

Programa de Física Geral II

Introdução

Física Quântica. Atributos fundamentais da matéria. Conceitos de força e de campo; campo eléctrico e força eléctrica; campo magnético e força de magnética; força de Lorentz; campo electromagnético; equações de Maxwell e ondas electromagnéticas. Partículas fundamentais - perspectiva histórica. Interações fundamentais e partículas mediadoras. Aceleradores e detectores de partículas. Partículas e interações. Resumo de relatividade restrita: expressões físico-matemáticas mais relevantes.

Fotões, Electrões e Átomos.

Emissão e absorção de luz pela matéria. Radiação do corpo negro; leis de Stefan-Boltzmann, Rayleigh-Jeans e Wien. Hipótese de Planck e quanta de luz. Explicação do efeito fotoeléctrico. Espectros de emissão e absorção atómicos; fórmula de Balmer-Rydberg; experiência de Franck e Hertz; laser de Hélio-Néon. Descoberta do electrão. Produção de raios x. Efeito Compton. Dualidade onda-corpúsculo da luz. Radioactividade.

Programa de Física Geral II

Natureza Ondulatória da Matéria e Mecânica Quântica.

Hipótese de de Broglie; experiência da dupla fenda; difracção de Electrões; dualidade onda corpúsculo; princípio da incerteza. Equação de Schrödinger; funções de onda, níveis de energia e densidade de probabilidade; partícula numa caixa; números quânticos; poços quânticos e barreiras de potencial; efeito de túnel; pontos quânticos; microscópios electrónicos

Estrutura Atómica.

As primeiras teorias atómicas da matéria e a tabela periódica de Mendeleev. Radioactividade; Descoberta do núcleo atómico. Modelo de Bohr do átomo de Hidrogénio; átomos hidrogenóides. Átomo de hidrogénio segundo a Mecânica Quântica; números quânticos; distribuição de probabilidades; efeito de Zeeman; momentos magnético orbital e de spin; acoplamento de momentos angulares; multiplicidade dos níveis de energia; distribuição de electrões nos átomos e princípio de exclusão de Pauli; tabela periódica; espectro de raios x.

Programa de Física Geral II

Moléculas, Sólidos Dielétricos e Metais.

Tipos de ligação química. Espectros moleculares. Estrutura dos sólidos. Bandas de Energia. Função de distribuição de Fermi-Dirac. Dielétricos, semicondutores e metais. Propriedades térmicas dos dielétricos. Modelo dos electrões livres nos metais. Propriedades térmicas e eléctricas dos metais. Supercondutividade.

Semicondutores.

Estrutura cristalina e estrutura de bandas de energia; portadores de carga em semicondutores; condutividade eléctrica intrínseca; condutividade eléctrica devido a impurezas; ionização térmica de doadores e receptores; mobilidade eléctrica em presença de impurezas. Efeitos termoeléctricos em semicondutores.

Dispositivos semicondutores.

Junções metal semicondutor; barreiras Schottky, junções p-n; díodos e transístores; díodos de efeito de túnel; exemplos de circuitos electrónicos simples com díodos e transístores; células solares e detectores foto-voltaicos; heterojunções; poços quânticos, fios quânticos e pontos quânticos; laser de díodo e outros dispositivos optoelectrónicos.

P r o g r a m a d e F í s i c a G e r a l I I

F í s i c a N u c l e a r .

Transmutação dos elementos; radioactividade natural; lei do decaimento radioactivo; aplicações; decaimentos alfa, beta e gama; efeitos biológicos da radioactividade. A descoberta do núcleo atómico; propriedades do núcleo; raios nucleares; massas nucleares; constituintes do núcleo e energia de ligação; estabilidade nuclear e radioactividade. Reacções nucleares. Cisão e fusão nucleares.

P r á t i c a s l a b o r a t o r i a i s

L a b o r a t ó r i o s 2 . 4 0 + 2 . 3 9

- 1^a S e m a n a : E s p e c t r o s e l e c t r ó n i c o s c o m e s p e c t r ó m e t r o d e p r i s m a + E f e i t o s t e r m o e l é c t r i c o s .
- 2^a S e m a n a : E f e i t o s t e r m o e l é c t r i c o s + E s p e c t r o s e l e c t r ó n i c o s c o m e s p e c t r ó m e t r o d e p r i s m a .
- 3^a S e m a n a : E f e i t o f o t o e l é c t r i c o + E f e i t o d e H a l l n o p - G e r m â n i o .
- 4^a S e m a n a : E f e i t o d e H a l l n o p - G e r m â n i o + E f e i t o f o t o e l é c t r i c o .

L a b o r a t ó r i o 3 . 3 8

- 5^a S e m a n a : R a d i o a c t i v i d a d e .

Programa de Física Geral II

Bibliografia recomendada

[University Physics with Modern Physics](#), by Hugh D. Young, Roger A. Freedman, T. R. Sandin, A. Lewis Ford; Addison Wesley Publishing Co.

Ver também na [página da disciplina](#) do ano lectivo de 2007-2008, o material disponibilizado pela [Professora Doutora Ana Rodrigues](#).

Em alternativa podem ser usadas versões em português (BR) dos manuais:

Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics, by Raymond A. Serway, Robert J. Beichner; Brooks/Cole Publishing Company.

Physics for Scientists and Engineers, by Paul A. Tipler & Gene Mosca, W. H. Freeman & Co.

University Physics with Modern Physics, by Hugh D. Young, Roger A. Freedman, T. R. Sandin, A. Lewis Ford; Addison Wesley Publishing Co.

Modern Physics, Tipler, Paul A.; Llewellyn, Ralph, Publisher: W. H. Freeman.

Programa de Física Geral II

Avaliação

Teórica + teórico-prática 70% + Prática 30%

Teórica + teórico-prática

Testes (OT) 20% + Exame Normal 50%

Prática

Realização de 5 trabalhos

Os alunos aprovados na componente prática da disciplina de Física Geral II nos últimos cinco anos lectivos anteriores a 2007-2008 estão dispensados da frequência das sessões práticas, sendo a classificação da componente laboratorial a obtida aquando da aprovação em Física Geral II.

