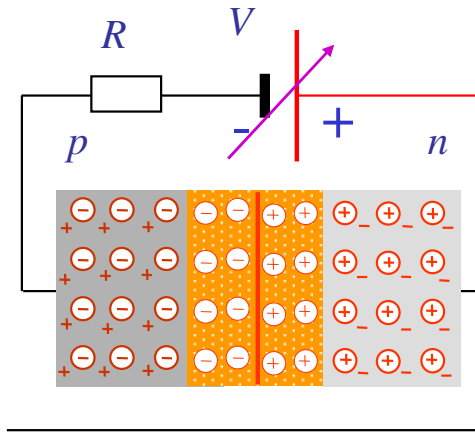
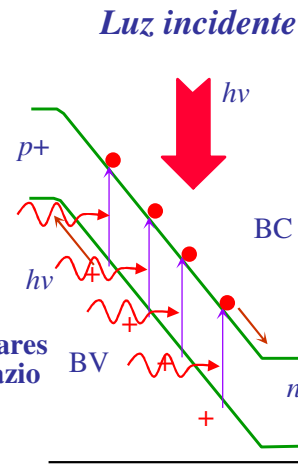


Outros dispositivos baseados em Junções $p-n$

Fotodíodo

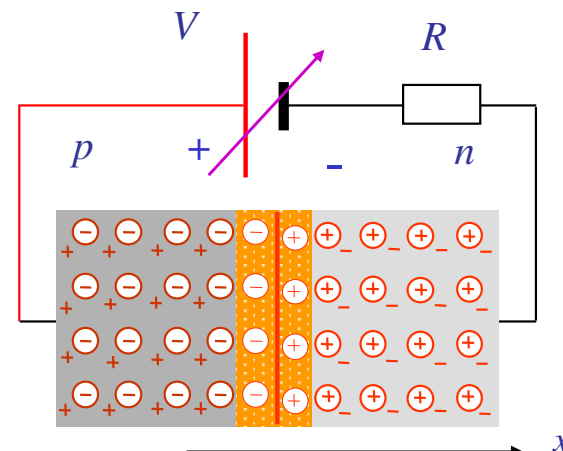
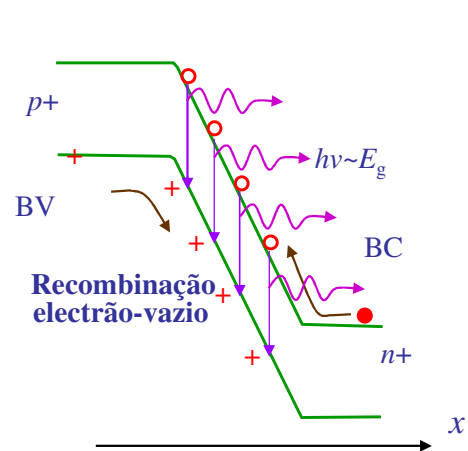
BV:
banda de valência
BC:
banda de Condução

Formação de pares
elétron-vazio



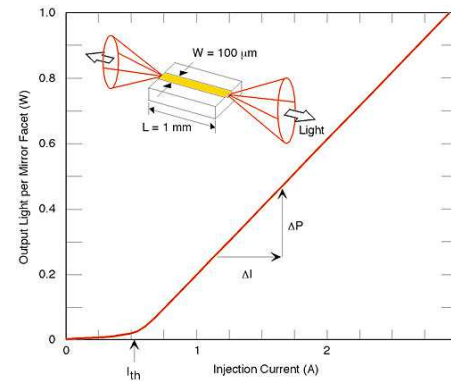
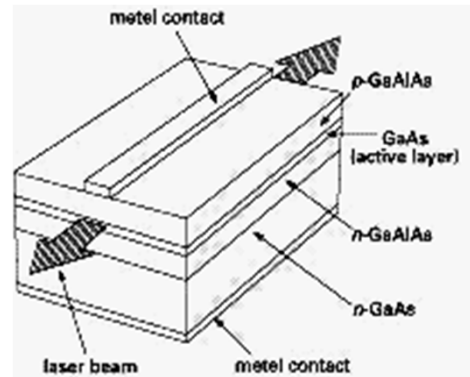
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/Pdiode.mov>

Díodo Emissor de Luz (LED)



Outros dispositivos baseados em Junções $p-n$

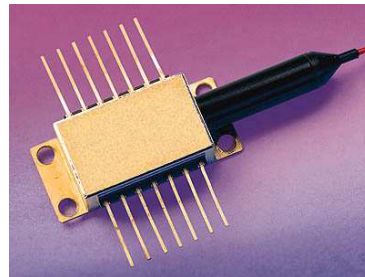
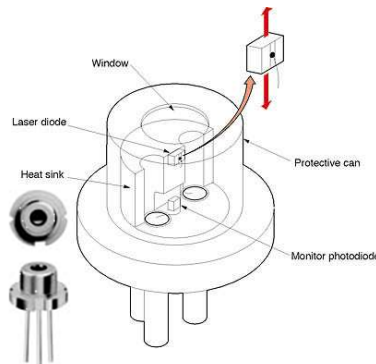
Díodo Laser



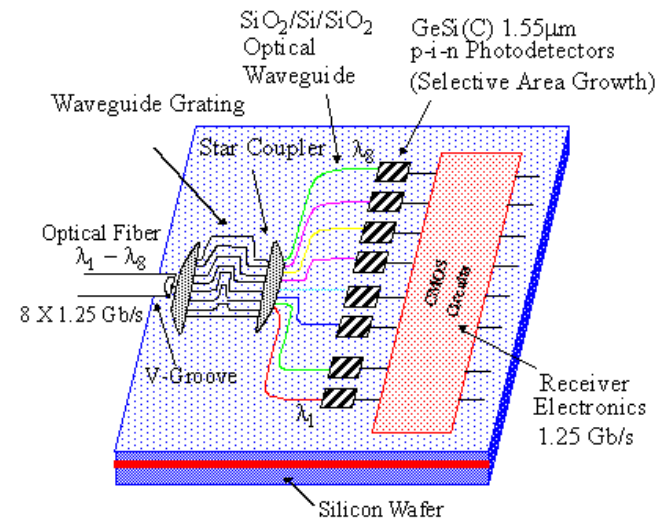
http://w3.ualg.pt/~jlongras/med_diode.mov

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/laser.mov>

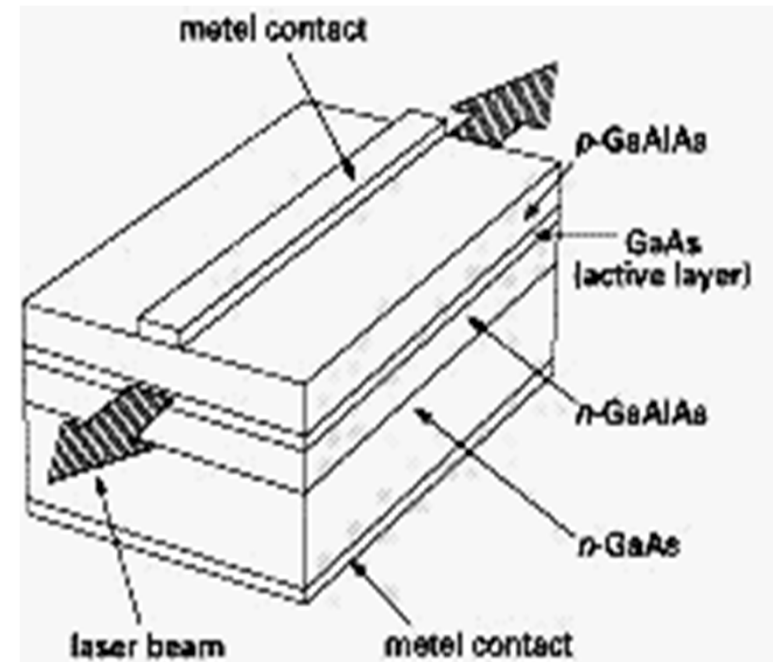
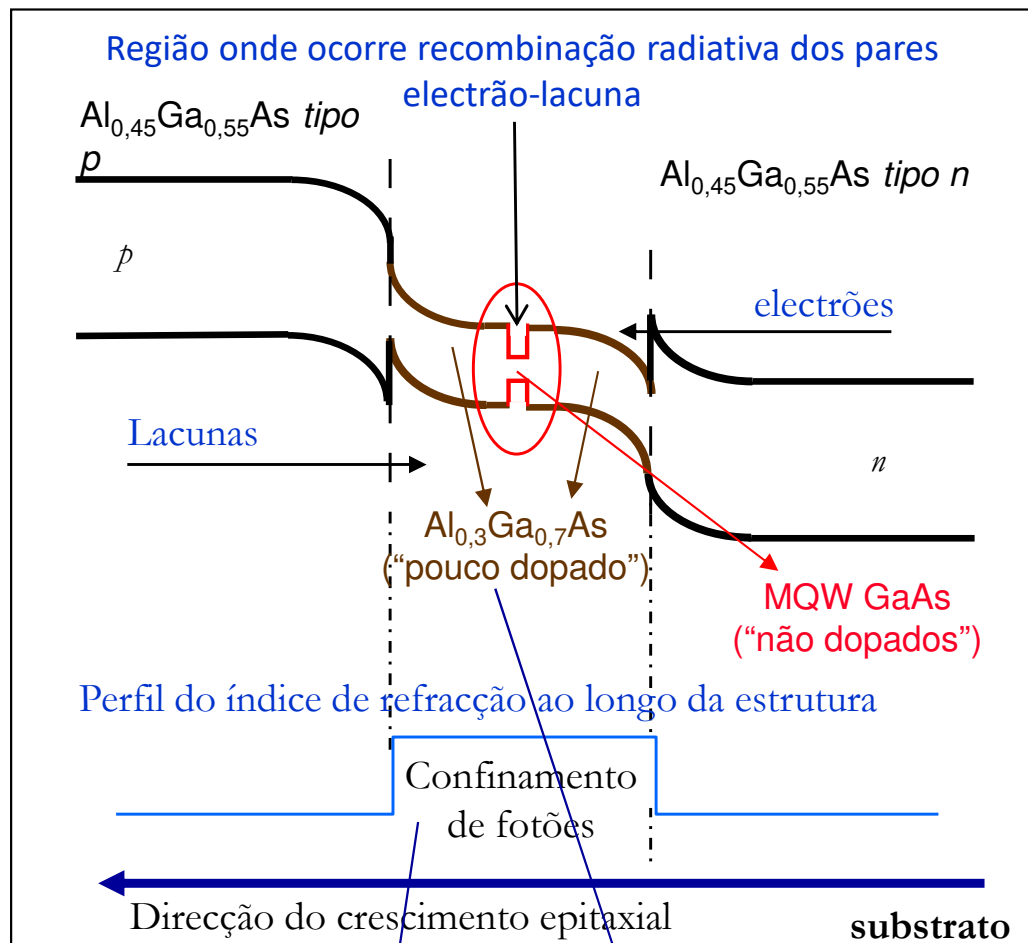
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/TxRxOp.mov>



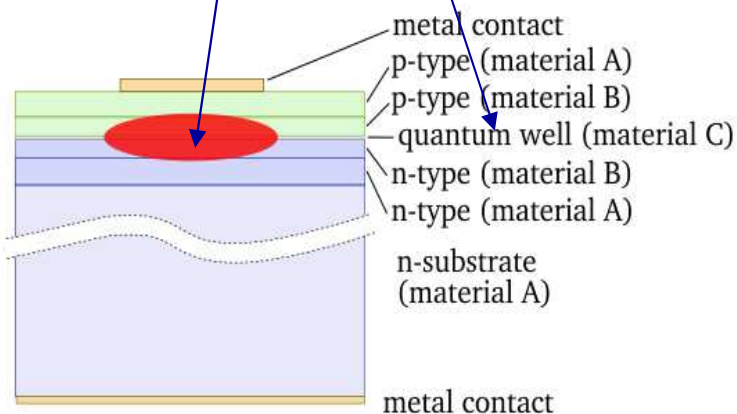
Circuitos Integrados Optoelectrónicos



Estrutura *básica* de um laser polarizado



Largura do poço
~ 10 nm



http://w3.ualg.pt/~jlongras/med_diode.mov

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/laser.mov>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/TxRxOp.mov>

Transístores e Aplicações

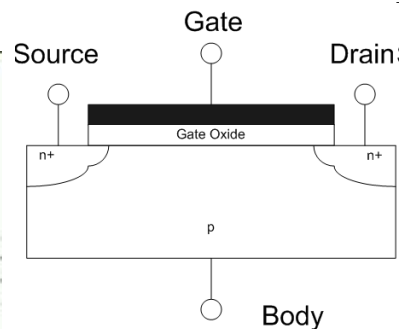
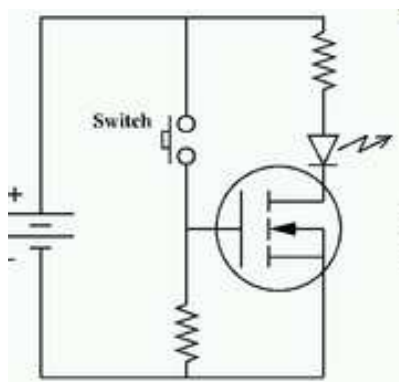
Transístor

O Primeiro Transístor, 1947



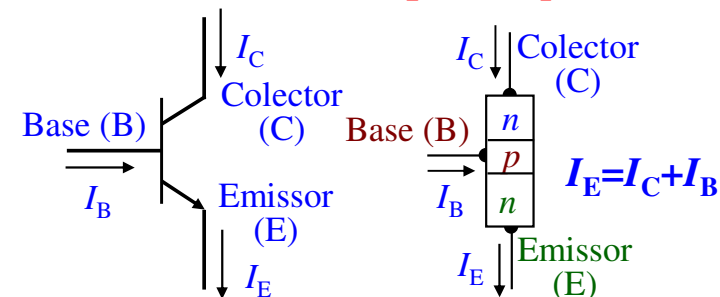
Transístor MOSFET

Example application of an N-Channel MOSFET. When the switch is pushed the LED lights up. [2]

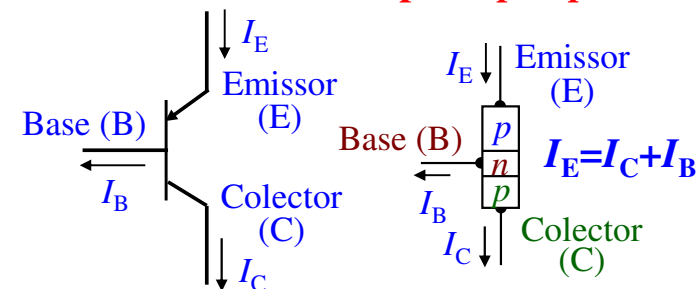


Corte transversal de um MOSFET tipo N (NMOS).

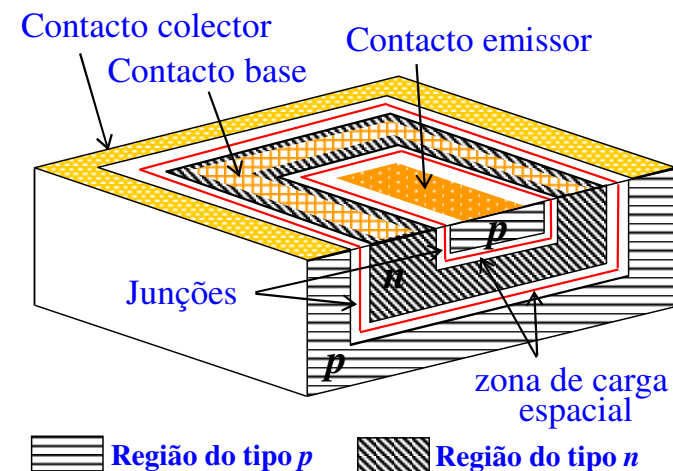
Símbolo do transístor bipolar *n-p-n*



Símbolo do transístor bipolar *p-n-p*



Esquema simplificado da estrutura de um transístor bipolar *pnp* moderno



Da válvula ao transistor e o circuito integrado

Antes do transistor

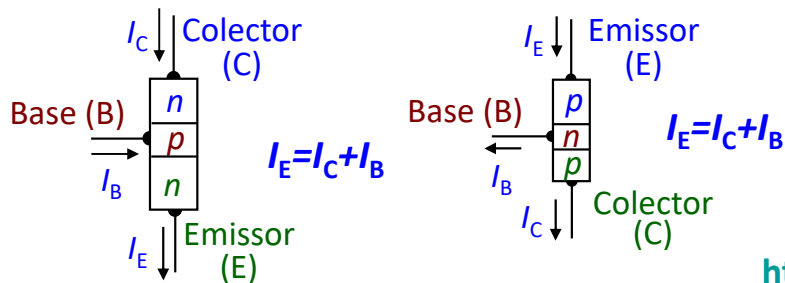
Válvula de vácuo



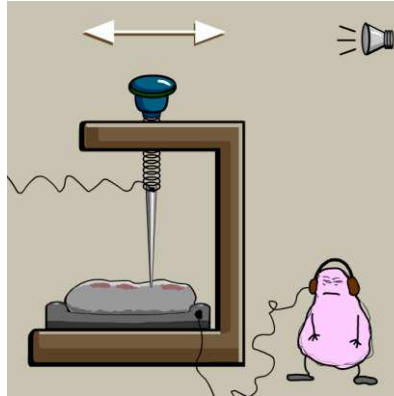
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/03-monkeysVIDEO T1.mov>

Transistores bipolares

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/06-sandwich T1.mov>



Dopagem de semicondutores



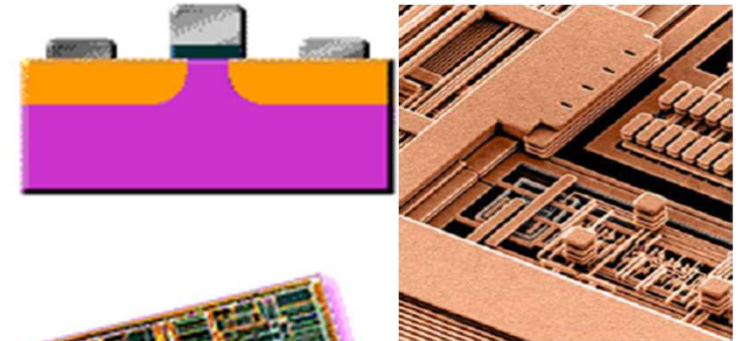
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/crystalBillFinal.swf>

Primeiro transistor



<http://w3.ualg.pt/~jlongras/05-pointcontact T1.mov>

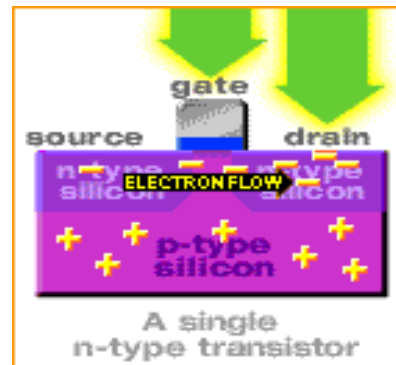
Circuito integrado



<http://w3.ualg.pt/~jlongras/07-traitorous 8 T1.mov>

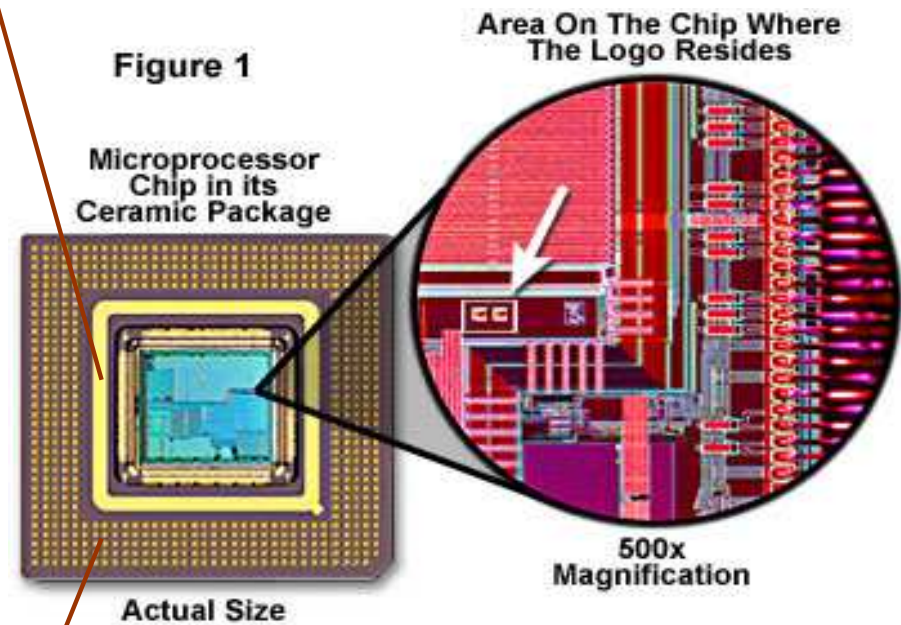
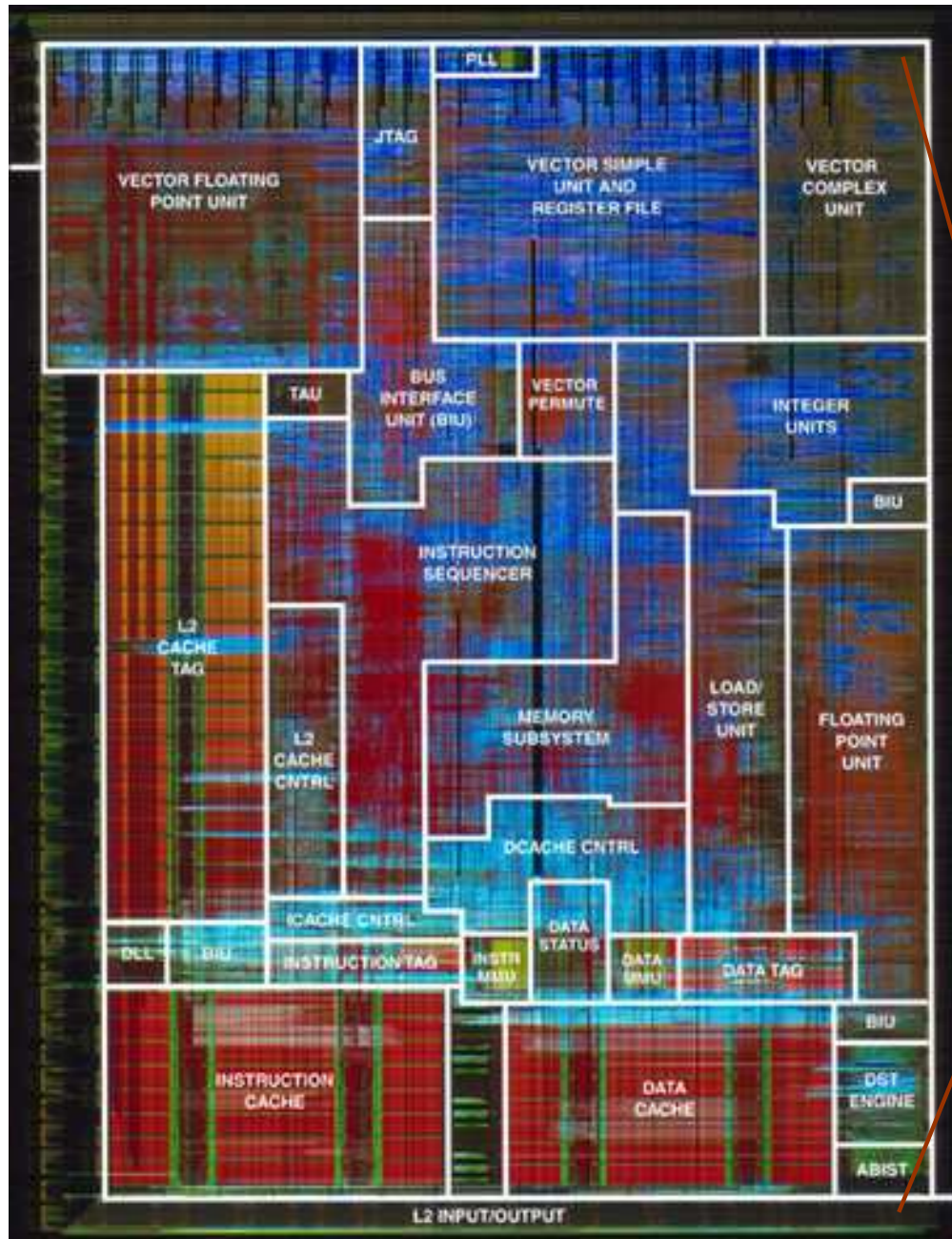
MOSFET

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/mosfet.mov>



<http://w3.ualg.pt/~jlongras/01-fieldeffectVIDEO T1.mov>

Circuitos integrados



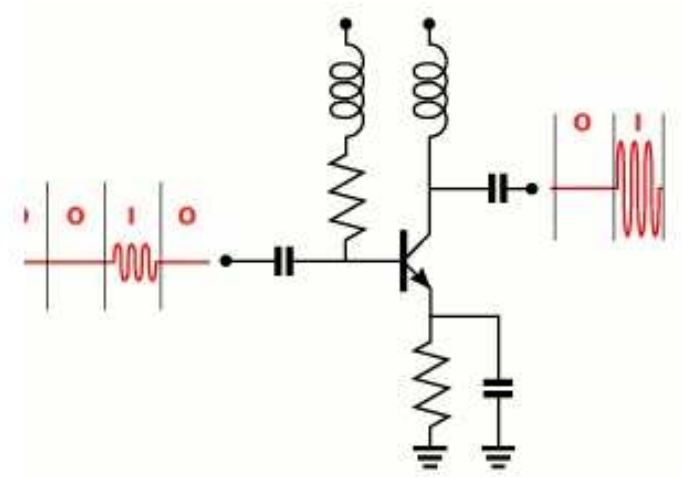
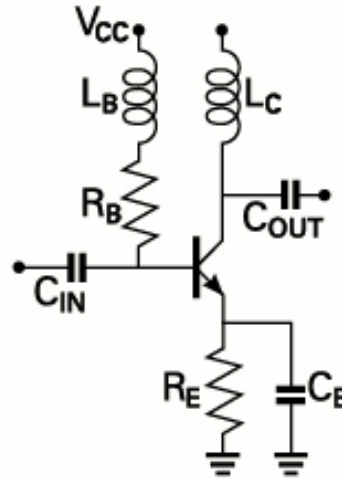
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/mosfet.mov>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/space-shuttle-STS95.avi>

Circuitos com transístores

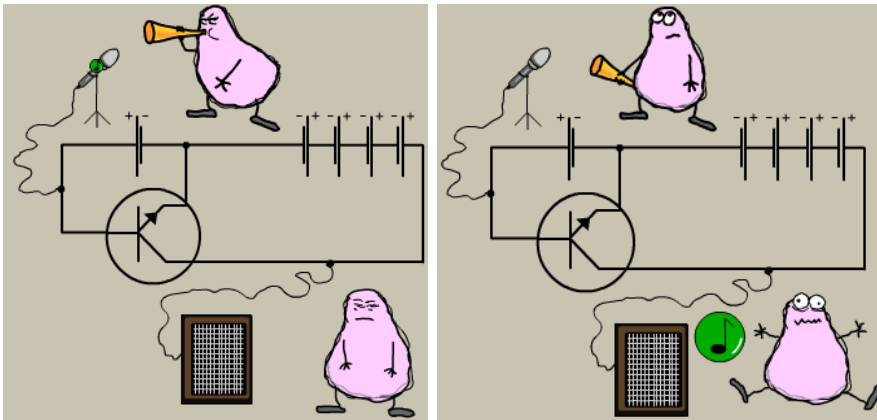


<http://w3.ualg.pt/~jlongras/wireless.mov>



<http://w3.ualg.pt/~jlongras/wireless.mov>

Amplificador

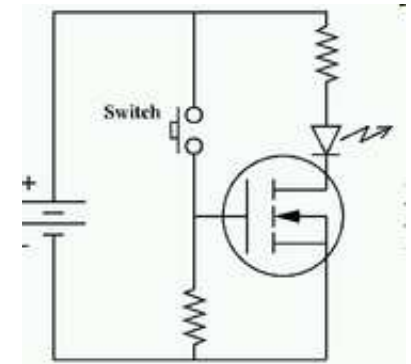
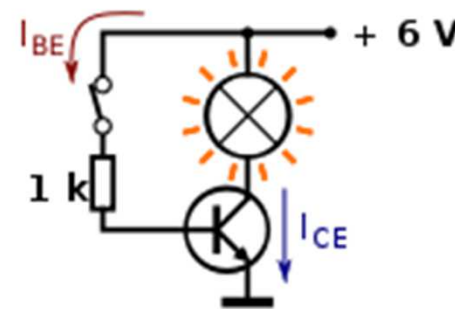


<http://www.youtube.com/watch?v=UfnmF-QmnqQ&feature=fvw>
<http://www.youtube.com/watch?v=G0Se1nc5qgw&feature=channel>
<http://www.youtube.com/watch?v=duzO0YX4WnA&feature=channel>
<http://www.youtube.com/watch?v=VI5GCsZCgeo&feature=channel>

IBM DNA Transistor

<http://www.youtube.com/watch?v=pKi30ai35mU&feature=related>
http://www.youtube.com/watch?v=wwclP3GySUY&feature=player_embedded

Interruptor



<http://www.youtube.com/watch?v=cbHMSFkP8nM&feature=related>

<http://www.youtube.com/watch?v=XENTuii2PzM&feature=related>

<http://www.youtube.com/watch?v=ZaBLiciesOU>
http://www.youtube.com/watch?v=loMz_lFpx4&feature=related
http://www.youtube.com/watch?v=vdEG_5zlsks&feature=related