Introdução à Física Quântica

Revisões de FG I

Revisão histórica

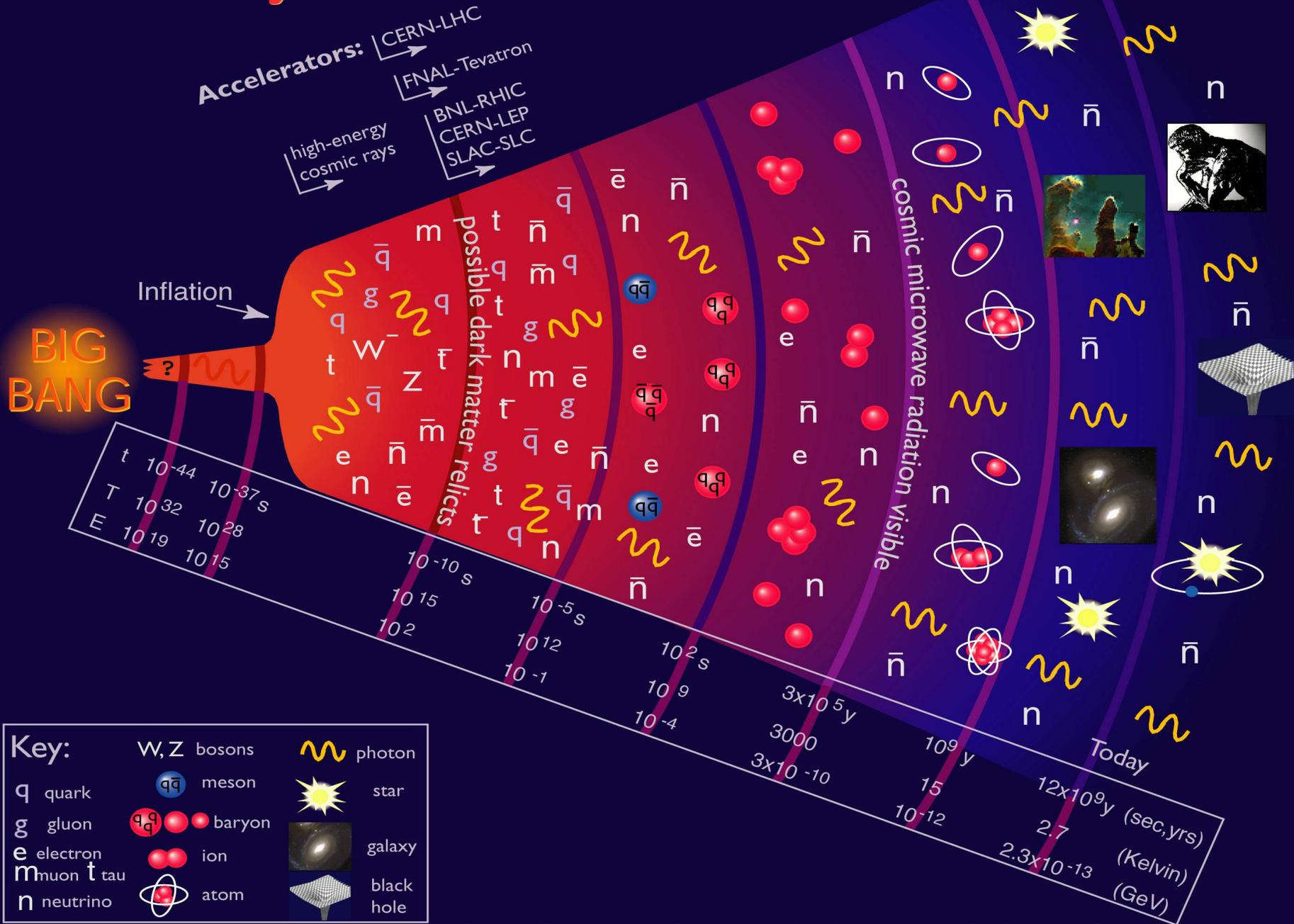
Curiosidades

Física Atómica



15-09-2009

History of the Universe

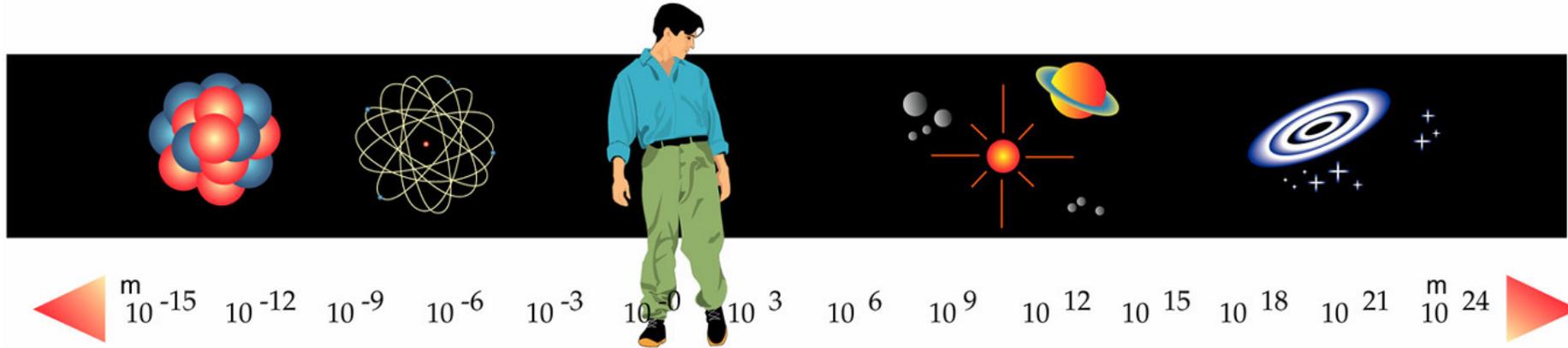


La physique des particules étudie la matière dans ses dimensions les plus petites.

Particle physics looks at matter in its smallest dimensions.

L'astrophysique étudie la matière dans ses dimensions les plus grandes.

Astrophysics looks at matter in its largest dimensions.



Microscopes
Microscopes

Jumelles
Binoculars

Telescopes optiques & radio
Optical & radio telescopes

Accélérateurs
et détecteurs
Accelerators
and detectors

L'oeil nu.
Naked eye

THE TWO FRONTIERS OF PHYSICS

LES DEUX FRONTIERES DE LA PHYSIQUE

The Forces

Four

. . . . or one ?

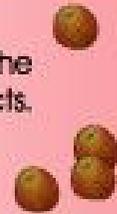
The forces of nature between matter particles (quarks and leptons) arise from the exchange of other 'force carrying' particles called bosons. If a boson is emitted by one quark or lepton and is absorbed by another, then there is a force between the two.

Force	Boson	Source	Relative strength*	Range
gravity	graviton	mass	10^{-39}	Infinite
weak	W^+ , W^- , Z	weak charge	10^{-5}	10^{-18} m
electromagnetism	photon	charge	10^{-2}	infinite
strong	gluons	colour	1	10^{-16} m

* In the nucleus

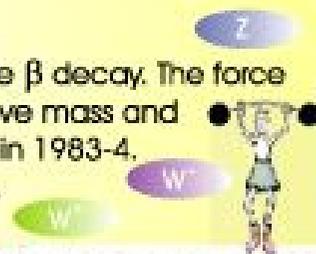
Gravity

The weakest force, but responsible for the attraction between astronomical objects. The graviton has not been observed. Felt by all particles.



Weak

Responsible for radioactive β decay. The force carriers (W^\pm , Z bosons) have mass and were discovered at CERN in 1983-4. Felt by all matter particles.



The weak force and electromagnetism are different manifestations of the electroweak force. The mathematical theory of this force predicts the existence of the Higgs boson, responsible for the mass of all objects.

Strong

Felt by quarks only, this force also holds nuclei together. There are eight different types of gluons carrying different combinations of colour.



Electromagnetism

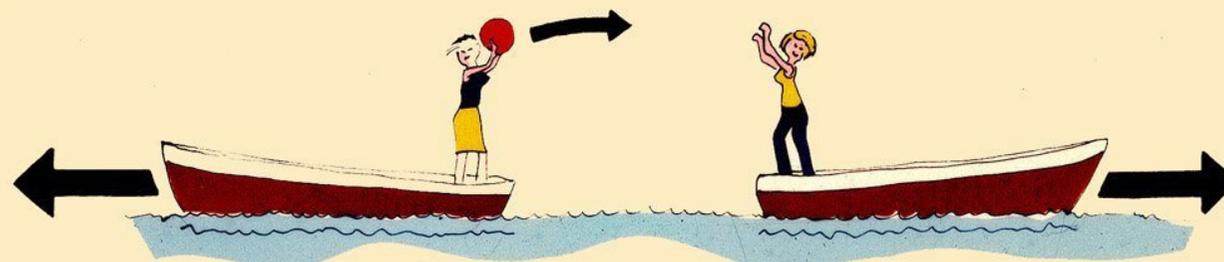
Holds atoms together and plays a major role in everyday life. The force carrier is the familiar photon. Electricity and magnetism are simply different manifestations of this force. Felt by all particles except neutrinos, which are uncharged.



Can all four forces be described as different aspects of a more general theory ?

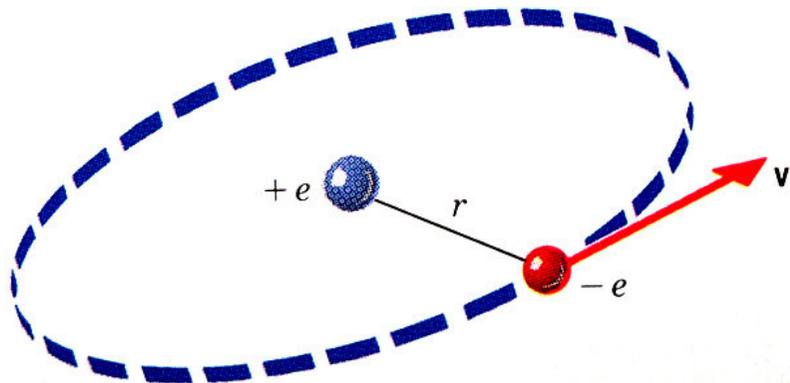
AS FORÇAS NA NATUREZA

TIPO	INTENSIDADE RELATIVA	PARTÍCULA INTERMEDIADORA	EXEMPLOS
FORÇA NUCLEAR FORTE	1	GLUÕES (SEM MASSA)	NÚCLEOS ATÓMICOS
FORÇA ELECTROMAGNÉTICA	$\sim \frac{1}{1000}$	FOTÕES (SEM MASSA)	ÁTOMOS ELECTRICIDADE
FORÇA NUCLEAR FRACA	$\sim \frac{1}{100000}$	BOSÕES Z^0, W^+, W^- (PESADOS)	DECAIMENTO BETA
GRAVITAÇÃO	$\sim 10^{-38}$?	CORPOS COM MASSA

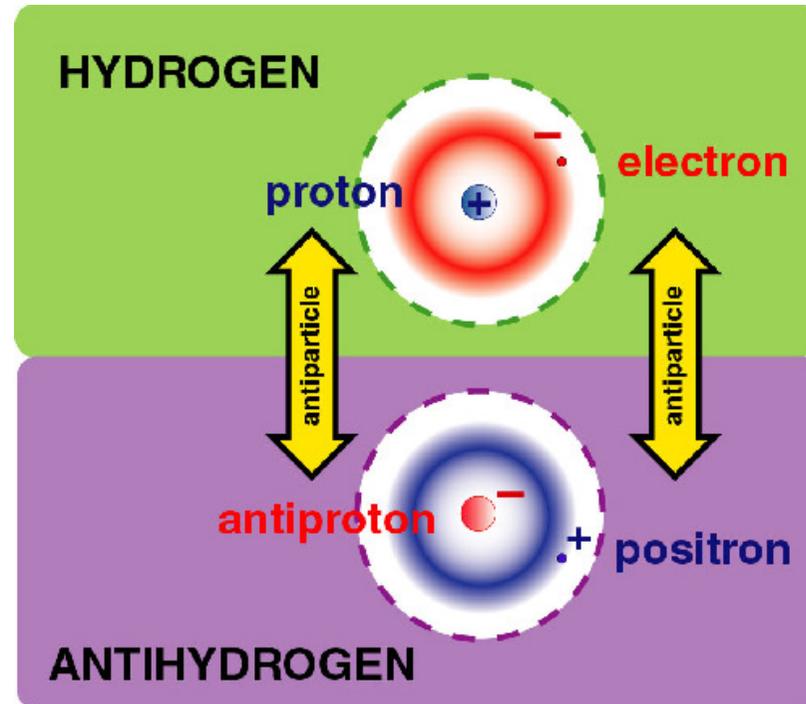
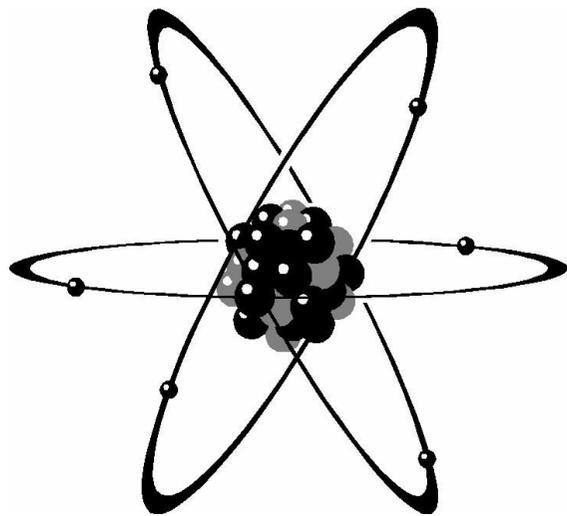


A TROCA DE PARTÍCULAS É RESPONSÁVEL PELAS FORÇAS

Matéria e anti-matéria



Copyright John Wiley & Sons



The Higgs Boson

What is mass?

We still do not understand what mass is and why the quarks and leptons have different masses. Our current best idea is that a "Higgs field" fills the universe and mass is a measure of the resistance to movement through this field.

To understand the Higgs mechanism, imagine that a room full of physicists quietly chattering is like space filled only with the Higgs field ...

... a well known scientist walks in, creating a disturbance as he moves across the room, and attracting a cluster of admires with each step ...

... this increases his resistance to movement, in other words, he acquires mass, just like a particle moving through the Higgs field ...