2011-2012

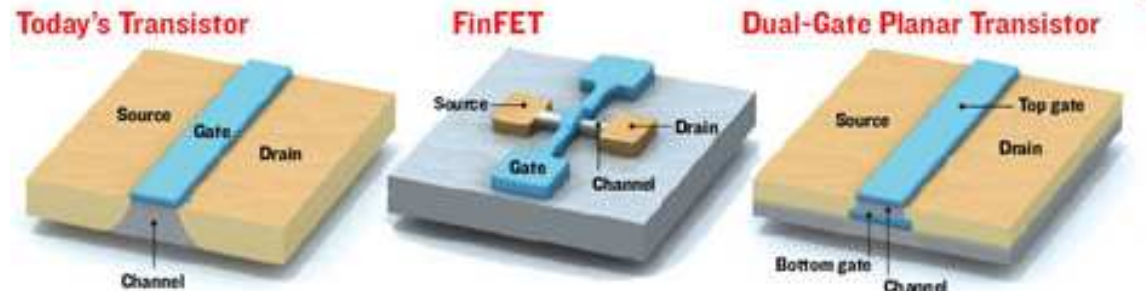
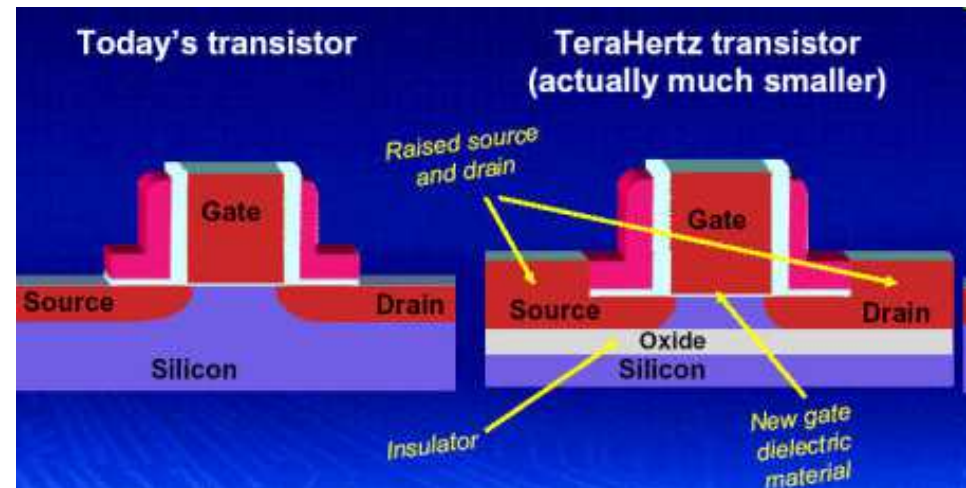
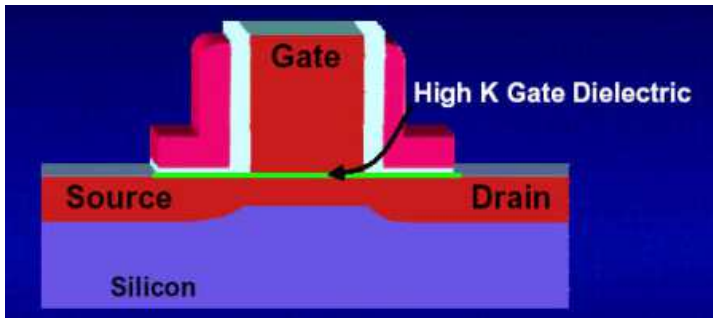
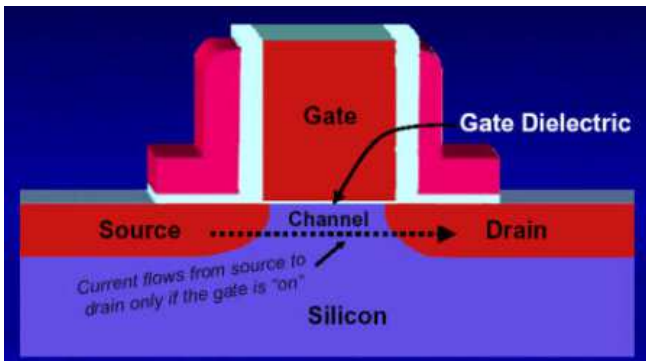
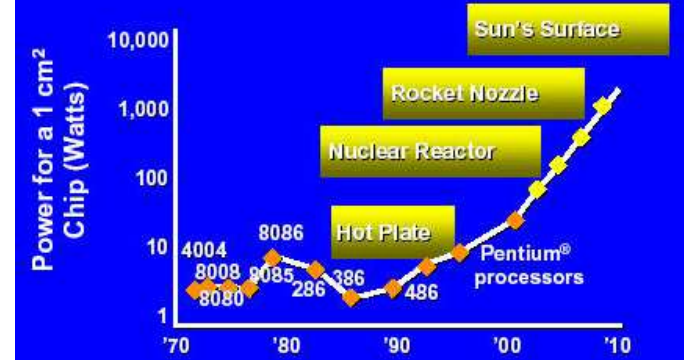
<http://connectedsocialmedia.com/2480/whats-a-transistor-meet-haf-the-smallinator/> 356

Transistor MOSFET

Moore's Law Redefined

Process Name	P856	P858	Px60	P1262	P1264	P1266	P1268
1 st Production	1997	1999	2001	2003	2005	2007	2009
Lithography	.25μm	.18μm	.13μm	90nm	65nm	45nm	32nm
Gate Length	.20μm	.13μm	<70nm	<50nm	<35nm	<25nm	<18nm
Wafer Size (mm)	200	200	200/300	300	300	300	300

Power Extrapolation



<http://www.spectrum.ieee.org/semiconductors/design/transistors-go-vertical>

Electrónicas do futuro

Os transístores actuais já começam a ter sua velocidade limitada pela excessiva geração de calor nos chips, que acontece principalmente em razão dos electrões que "vazam" da estrutura dos transístores. Os avanços tecnológicos continuam, inclusive com [transístores capazes de funcionar com um único electrão](#).

Ballistic transistor

From Wikipedia, the free encyclopedia Jump to: [navigation](#), [search](#)

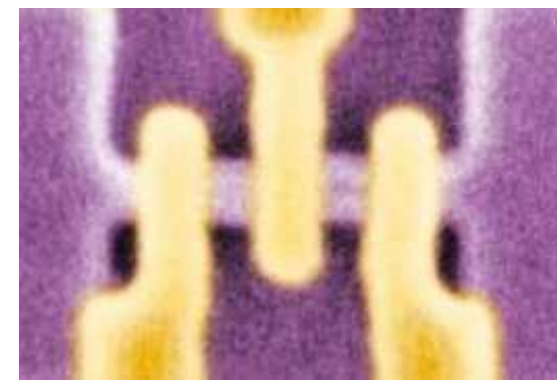
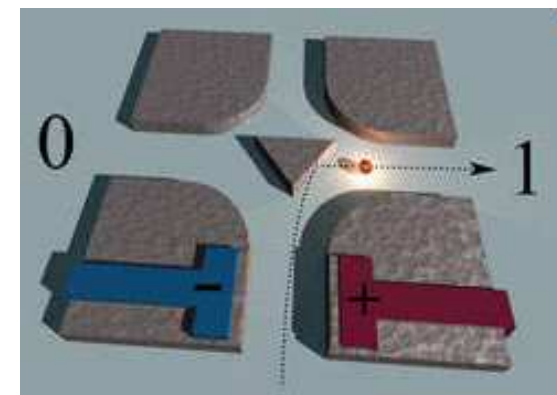
A Ballistic Deflection Transistor is an electronic device being developed for high-speed [ICs](#). Instead of switching the flow of several electrons using gates, as it is done in [FETs](#), it tries to manipulate the course of single electrons using EM forces. These free flowing electrons are forced around a wedge-shaped obstacle to in one direction or another, corresponding to a logical '1' or '0'. The advantages are a smaller size, less noise, less needed power and higher speeds (up to the terahertz region). At the moment it is a concept, although a research prototype has been created. This is a technique currently being investigated by the [University of Rochester](#)

<http://www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=010110060818>

<http://www.rochester.edu/news/show.php?id=2585>

2011-2012

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/BallisticMovie.wmv>



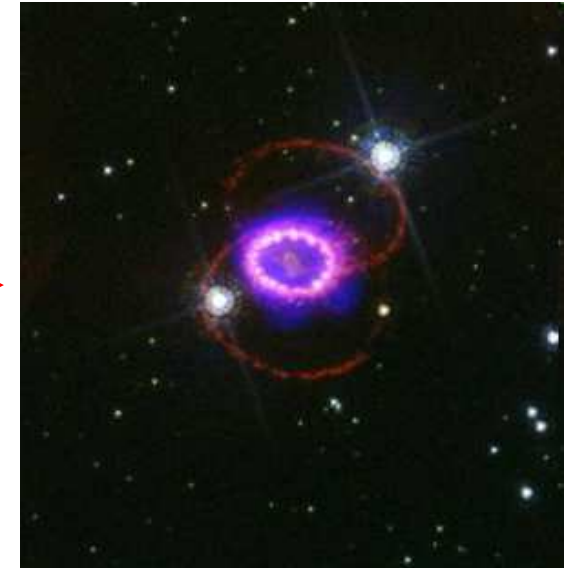
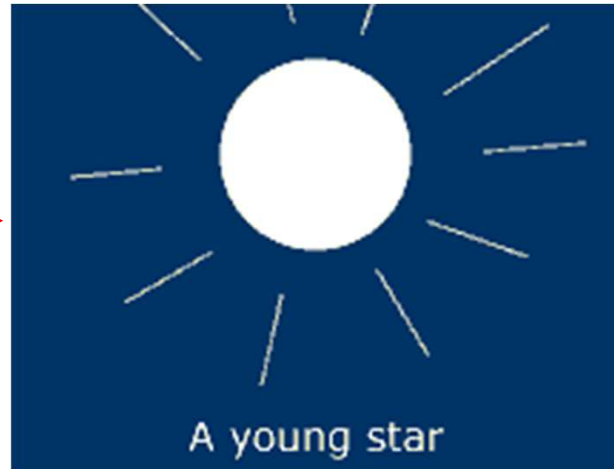
Física nuclear

Prof. MARCELO POLACHINI
Quimicatu@l.com.br - todos os direitos reservados

¹ De acordo com a última deliberação da Comissão de Massas Mômicas e Abundâncias Isotópicas da IUPAC, durante a 40ª Reunião Geral da IUPAC em Berlim, Alemanha (Agosto de 1999).

Onde são produzidos os elementos?

Star formation



http://en.wikipedia.org/wiki/Orion_Nebula

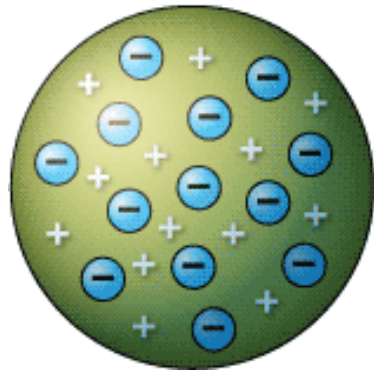
“A supernova [SN 1987A](#), ocorrida na [galáxia satélite](#) da [Via Láctea](#) chamada [Grande Nuvem de Magalhães](#), foi a explosão estelar recente mais próxima da [Terra](#), de modo que pôde ser estudada com equipamentos modernos.”

<http://pt.wikipedia.org/wiki/Supernova>

<http://astrophysics.gsfc.nasa.gov/conferences/supernova1987a/>

Supernova 1987A was visible to the naked eye, and is the brightest known supernova in almost 400 years. It occurred in the Large Magellanic Cloud, a dwarf galaxy only 160,000 light-years from Earth.

Revisão: Modelos do átomo e experiência de Rutherford

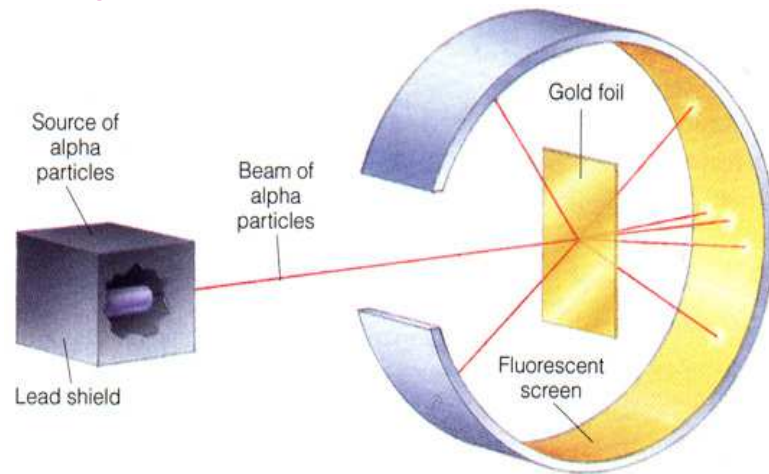


Modelo de Thomson - Hipóteses de Thomson (1897):

- Os raios catódicos são partículas com carga negativa
- Estas partículas são constituintes dos átomos
- Estes corpúsculos são os únicos constituintes dos átomos.

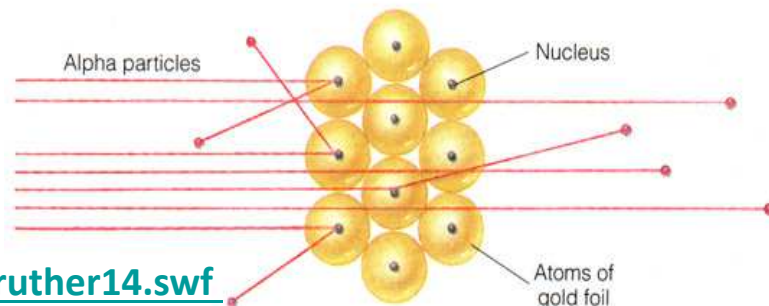
(Para Thomson a carga positiva do átomo não “tinha massa”.)

Experiência de Rutherford, Geiger e Marsden, 1909, 1911-1913



O espalhamento de electrões pelo núcleo permite obter informação sobre a sua dimensão e distribuição de carga (o electrão é uma partícula *pontual*, podendo penetrar no núcleo)

- Hofstadter, R., et al., Phys. Rev. 92, 978 (1953).



$$r_{\text{nucl}} = r_0 \sqrt[3]{A},$$

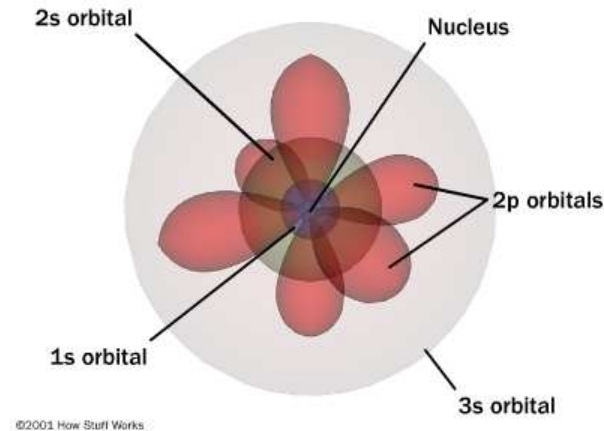
$$r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m},$$

$A \equiv$ número de massa

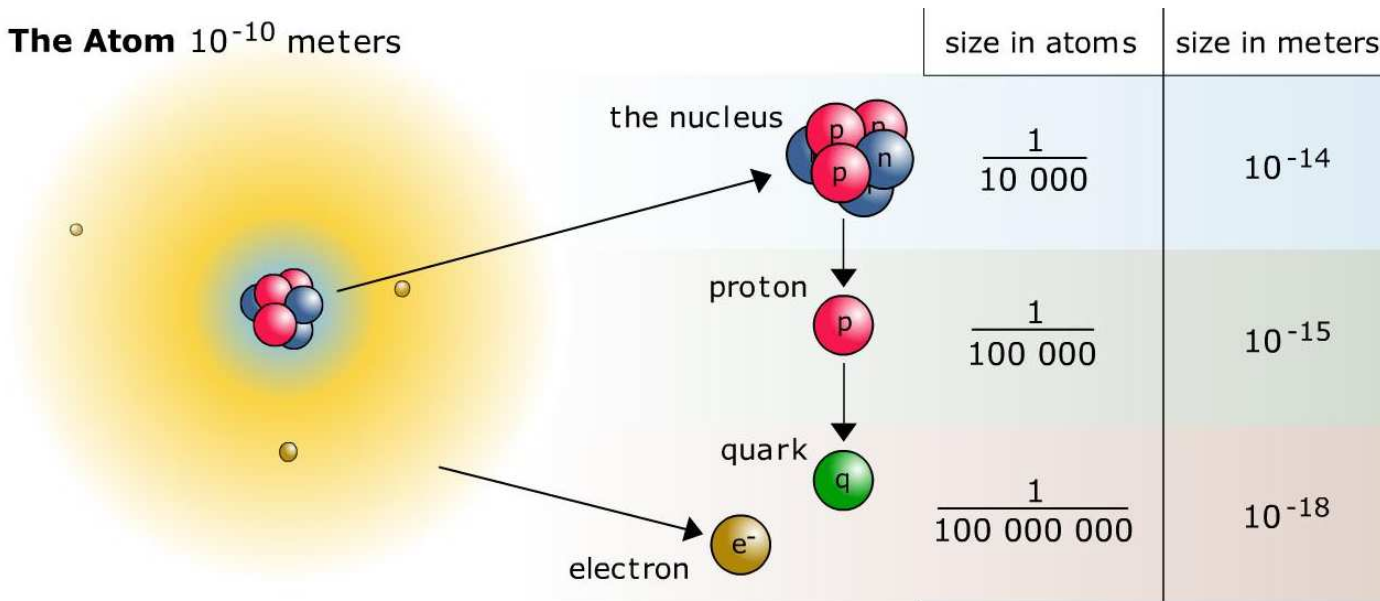
$=$ n° de prótons + n° de neutrões

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/ruther14.swf>

Modelo *actual* do átomo



The Atom 10^{-10} meters



[atomo.swf](http://w3.ualg.pt/~jlongras/atomo.swf)

$$r_{\text{nucl}} = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m}, \quad A \equiv \text{número de massa} = n^\circ \text{ p} + n^\circ \text{ n}$$

Propriedades do núcleo

Núcleo: esfera de raio $r_{\text{nuc}} = r_0 \sqrt[3]{A}$,

$r_0 = 1,2 \times 10^{-15}$ m, $A \equiv$ número de massa (nº de prótons+nº de neutrões),

massa do núcleo: $m_{\text{nuc}} \approx A \cdot u$, $1 u = 1.66 \times 10^{-27}$ kg

Table 43.1 Compositions of Some Common Nuclides

Nucleus	Mass Number (Total Number of Nucleons), A	Atomic Number (Number of Protons), Z	Neutron Number, $N = A - Z$
^1_1H	1	1	0
^2_1D	2	1	1
^4_2He	4	2	2
^6_3Li	6	3	3
^7_3Li	7	3	4
^9_4Be	9	4	5
$^{10}_5\text{B}$	10	5	5
$^{11}_5\text{B}$	11	5	6
$^{12}_6\text{C}$	12	6	6
$^{13}_6\text{C}$	13	6	7
$^{14}_7\text{N}$	14	7	7
$^{16}_8\text{O}$	16	8	8
$^{23}_{11}\text{Na}$	23	11	12
$^{65}_{29}\text{Cu}$	65	29	36
$^{200}_{80}\text{Hg}$	200	80	120
$^{235}_{92}\text{U}$	235	92	143
$^{238}_{92}\text{U}$	238	92	146

Nuclídeo: termo genérico para indicar qualquer espécie nuclear, caracterizada essencialmente pelo número de prótons e neutrões que possui.

Isótopo: átomos que têm o mesmo número atómico (mesma carga nuclear ou igual número de prótons no núcleo, e que, portanto, constituem o mesmo elemento), mas diferem no número de massa, e que têm propriedades químicas quase idênticas e diferentes propriedades físicas (temperaturas de fusão e de ebulição). (Do gr. ísos, «igual»+tópos, «lugar»)

Propriedades do núcleo

Esfera de raio $r_{\text{nuc}} = r_0 \sqrt[3]{A}$, $r_0 = 1,2 \times 10^{-15}$ m,

$A \equiv$ número de massa (nº de prótons+nº de neutrões),

Table 43.2 Neutral Atomic Masses for Some Light Nuclides

Element and Isotope	Atomic Number, Z	Neutron Number, N	Atomic Mass (u)	Mass Number, A
Hydrogen (^1_1H)	1	0	1.007825	1
Deuterium (^2_1H)	1	1	2.014102	2
Tritium (^3_1H)	1	2	3.016049	3
Helium (^3_2He)	2	1	3.016029	3
Helium (^4_2He)	2	2	4.002603	4
Lithium (^6_3Li)	3	3	6.015122	6
Lithium (^7_3Li)	3	4	7.016004	7
Beryllium (^9_4Be)	4	5	9.012182	9
Boron ($^{10}_5\text{B}$)	5	5	10.012937	10
Boron ($^{11}_5\text{B}$)	5	6	11.009305	11
Carbon ($^{12}_6\text{C}$)	6	6	12.000000	12
Carbon ($^{13}_6\text{C}$)	6	7	13.003355	13
Nitrogen ($^{14}_7\text{N}$)	7	7	14.003074	14
Nitrogen ($^{15}_7\text{N}$)	7	8	15.000109	15
Oxygen ($^{16}_8\text{O}$)	8	8	15.994915	16
Oxygen ($^{17}_8\text{O}$)	8	9	16.999132	17
Oxygen ($^{18}_8\text{O}$)	8	10	17.999160	18

Source: A. H. Wapstra and G. Audi, *Nuclear Physics A595*, 4 (1995).

massa do núcleo:

$$m_{\text{nuc}} \approx A \cdot u,$$

$$1 \text{ u} = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg},$$

Densidade do núcleo

$$\rho_{\text{nuc}} = \frac{m_{\text{nuc}}}{V_{\text{nuc}}}$$

$$\approx 2,3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$$

Força nucleares

Força nucleares: forças de origem não-electrostática que se exercem entre os nucleões (protões e neutrões) e asseguram a coesão do núcleo atómico; são forças de curto alcance – limitadas às dimensões do núcleo.

Acredita-se que a interacção nuclear seja um vestígio da chamada de força forte. Esta une os quarks em grupos de três, formando assim os neutrões e os protões.

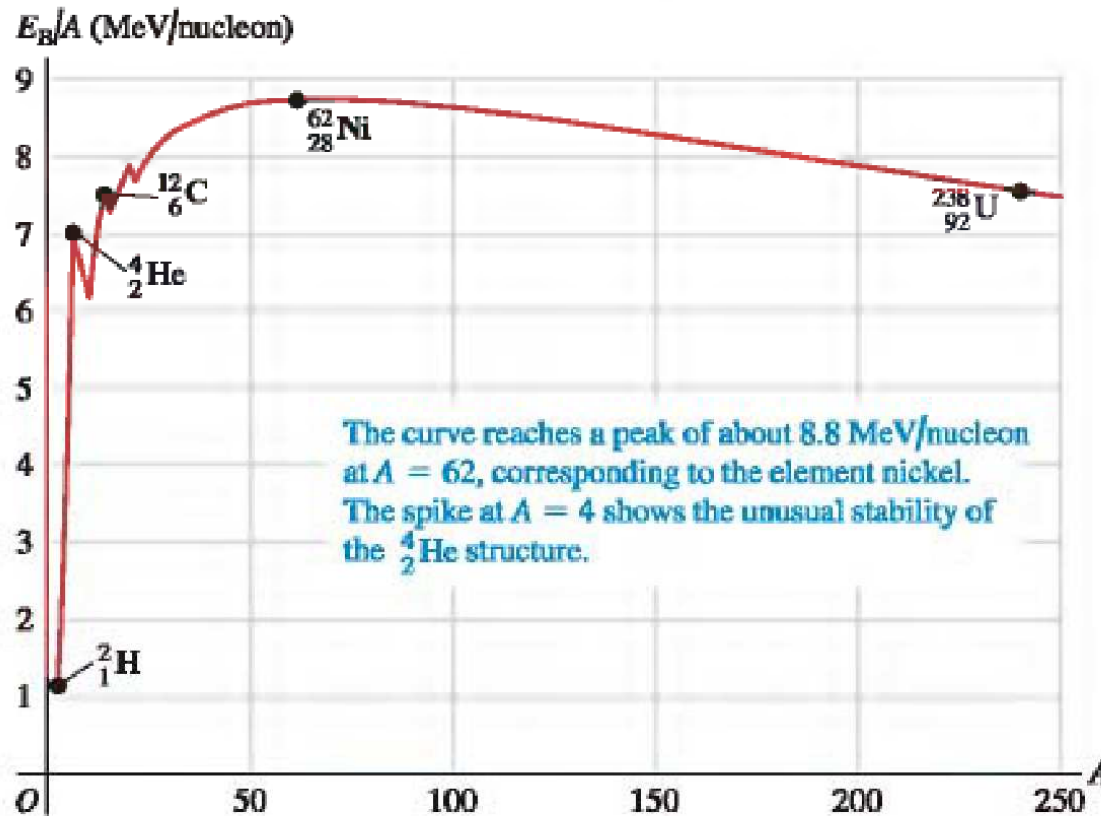
A interacção nuclear forte tem magnitude tão grande que supera o efeito contrário da força electromagnética, chamada também de força coulombiana, de carácter repulsivo, entre os protões.

O seu alcance é da ordem de 10^{-15} m, isto é, restringe-se apenas ao núcleo atómico, e é independente da carga eléctrica actuando igualmente entre os protões, neutrões ou entre protões e neutrões.

A energia necessária para retirar todos os nucleões que constituem um núcleo atómico, transformando-os assim em nucleões livres, designa-se por energia de ligação nuclear e o seu valor é uma medida da estabilidade do núcleo em causa. Quanto maior mais estável é o núcleo.

Energia de ligação e *massa* de residual

A energia necessária para retirar todos os nucleões que constituem um núcleo atómico, transformando-os assim em nucleões livres, designa-se por energia de ligação nuclear e o seu valor é uma medida da estabilidade do núcleo em causa. Quanto maior mais estável é o núcleo.



43.2 Approximate binding energy per nucleon as a function of mass number A (the total number of nucleons) for stable nuclides.

Energia de ligação:

$$E_B = \left(Z \cdot M_{1\text{H}} + N \cdot m_n - {}^A_Z M \right) c^2$$

Massa residual: $\Delta m = \frac{E_B}{c^2},$

Energia de ligação por nucleão: $E_{B/N} = \frac{E_B}{A}$

$$(E = \Delta m \cdot c^2)$$

Exercícios sobre energia de ligação, *massa* de residual, etc.

Quantos prótons e quantos neutrões tem o núcleo do isótopo mais comum de (i) silício, $^{28}_{14}\text{Si}$; (ii) rubídio, $^{85}_{37}\text{Rb}$; (iii) tálio, $^{205}_{81}\text{Tl}$.

(Res: 14 p e 14 n; 37 p e 48 n; 81 p e 124 n.)

Considere os núcleos do problema anterior.

- Estime o raio, a área da superfície e o volume de cada núcleo.
- Determine a densidade (em kg/m^3) e a densidade de nucleões (em nucleões por m^3) para cada núcleo.

(Res: 3,6 fm, $1.67 \times 10^{-28} \text{ m}^2$, $2.03 \times 10^{-43} \text{ m}^3$; 5,28 fm, $3.5 \times 10^{-28} \text{ m}^2$, $6.15 \times 10^{-43} \text{ m}^3$; 7,1 fm, $6.29 \times 10^{-28} \text{ m}^2$, $14.8 \times 10^{-43} \text{ m}^3$)

O isótopo mais comum de urânio $^{238}_{92}\text{U}$, tem massa atômica igual a $238.050783u$. Calcule (i) o defeito de massa; (ii) a energia de ligação (em MeV); (iii) a energia de ligação por nucleão.

(Res: $92m_p + (238-92)m_n - m_{^{238}_{92}\text{U}} = \Delta m = 1,8837u$; $\Delta mc^2 = 2.81 \times 10^{-10} \text{ J} - 1,76 \text{ GeV}$; $\Delta mc^2/(p+n) = 7.4 \text{ MeV}$.)