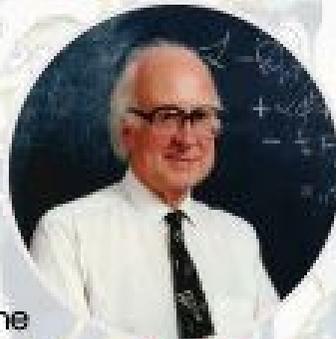
... if a rumour crosses the room ...

... it creates the same kind of clustering, but this time among the scientists themselves. In this analogy the cluster is a Higgs particle.

From an idea by David Miller, University College, London.

Explanation for mass

This explanation for mass was developed in the 1960's by a number of physicists, including Peter Higgs, now Emeritus Professor at the University of Edinburgh, whose name has been associated with the idea.



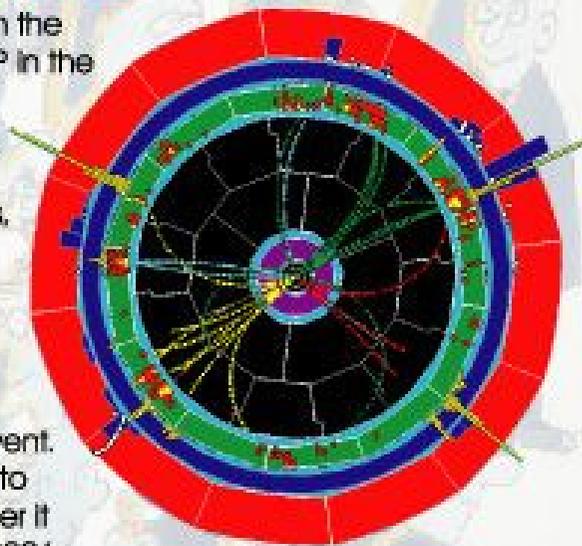
Peter Higgs

Many searches have been made for the Higgs boson; the most detailed were using the LEP accelerator at CERN during the 1990's. Indirect evidence suggests it has a mass lower than $200 \text{ GeV}/c^2$ and direct searches show that its mass is above $110 \text{ GeV}/c^2$.

In 2000, physicists at LEP may have glimpsed the first hints of a Higgs boson signal: a few events consistent with a mass of $115 \text{ GeV}/c^2$ were observed.

Possible evidence

for the Higgs boson in the ALEPH detector at LEP in the reaction $e^+e^- \rightarrow HZ$. The Higgs boson has decayed into the green and yellow jets, the Z boson to the red and blue jets. It is also possible, however, that other processes could be responsible for this event. The LHC is expected to resolve the puzzle after it begins operation in 2006.



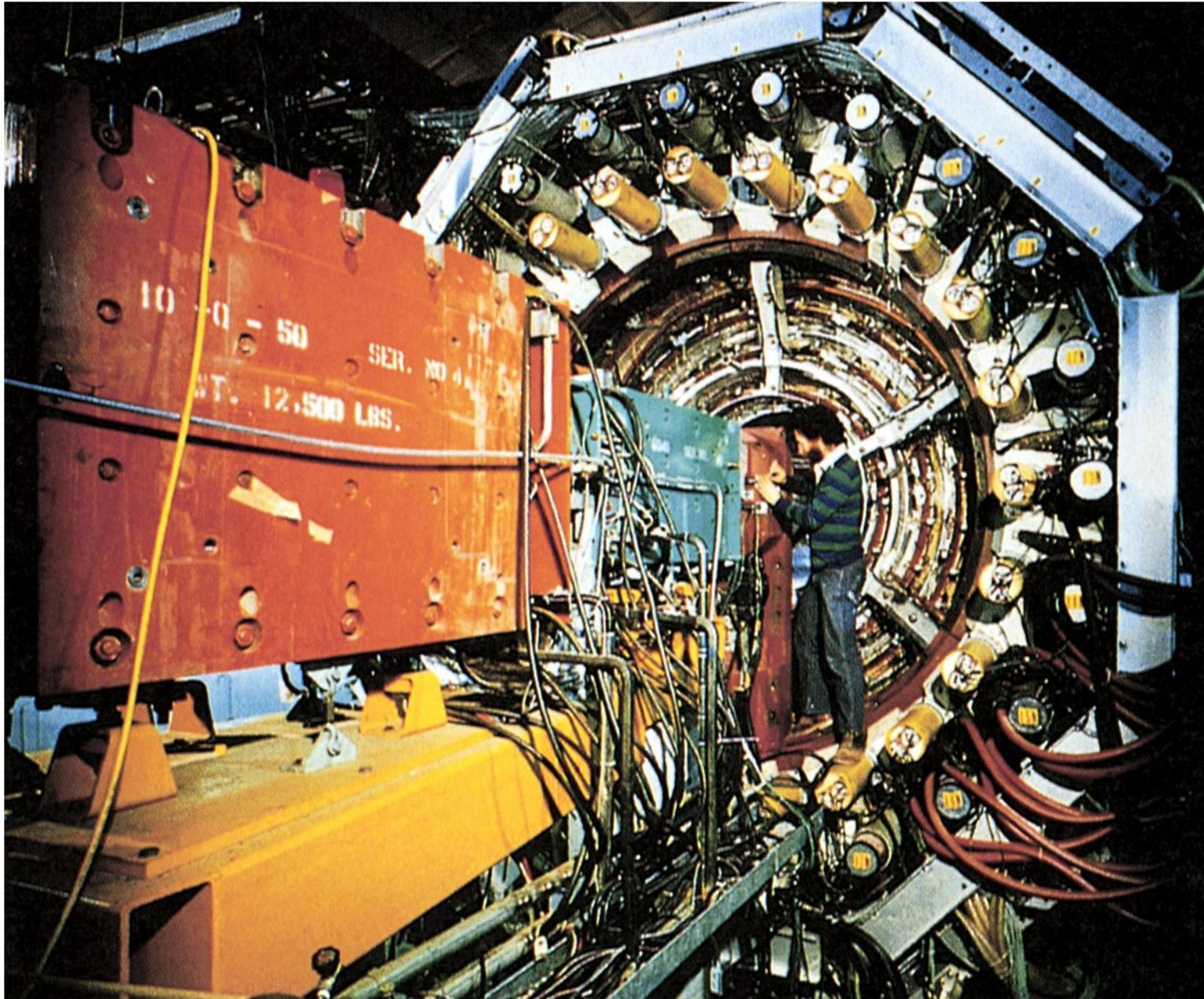
Background image courtesy of CERN

CERN e LHC





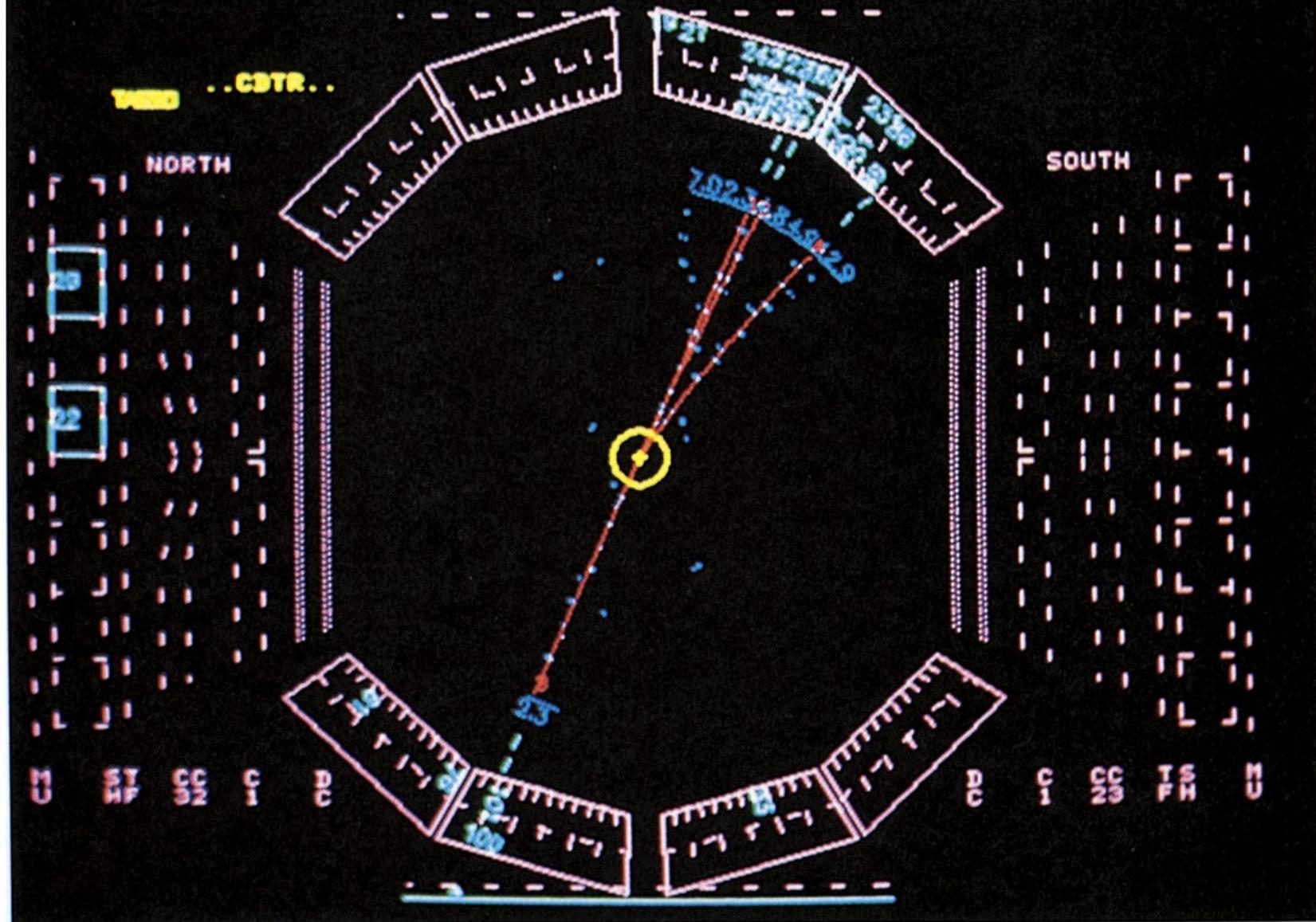