Radiactividade/Radioactividade

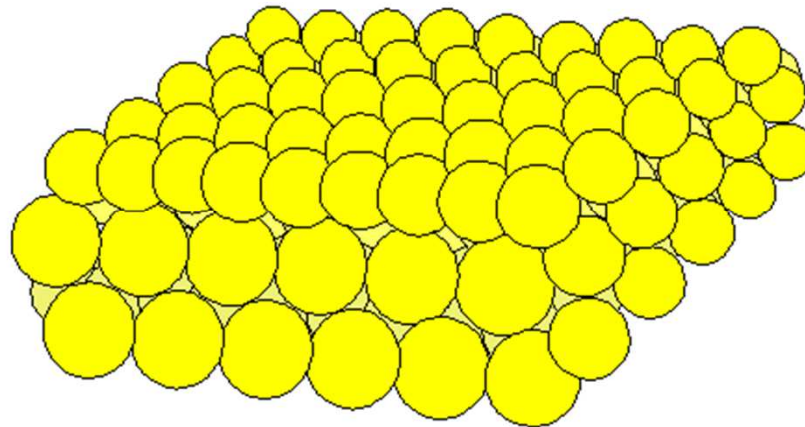
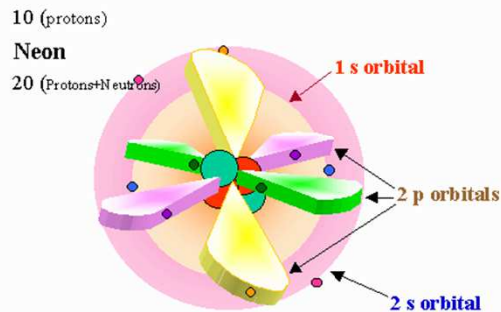
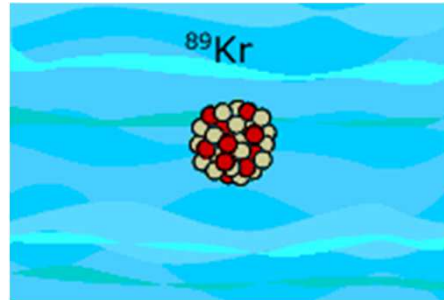
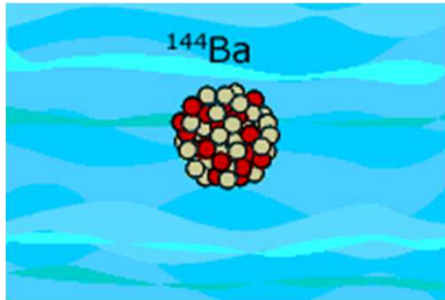
s. f. (fís., quím.) desintegração espontânea efectuada por núcleos atómicos instáveis que se transformam em núcleos mais estáveis, geralmente acompanhados de emissão de partículas alfa ou beta e de raios gama;

Radioactividade

Transmutação dos elementos: (fís.) transformação, natural ou provocada, de um átomo de um elemento num átomo de outro elemento, por variação do número de prótons nucleares. (Alquimia: transmutação de metais inferiores em ouro.)

Radioactividade: desintegração espontânea efectuada por núcleos atómicos instáveis que se transformam em núcleos mais estáveis, geralmente acompanhados de emissão de partículas alfa ou beta e de raios gama;

ciencias.ulisboa.pt/~jmfigueiredo/)



<http://w3.ualg.pt/~jlongras/particulasalfa.wmv>

2011-2012

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/Transmut.swf>

Radioactividade natural

43.7 Earthquakes are caused in part by the radioactive decay of ^{238}U in the earth's interior. These decays release energy that helps to produce convection currents in the earth's interior. Such currents drive the motions of the earth's crust, including the sudden sharp motions that we call earthquakes (like the one that caused this damage).



Ver rádón.

O estudo da radioactividade natural começou com Henri Becquerel, que descobriu, em 1896, que os sais de urânio emitiam uma radiação similar aos raios x.

Marie e Pierre Curie, Ernest Rutherford e outros mostraram que esta radiação podia consistir de partículas materiais carregadas positiva e negativamente e de fotões: estes tipos de radiação foram designados pelos nomes **alfa**, **beta** e **gama**.

O carbono 14 e o potássio 40 são exemplos de núclídeos radioactivos.

http://w3.ualg.pt/~jlongras/what_is_radon1.swf

Contador Geiger

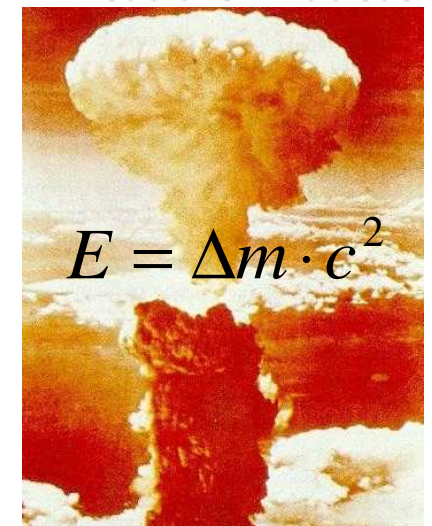
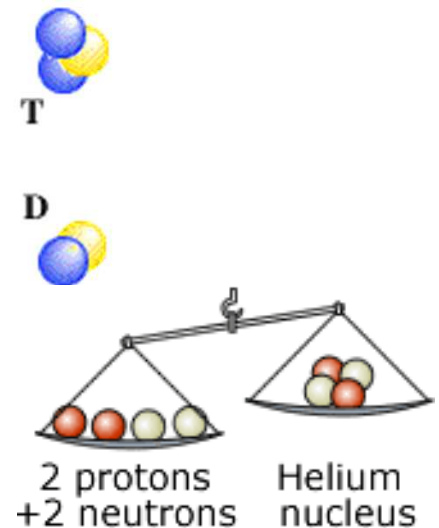
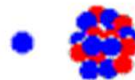
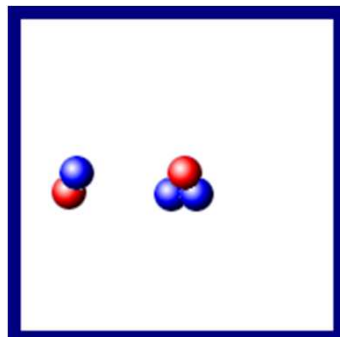
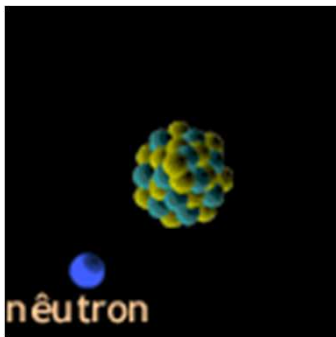
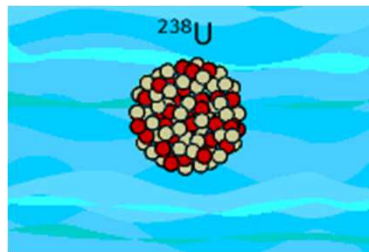
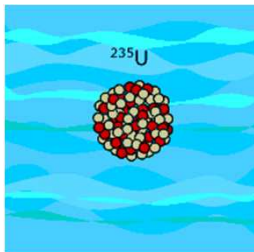


http://en.wikipedia.org/wiki/Geiger_counter

O contador Geiger (ou contador Geiger-Müller ou contador G-M) serve para medir certas radiações ionizantes (partículas alfa, beta ou radiação gama e raios-X, mas não os neutrões). Este instrumento de medida, cujo princípio foi imaginado por volta de 1913 por Hans Geiger, foi aperfeiçoado por Geiger e Walther Müller em 1928.

Radioactividade artificial

Produz-se a radioactividade induzida quando se bombardeiam certos núcleos com partículas apropriadas. Se a energia destas partículas tem um valor adequado, elas penetram no núcleo bombardeado formando um novo núcleo que, no caso de ser instável, se desintegra posteriormente. Foi descoberta pelo casal “Joliot-Curie” (Frédéric Joliot e Irène Joliot-Curie), bombardeando núcleos de boro e alumínio com partículas alfa.



NUCLEAR TELEFISSION

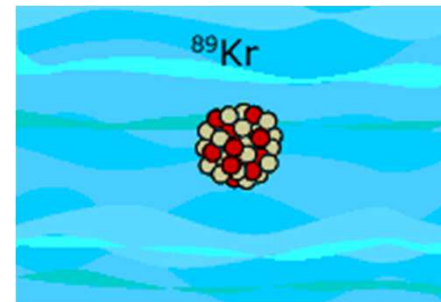
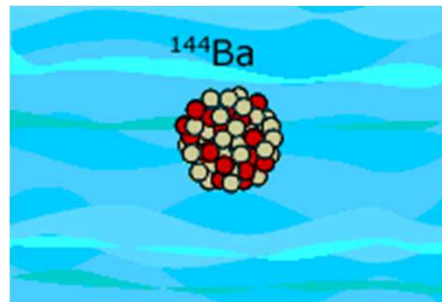
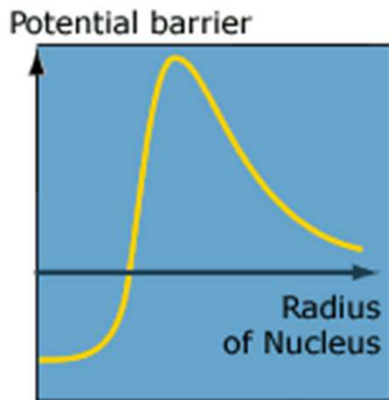
By: Tom Diab
Science Department
Saline High School

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/neutroa.wmv>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/particulasalfa.wmv>

Decaimentos alfa, beta e gama

As radiações emitidas pelas substâncias radioativas são principalmente partículas alfa, partículas beta e raios gama. A radioactividade é uma forma de energia nuclear, usada em medicina (radioterapia), e consiste no fato de alguns átomos como os do urânio, rádio e tório serem “instáveis”, perdendo constantemente partículas alfa, beta e gama (raios-X). Num decaimento radioactivo podem ocorrer simultaneamente emissão de partículas alfa e de raios gama, por exemplo.



Profundidade de penetração

Beta Than The Rest: C-14
Radioactive Decay

By: Tom Diab
Science Department
Saline High School



papel

madeira

chumbo

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/Transmut.swf>

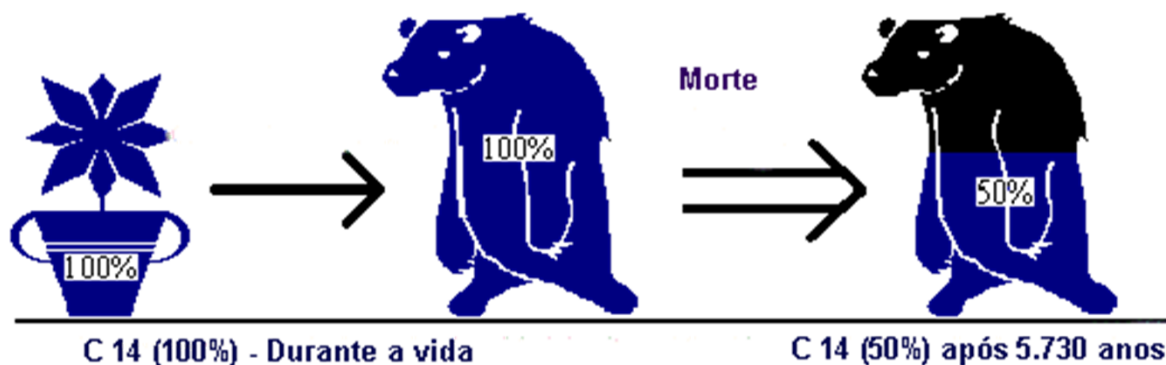
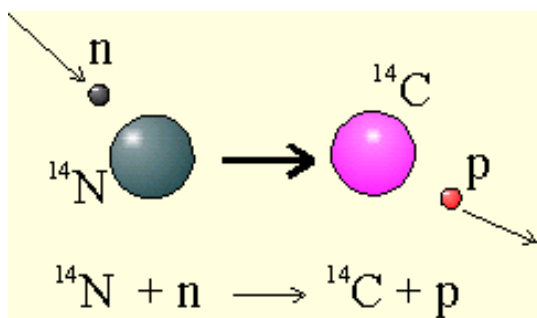
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/radioa7.swf>

Datação radioactiva

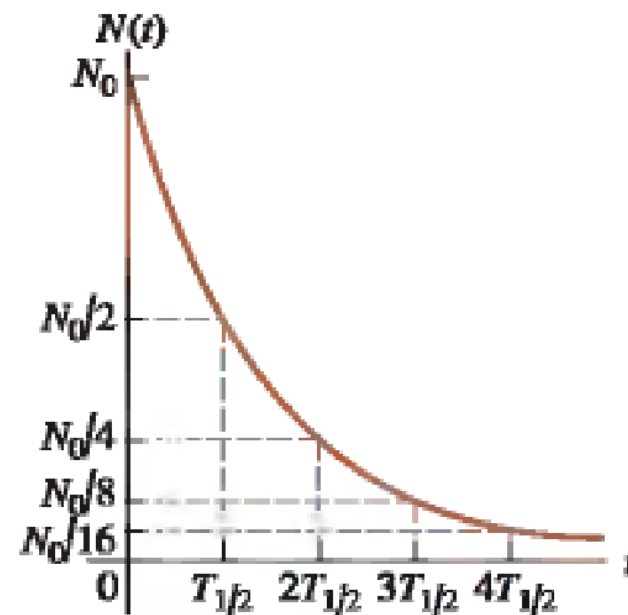
Decaimento radioactivo

Transmutação dos elementos: (fís.) transformação, natural ou provocada, de um átomo de um elemento num átomo de outro elemento, por variação do número de prótons nucleares. (Alquimia: transmutação de metais inferiores em ouro.)

Radioactividade: desintegração espontânea efectuada por núcleos atómicos instáveis que se transformam em núcleos mais estáveis, geralmente acompanhados de emissão de partículas alfa ou beta e de raios gama.



43.9 The number of nuclei in a sample of a radioactive element as a function of time. The sample's activity has an exponential decay curve with the same shape.



Taxas de decaimento radioactivo

O decaimento radioactivo é um processo estatístico. Não há forma de prever se um átomo (núcleo) particular vai decair ou não. A alteração do ambiente que rodeia o núcleo não altera de forma significativa a maioria das taxas de decaimento.

Seja $N(t)$ o número de núcleos radioactivos de uma amostra no instante t ; se $-dN(t)$ for a diminuição deste número durante um curto intervalo dt , isto é, o número de decaimentos durante o intervalo dt , a taxa de decaimento ou actividade da espécie é igual a $-dN(t)/dt$.

Quanto maior for o número de núclídeos na amostra maior é a taxa de decaimento, i.e., a actividade é proporcional a $N(t)$:

$$-\frac{dN(t)}{dt} = \lambda N(t), \text{ onde } \lambda \text{ é a constante de decaimento da espécie (núclídeo em questão),}$$

que pode ser interpretada como a probabilidade por unidade de tempo de um núclídeo decair.

Após o tempo t ainda não decaíram: $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$, onde N_0 representa o número de núclídeos em $t = 0$ s.

A unidade SI de decaimento é o becquerel (Bq), 1 Bq= 1 decaimento por segundo.

1 curie (Ci) = 3.70×10^{10} Bq.

Tempo de meia vida e tempo médio de vida

O decaimento radioativos é um processo estatístico. Não há forma de prever se um átomo (núcleo) particular vai decair ou não. A alteração do ambiente que rodeia o núcleo não altera de forma significativa a maioria das taxas de decaimento.

Após o tempo t ainda não decaíram: $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$.

O tempo de meia vida $T_{1/2}$ é o tempo necessário para que o número de núclídeos que ainda não decaíram passe a metade:

$$N(t = T_{1/2}) / N_0 = \frac{1}{2} \Leftrightarrow T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

O tempo médio de vida T_{med} é geralmente chamado tempo de vida de um núclídeo ou de uma partícula instável e está relacionado com o tempo de meia vida da forma:

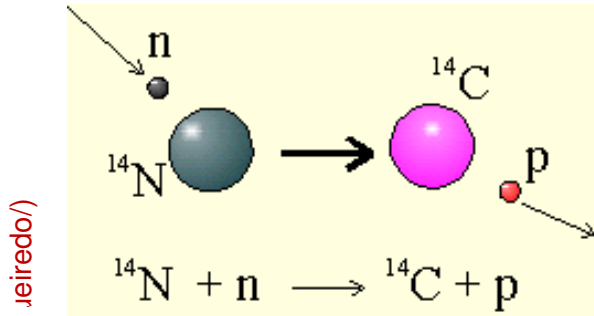
$$T_{\text{med}} = \frac{1}{\lambda} = \frac{T_{1/2}}{\ln 2} \approx \frac{T_{1/2}}{0.693}.$$

A unidade SI de decaimento é o becquerel (Bq), 1 Bq= 1 decaimento por segundo:

1 curie (Ci) = 3.70×10^{10} Bq.