15-09-2009

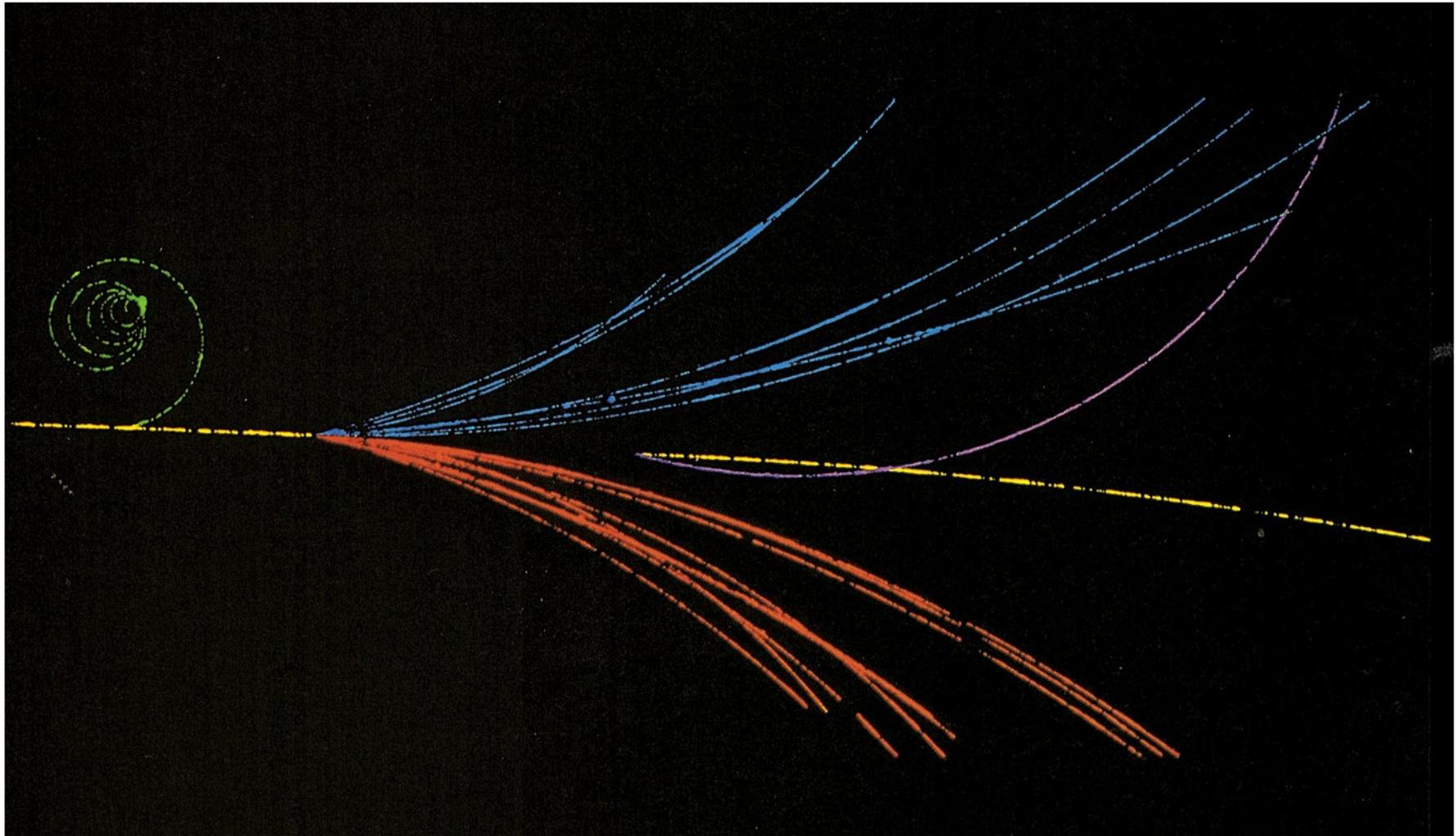


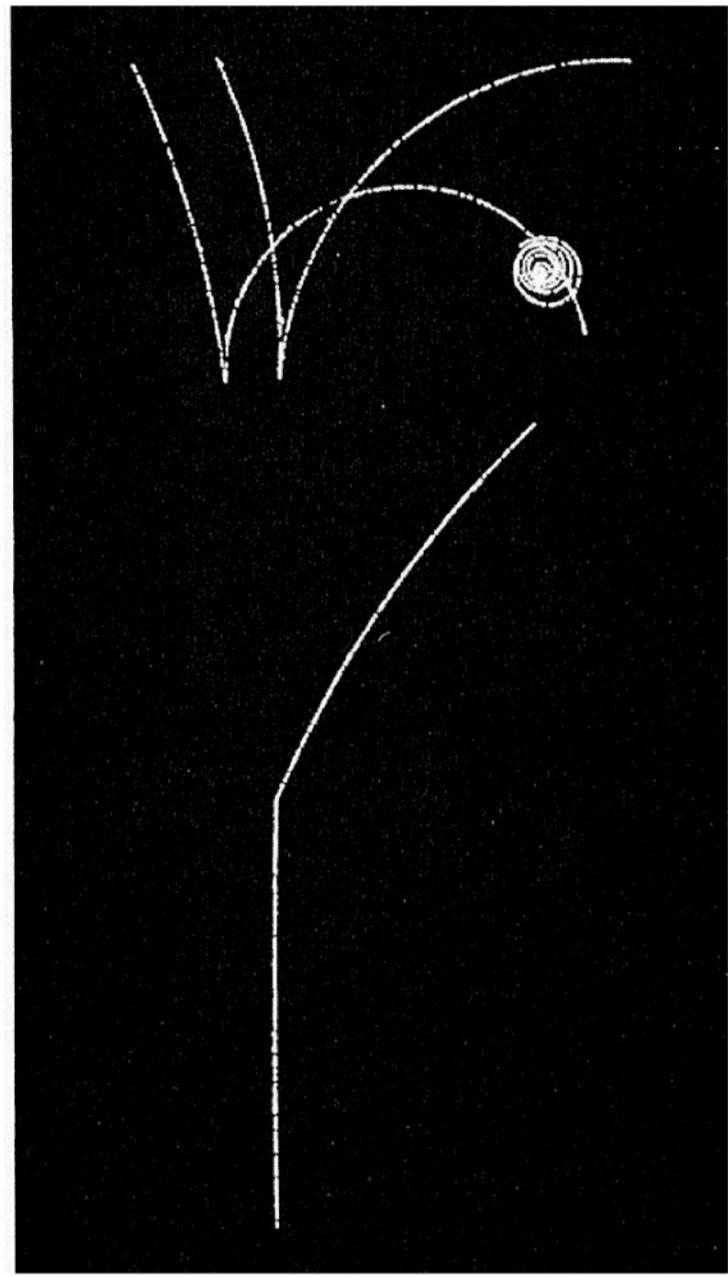
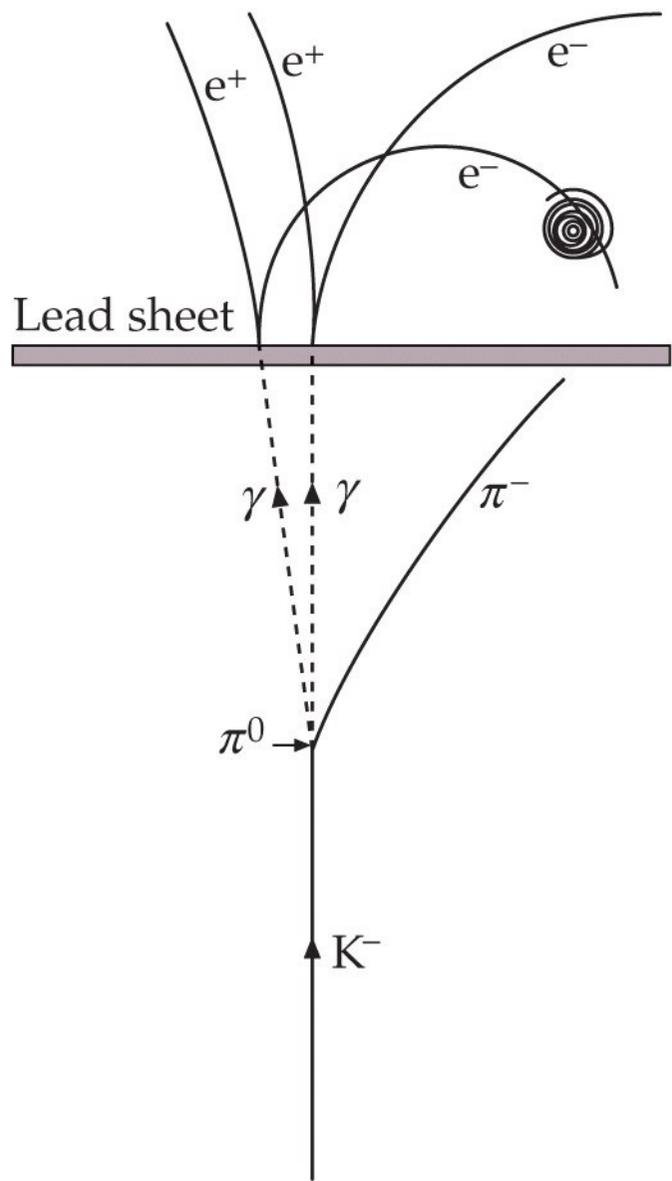