Formação e decaimento do carbono 14

O carbono 14 forma-se nas camadas superiores da [atmosfera](#) onde os átomos de [nitrogênio](#)-14 são bombardeados por neutrões contidos nos raios cósmicos:



Entre os cinco isótopos instáveis do carbono, o carbono-14 é aquele que apresenta a maior [meia-vida](#), que é de aproximadamente 5730 anos.

Desintegração do carbono 14

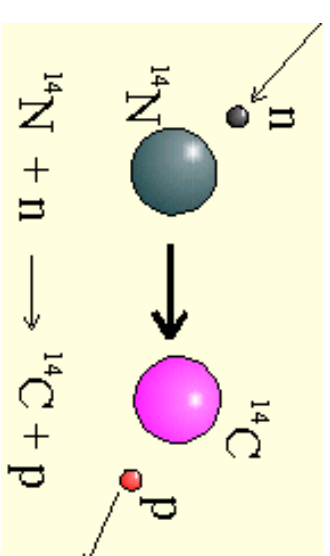
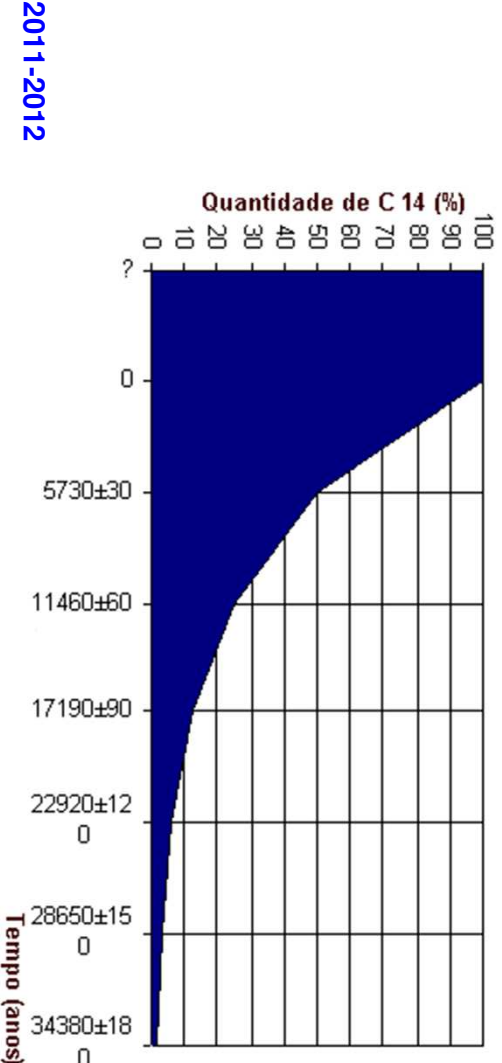
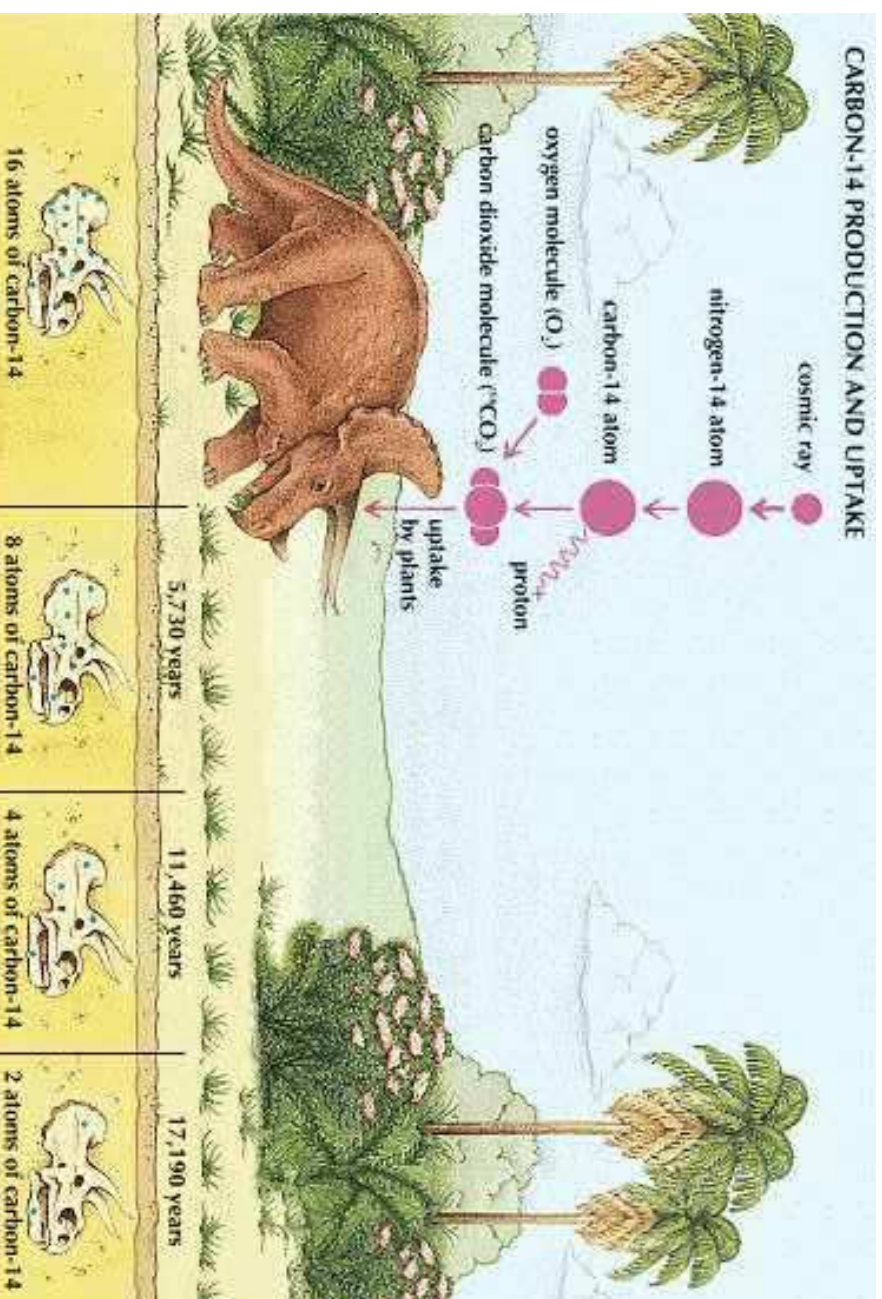
Beta Than The Rest: C-14 Radioactive Deay

**By: Tom Diab
Science Department
Saline High School**

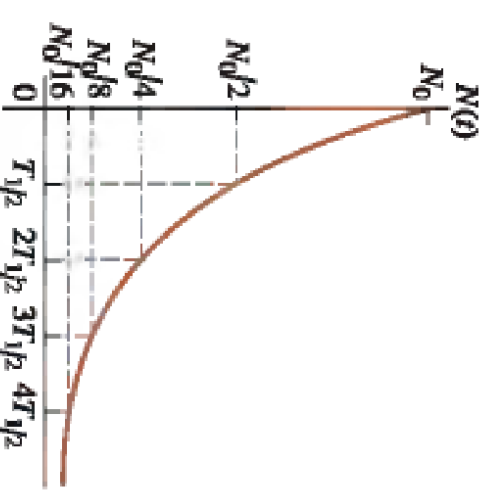
Como a desintegração ocorre num período de [meia-vida](#) de 5730 anos é possível fazer a [datação radiométrica](#) de objectos ou materiais [arqueológicos](#) com idades dentro desta ordem de grandeza.

O método da datação por carbono 14 não é, por isso, adequado à datação de [fósseis](#) que têm idades na casa dos milhões de anos e que são datados por métodos [estratigráficos](#) e por decaimento de outros elementos radioactivos.

Datação radioactiva



43.9 The number of nuclei in a sample of a radioactive element as a function of time. The sample's activity has an exponential decay curve with the same shape.



Datação por radiocarbono

Example 43.9 Radiocarbon dating

Before 1900 the activity per unit mass of atmospheric carbon due to the presence of ^{14}C averaged about 0.255 Bq per gram of carbon. (a) What fraction of carbon atoms were ^{14}C ? (b) In analyzing an archaeological specimen containing 500 mg of carbon, you observe 174 decays in one hour. What is the age of the specimen, assuming that its activity per unit mass of carbon when it died was that average value of the air?

SOLUTION

IDENTIFY: The key idea is that the present-day activity of a biological sample containing ^{14}C is related to both the elapsed time since it stopped taking in atmospheric carbon and its activity at that time.

SET UP: In part (a) we determine the number of ^{14}C atoms $N(t)$ from the activity $-dN(t)/dt$ using Eq. (43.16). We find the total number of carbon atoms in 500 mg by using the molar mass of carbon (12.011 g/mol , given in Appendix D), and we use the result to calculate the fraction of carbon atoms that are ^{14}C . The activity decays at the same rate as the number of ^{14}C nuclei; we use this fact in conjunction with Eq. (43.17) to solve for the age t of the specimen.

EXECUTE: (a) To use Eq. (43.16), we must first find λ from Eq. (43.18):

$$T_{1/2} = 5730\text{ y} = (5730\text{ y})(3.156 \times 10^7\text{ s/y}) = 1.808 \times 10^{11}\text{ s}$$

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{0.693}{1.808 \times 10^{11}\text{ s}} = 3.83 \times 10^{-12}\text{ s}^{-1}$$

Alternatively,

$$\lambda = \frac{0.693}{5730\text{ y}} = 1.209 \times 10^{-4}\text{ y}^{-1}$$

Then, from Eq. (43.16),

$$N(t) = \frac{-dN/dt}{\lambda} = \frac{0.255\text{ s}^{-1}}{3.83 \times 10^{-12}\text{ s}^{-1}} = 6.66 \times 10^{10}\text{ atoms}$$

The total number of C atoms in one gram ($1/12.011\text{ mol}$) is $(1/12.011)(6.022 \times 10^{23}) = 5.01 \times 10^{22}$. The ratio of ^{14}C atoms to all C atoms is

$$\frac{6.66 \times 10^{10}}{5.01 \times 10^{22}} = 1.33 \times 10^{-12}$$

Only four carbon atoms in every 3 million million are ^{14}C .

(b) Assuming that the activity per gram of carbon in the specimen when it died was $0.255\text{ Bq/g} = (0.255\text{ s}^{-1} \cdot \text{g}^{-1})(3600\text{ s/h}) = 918\text{ h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$, the activity of 500 mg of carbon then was $(0.500\text{ g}) \times (918\text{ h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}) = 459\text{ h}^{-1}$. The observed activity now, at time t later, is 174 h^{-1} . Since the activity is proportional to the number of radioactive nuclei, the activity ratio $174/459 = 0.379$ equals the number ratio $N(t)/N_0$.

Now we solve Eq. (43.17) for t and insert values for $N(t)/N_0$ and λ :

$$t = \frac{\ln(N(t)/N_0)}{-\lambda} = \frac{\ln 0.379}{-1.209 \times 10^{-4}\text{ y}^{-1}} = 8020\text{ y}$$

EVALUATE: After 8020 y the ^{14}C activity has decreased from 459 to 174 decays per hour. The specimen died and stopped taking CO_2 out of the air about 8000 years ago.

Exercícios sobre datação

A razão entre o ^{14}C e ^{12}C na matéria viva é, actualmente, igual a $1,3 \times 10^{-12}$. O ^{14}C numa amostra de 24 g de carbono proveniente de “matéria viva” decai com uma taxa de decaimento (ou actividade) de 6 Bq (becquerel). Qual será actividade radioactiva do ^{14}C daqui a 11469 anos. (Res: 1,5.)

A razão entre o ^{14}C e o ^{12}C na matéria viva é, actualmente, igual a $1,3 \times 10^{-12}$. O ^{14}C de uma amostra de 24 g de carbono, proveniente de matéria viva, decai actualmente com uma actividade de 3 Bq. Quando é que ocorreu a morte da “matéria viva”? (Res: 11470 anos.)

Efeitos biológicos da radiação ionizante

Efeitos biológicos da Radiação

Em 1896, quatro meses após a descoberta do raio-X por Rontgen, o médico J. Daniels, da Universidade de Vanderbilt, notificou a comunidade científica o primeiro efeito biológico da radiação que foi a queda de cabelo de um de seus colegas, cuja radiologia de crânio havia sido tirada. Em 1899, dois médicos suecos conseguiram curar um tumor de pele na ponta do nariz de um paciente, e em 1903 um médico americano obteve a diminuição do baço de um paciente com leucemia. O uso do raio-X na terapia estava, entretanto, produzindo resultados desagradáveis. Eritema de pele e a seguir ulcerações se desenvolveram nas mãos dos médicos e em alguns casos, câncer dos ossos, como resultado das exposições durante o tratamento dos pacientes. Desde então não só os benefícios trazidos pela radiação mas também seus efeitos danosos têm interessado os cientistas de todo o mundo.

Os estudos dos mecanismos básicos da radiobiologia permitem análises microscópicas do que ocorrem com a passagem da radiação e liberação de energia em volumes muito pequenos como em células ou parte de células. A energia liberada pode produzir ionização e excitação dos átomos e quebra das moléculas e, como consequência, formação de íons e radicais livres altamente reactivos. Estes, por sua vez, podem atacar moléculas de grande importância como a molécula de DNA do núcleo da célula, causando-lhe danos. A destruição de uma molécula de DNA resulta numa célula capaz de continuar vivendo, mas incapaz de se dividir. Assim, a célula acaba morrendo e não sendo renovada. Se isso ocorrer em um número muito grande de células, vai haver um mau funcionamento de tecido constituído por essas células e, por fim, a sua morte. Os efeitos podem ser manifestar a curto prazo ou a longo prazo. (Okumo, Física para Ciências Biológicas e biomédicas)

<http://www.energiatomica.hpg.ig.com.br/Bio.html>

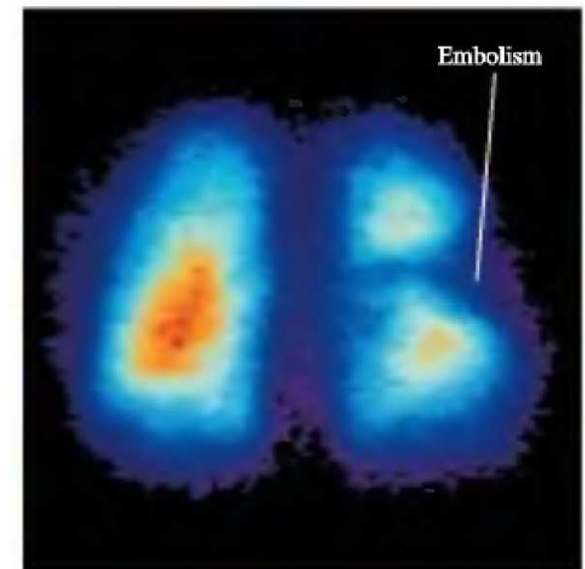
http://www.radiacao.com.br/efeitos_biologicos_da_radiacao.html

Medicina nuclear

Cintigrafia de Perfusão e Ventilação: são duas técnicas que devem ser executadas sempre que possível (frequentemente de emergência). É o principal método de avaliação da grave condição potencialmente mortal que é a [tromboembolia pulmonar](#). A parte de perfusão é uma avaliação do fluxo sanguíneo por todo o [pulmão](#), ou seja, se há obstruções nos vasos, como em casos de tromboembolia pulmonar. Ela é efectuada pela injeção de aglomerados de [albumina](#) marcados com tecnécio-99m no sangue. Qualquer área que não seja irrigada ficará pálida (zona fria) na imagem obtida. A cintigrafia de ventilação indica as áreas do pulmão que ventilam convenientemente. Ela é feita pela inalação de marcadores radioactivos gasosos ou sob a forma de [aerossóis](#), como [isótopos](#) de [gases nobres](#) radioactivos ou microparticulas marcadas com tecnécio ([technegas](#)). O resultado do exame vem da comparação entre as zonas frias (pouco radioactivas) da perfusão e as da ventilação.

Se houver grandes e múltiplas defeitos de perfusão não consonantes com áreas de defeitos de ventilação, é provável o diagnóstico de tromboembolismo pulmonar. De outro modo poderá haver obstrução de um [brônquio](#) ou [bronquíolo](#) (apenas zona fria na ventilação), ou outras condições.

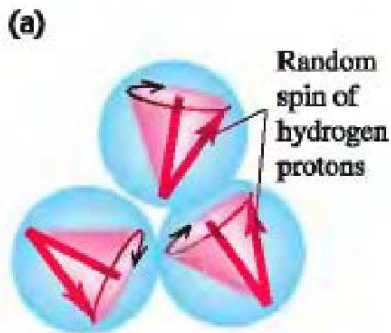
43.11 This colored scintigram shows where a chemical containing radioactive ^{99}Tc was taken up by a patient's lungs. The orange color in the lung on the left indicates strong γ -ray emission by the ^{99}Tc , which shows that the chemical was able to pass into this lung through the blood-stream. The lung on the right shows weaker emission, indicating the presence of an embolism (a blood clot or other obstruction in an artery) that is restricting the flow of blood to this lung.



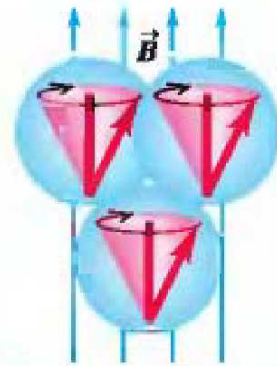
Ressonância magnética nuclear e MRI

43.1 Magnetic resonance imaging (MRI).

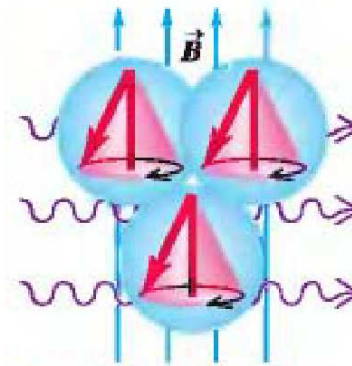
(a)



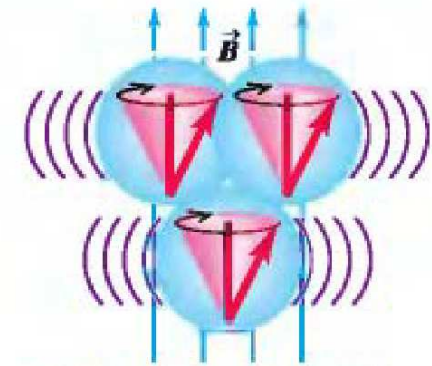
Protons, the nuclei of hydrogen atoms in the tissue under study, normally have random spin orientations.



In the presence of a strong magnetic field, the spins become aligned with a component parallel to $\vec{B}$.

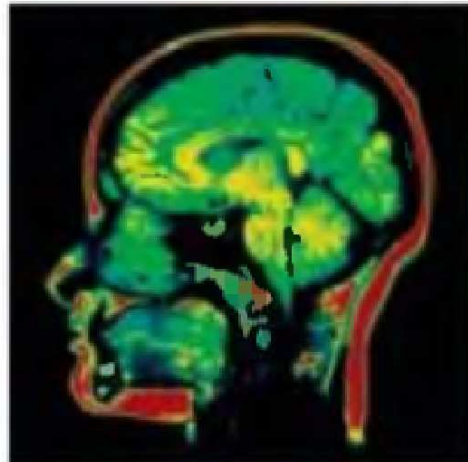


A brief radio signal causes the spins to flip orientation.

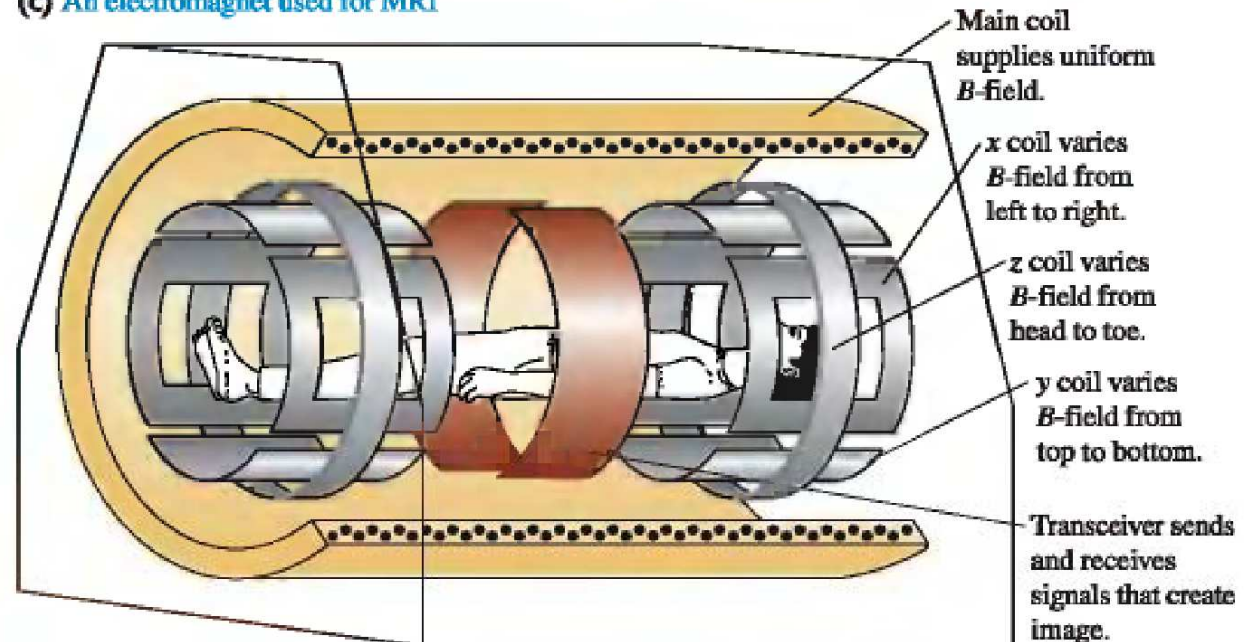


As the protons realign with the $\vec{B}$ -field, they emit radio waves that are picked up by sensitive detectors.

(b) Since $\vec{B}$ has a different value at different locations in the tissue, the radio waves from different locations have different frequencies. This makes it possible to construct an image.



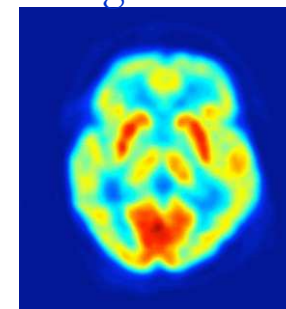
(c) An electromagnet used for MRI



Tomografia de emissão de positrões

A **Tomografia de Emissão de Positrões (PET)** é um exame imagiológico da medicina nuclear que utiliza radionuclídeo que emitem um positrão aquando da sua desintegração, o qual se aniquila com um electrão dos tecidos através da emissão de dois fotões gama que se propagam em direcções opostas, sendo detectados e usados para formar imagens 3D da região em análise.

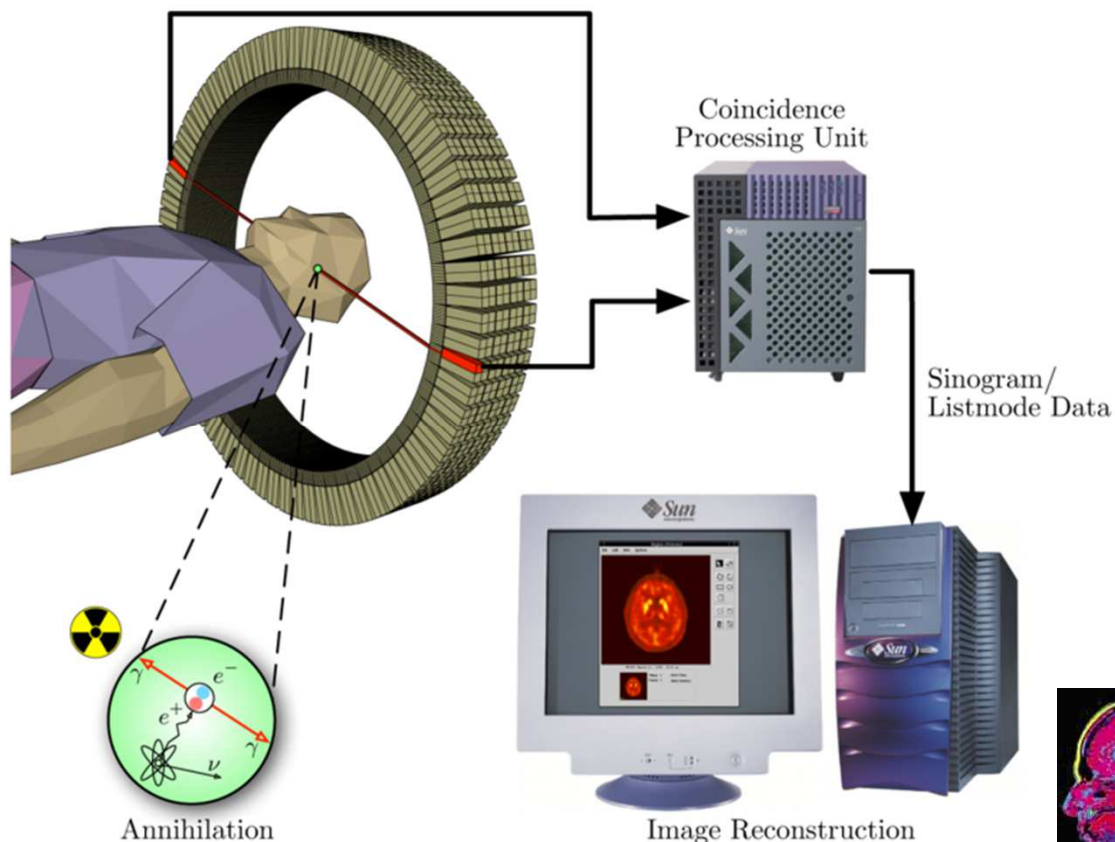
Imagem PET



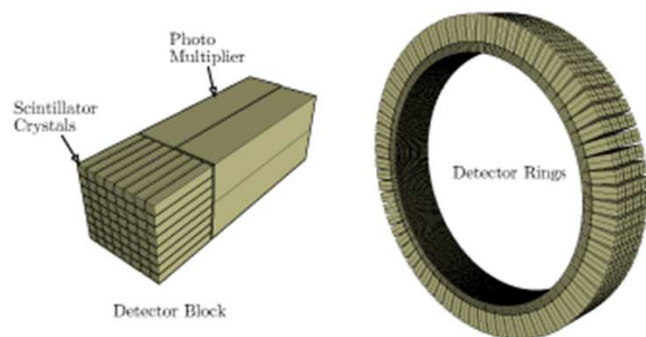
Equipamento PET



Esquema do processo de aquisição de imagens PET



Esquema do detector PET



http://pt.wikipedia.org/wiki/Tomografia_por_emiss%C3%A3o_de_positr%C3%B5es
2011-2012

Dose absorvida e equivalente de dose

Os efeitos produzidos dependem da **dose de radiação absorvida**, D , que se define como $D=E/m$, onde m é a massa da amostra da substância atravessada pela radiação ionizante e E a energia comunicada à amostra pela radiação.

A **unidade SI** de dose é o joule por quilograma, que se designa gray (Gy). Por vezes ainda se usa o rad (1 rad=0.01 Gy).

Como nem todas as radiações produzem os mesmos efeitos biológicos introduziu-se o conceito de **equivalente de dose**, ou **dose-equivalente**, ED , que se obtém multiplicando a dose absorvida por factores numéricos que dependem da natureza e energia da radiação absorvida, como por exemplo o factor de qualidade Q :

$ED=D \cdot Q$, onde Q caracteriza os efeitos nocivos da radiação absorvida, os quais dependem da natureza da radiação. O ED mede-se em sievert (Sv).

Outro aspecto a considerar é o tempo durante o qual a radiação incide na substância/organismo.

O **debito de dose** define-se como a razão entre a dose absorvida e o tempo de exposição, medindo-se em Gy/s, Gy/min, Gy/hora, etc..