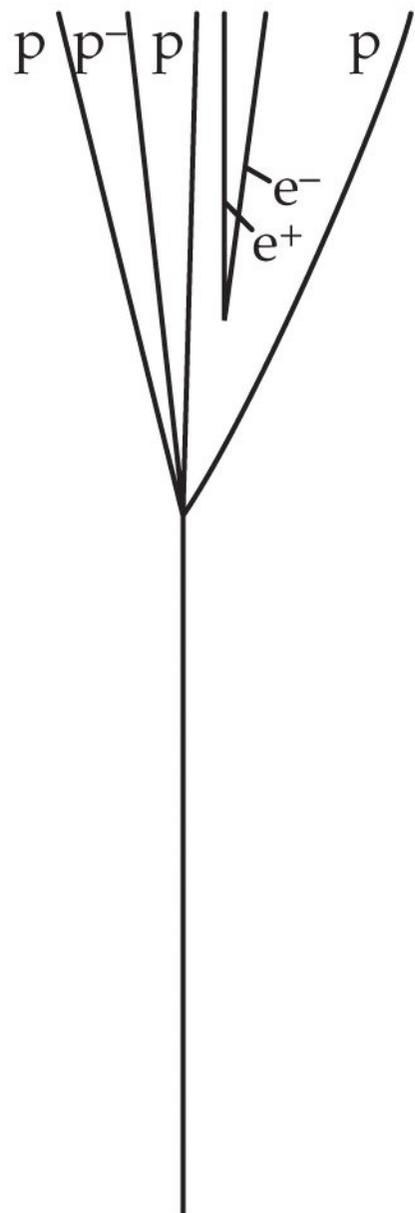
NO MATR 2004.EVT
DATE 17-JAN-04

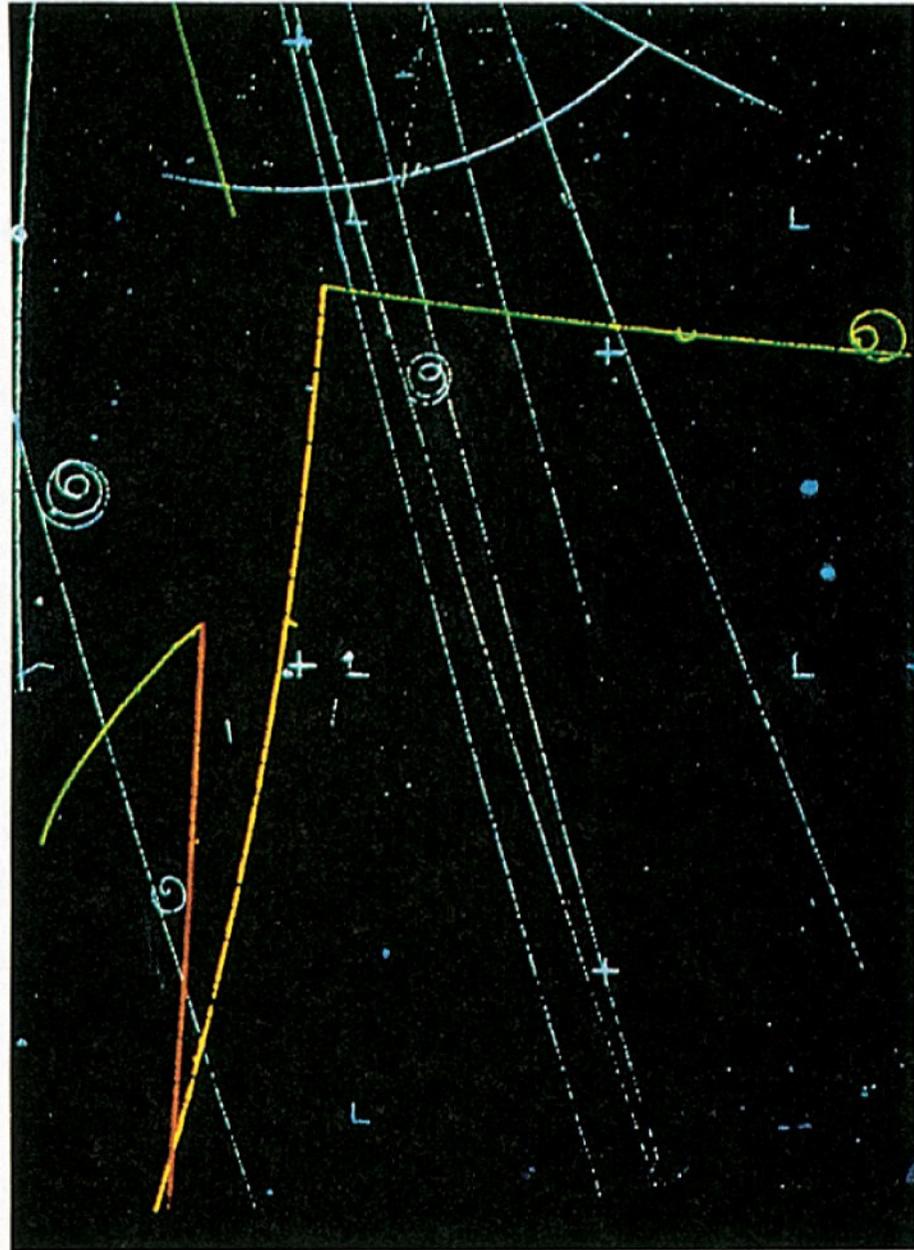
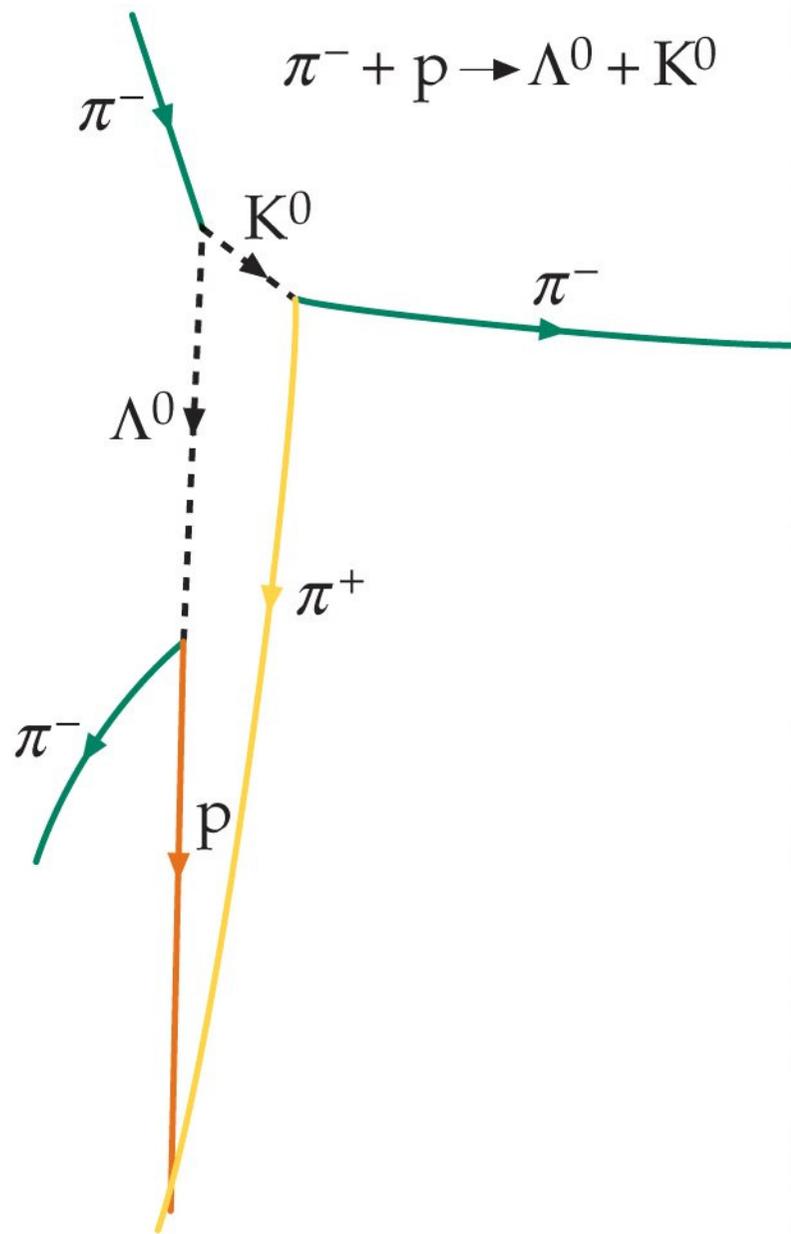
RUN 3850 EVENT 6200 EDEAM= 16.92 GEV
VERSION 9.0 TRIGGER= 00001100000010