Fontes de radiação ionizante

Table 43.3 Relative Biological Effectiveness (RBE) for Several Types of Radiation

Radiation	RBE (Sv/Gy or rem/rad)
X rays and γ rays	1
Electrons	1.0–1.5
Slow neutrons	3–5
Protons	10
α particles	20
Heavy ions	20

$$1 \text{ rad} = 0.01 \text{ J/kg} = 0.01 \text{ Gy}$$

$$\text{Equivalent dose (Sv)} = \text{RBE} \times \text{Absorbed dose (Gy)}$$

relative biological effectiveness (RBE)

[http://www.infopedia.pt/\\$dose-equivalente](http://www.infopedia.pt/$dose-equivalente)

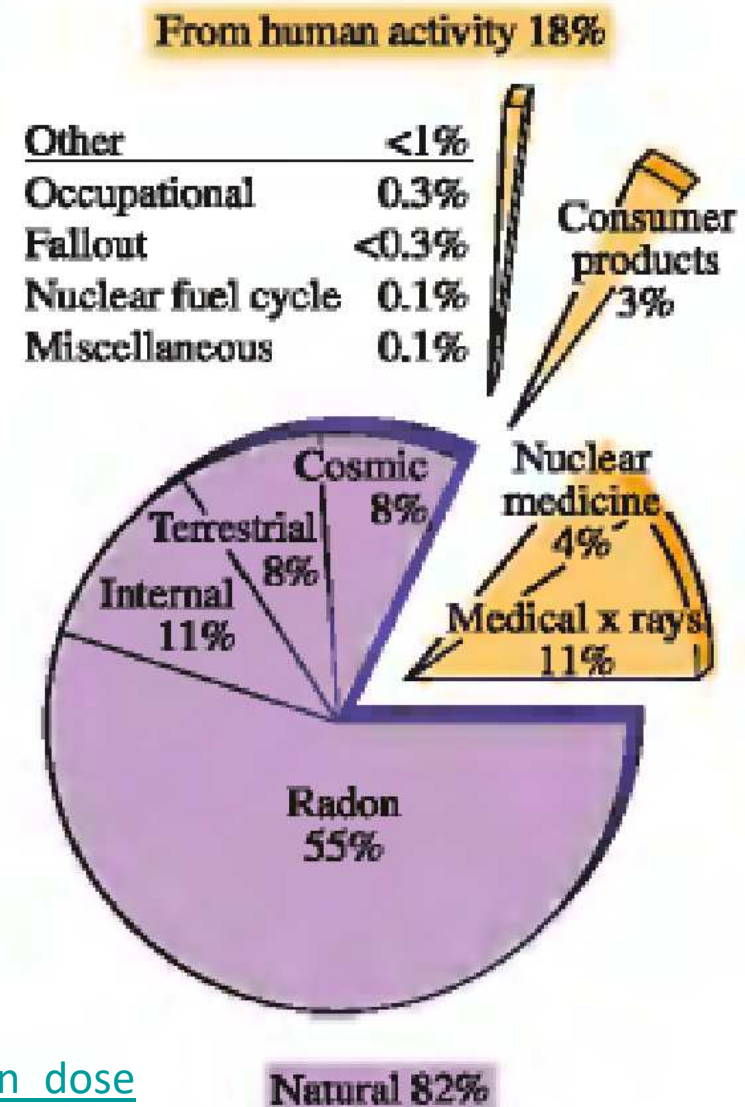
http://en.wikipedia.org/wiki/Gray_%28unit%29

http://en.wikipedia.org/wiki/Category:Units_of_radiation_dose

2011-2012

http://pt.wikipedia.org/wiki/Categoria:Imagiologia_m%C3%A9dica

43.10 Contribution of various sources to the total average radiation exposure in the U.S. population, expressed as percentages of the total.



Produção de energia a partir de reacções nucleares

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/particulasalfa.wmv>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/neutrao.wmv>

Energia nuclear

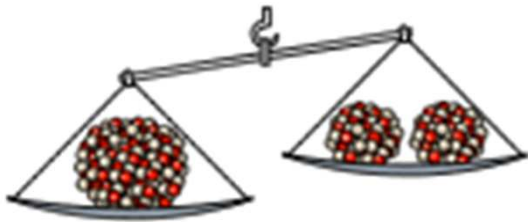
- Fissão do átomo

Li



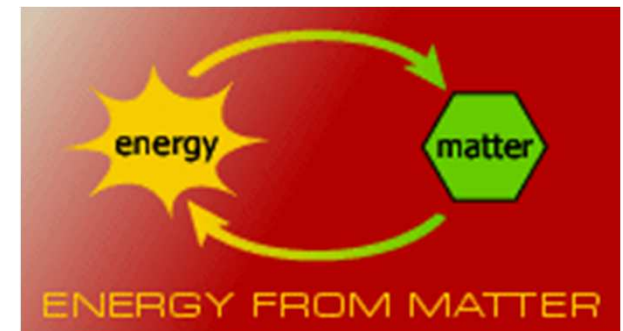
NUCLEAR TELEFISSION

By: Tom Diab
Science Department
Saline High School



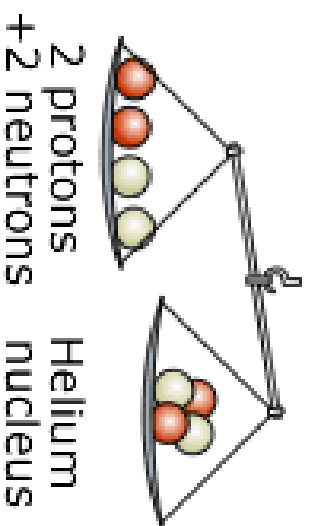
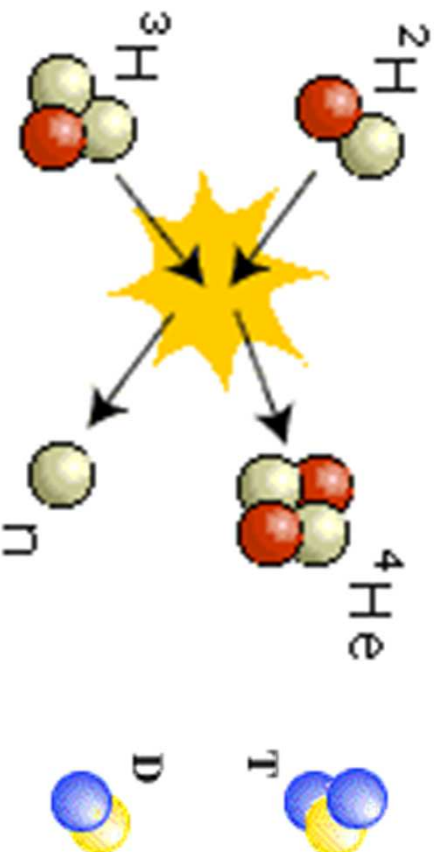
$$E = \Delta m \cdot c^2$$

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/neutrao.wmv>



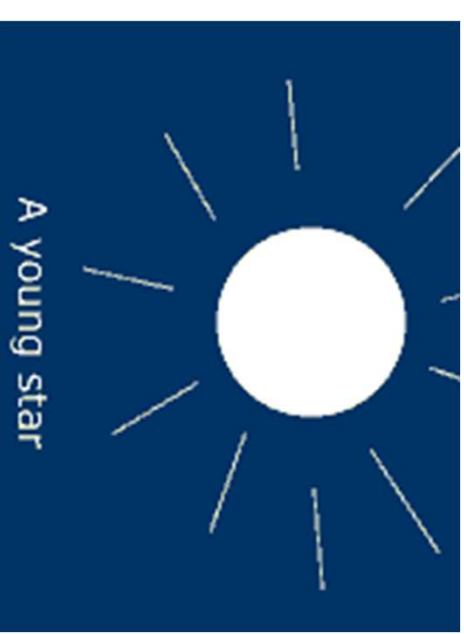
Energia nuclear

- Fusão do átomo

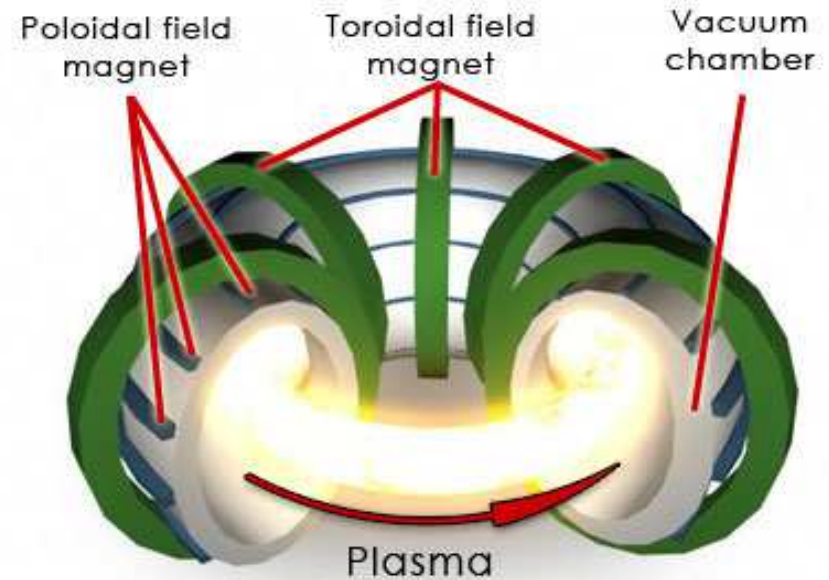
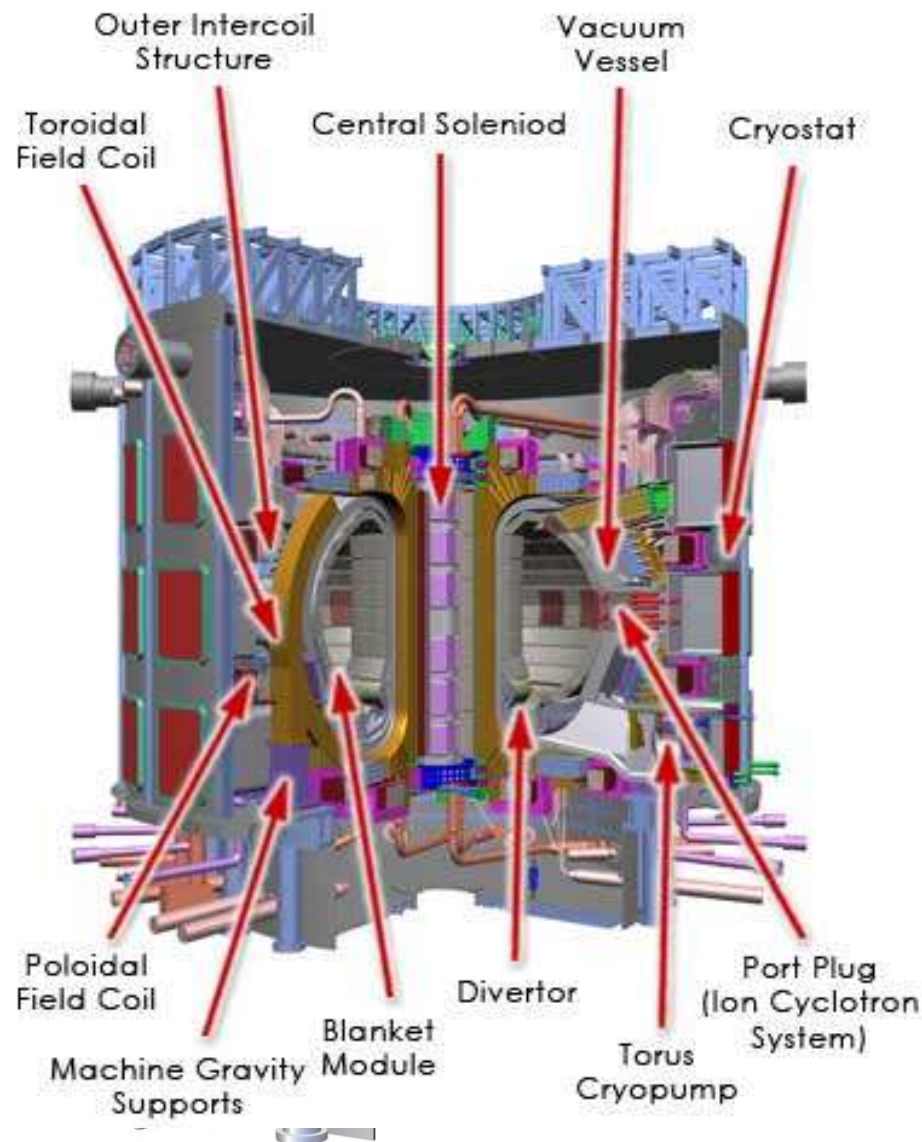


$$E = \Delta m \cdot c^2$$

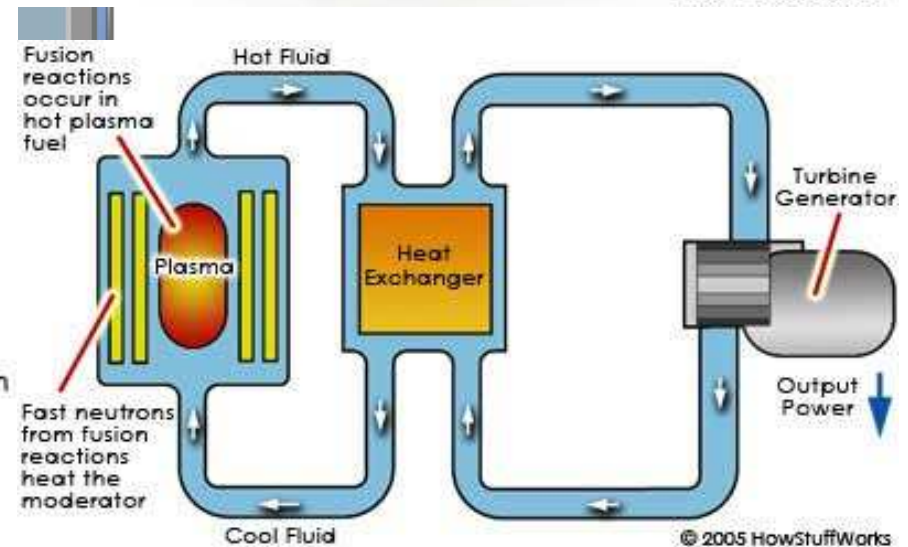
A origem da matéria



A fusão nuclear por confinamento magnético



© 2005 HowStuffWorks



<http://www.iter.org/>

<http://w3.ualg.pt/~jlongras/TURBINA.swf>

Partícula numa caixa (poço quântico)

Equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao potencial $U(x)$

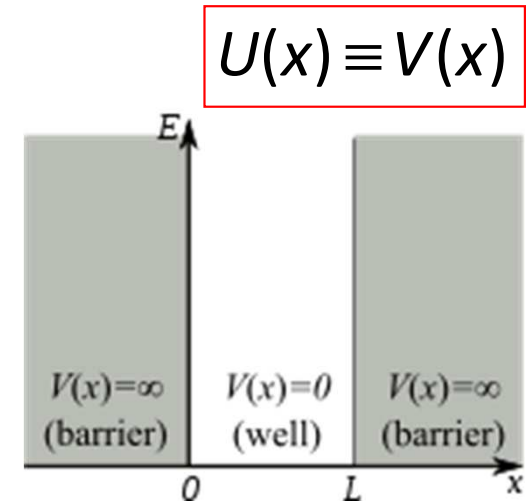
Para uma caixa e uma dimensão (poço a 1 D) tem-se:

Fora do poço

$$U(x) = \infty \quad x \leq 0 \quad e \quad x \geq L$$

Dentro do poço

$$U(x) = 0 \quad 0 < x < L$$



Para os **estados estacionários**, estado em que energia não depende do tempo, a probabilidade também não é função do tempo e a função de onda pode ser escrita como o produto de duas funções, uma dependente apenas das coordenadas espaciais e outra dependente do tempo:

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

$$\text{Fazendo: } \Psi(x,t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar},$$

$$\text{obtém-se } \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \phi(x) = E \phi(x)$$