Detector de neutrinos

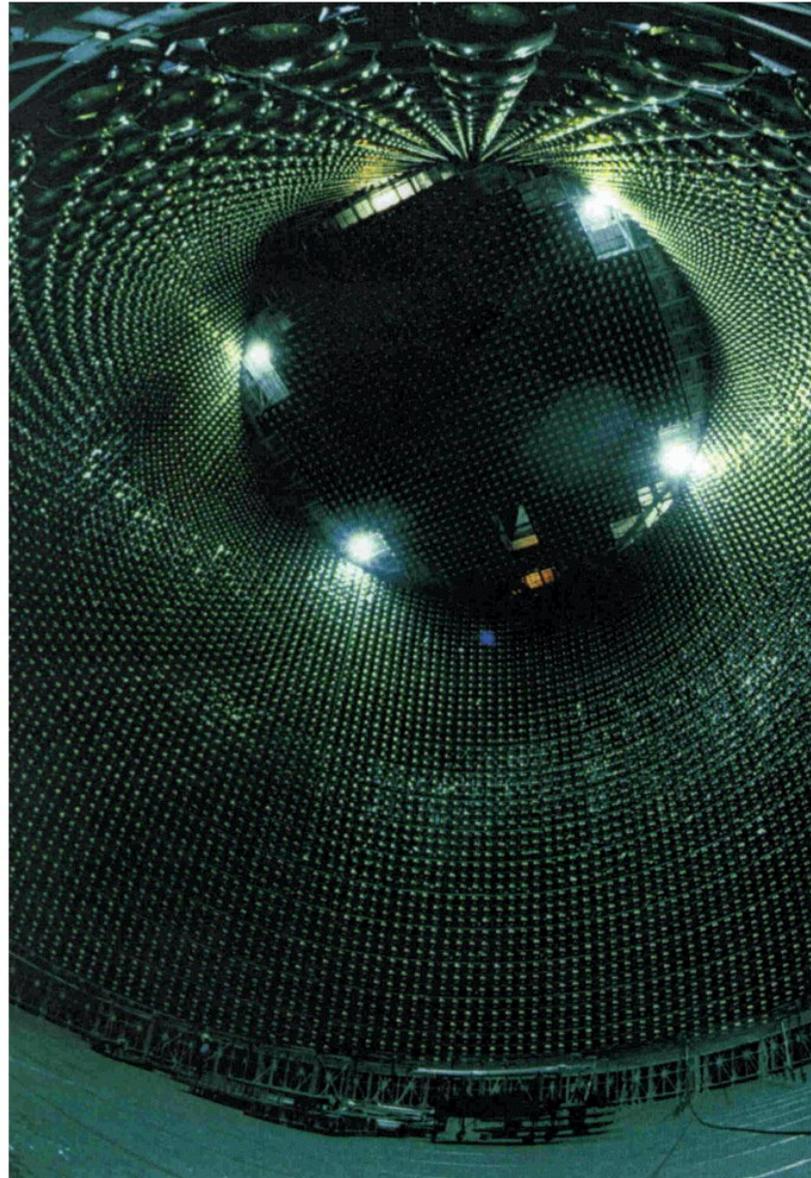


TABLE 1-2

Dimensions of Physical Quantities

Quantity	Symbol	Dimension
Area	A	L^2
Volume	V	L^3
Speed	v	L/T
Acceleration	a	L/T^2
Force	F	ML/T^2
Pressure (F/A)	p	M/LT^2
Density (M/V)	ρ	M/L^3
Energy	E	ML^2/T^2
Power (E/T)	P	ML^2/T^3

TABLE 1-3

The Universe by Orders of Magnitude

Size or Distance	(m)	Mass	(kg)	Time Interval	(s)
Proton	10^{-15}	Electron	10^{-30}	Time for light to cross nucleus	10^{-23}
Atom	10^{-10}	Proton	10^{-27}	Period of visible light radiation	10^{-15}
Virus	10^{-7}	Amino acid	10^{-25}	Period of microwaves	10^{-10}
Giant amoeba	10^{-4}	Hemoglobin	10^{-22}	Half-life of muon	10^{-6}
Walnut	10^{-2}	Flu virus	10^{-19}	Period of highest audible sound	10^{-4}
Human being	10^0	Giant amoeba	10^{-8}	Period of human heartbeat	10^0
Highest mountain	10^4	Raindrop	10^{-6}	Half-life of free neutron	10^3
Earth	10^7	Ant	10^{-4}	Period of earth's rotation	10^5
Sun	10^9	Human being	10^2	Period of earth's revolution	
Distance from earth to sun	10^{11}	Saturn V rocket	10^6	around sun	10^7
Solar system	10^{13}	Pyramid	10^{10}	Lifetime of human being	10^9
Distance to nearest star	10^{16}	Earth	10^{24}	Half-life of plutonium-239	10^{12}
Milky Way galaxy	10^{21}	Sun	10^{30}	Lifetime of mountain range	10^{15}
Visible universe	10^{26}	Milky Way galaxy	10^{41}	Age of earth	10^{17}
		Universe	10^{52}	Age of universe	10^{18}



TABLE 1-1

Prefixes for Powers of 10^\dagger

Multiple	Prefix	Abbreviation
10^{18}	exa	E
10^{15}	peta	P
10^{12}	tera	T
10^9	giga	G
10^6	mega	M
10^3	kilo	k
10^2	hecto	h
10^1	deka	da
10^{-1}	deci	d
10^{-2}	centi	c
10^{-3}	milli	m
10^{-6}	micro	μ
10^{-9}	nano	n
10^{-12}	pico	p
10^{-15}	femto	f
10^{-18}	atto	a

[†] The prefixes hecto (h), deka (da), and deci (d) are not multiples of 10^3 or 10^{-3} and are rarely used. The other prefix that is not a multiple of 10^3 or 10^{-3} is centi (c). The prefixes frequently used in this book are printed in red. Note that all prefix abbreviations for multiples 10^6 and higher are uppercase letters; all others are lowercase letters.





15-09-2009

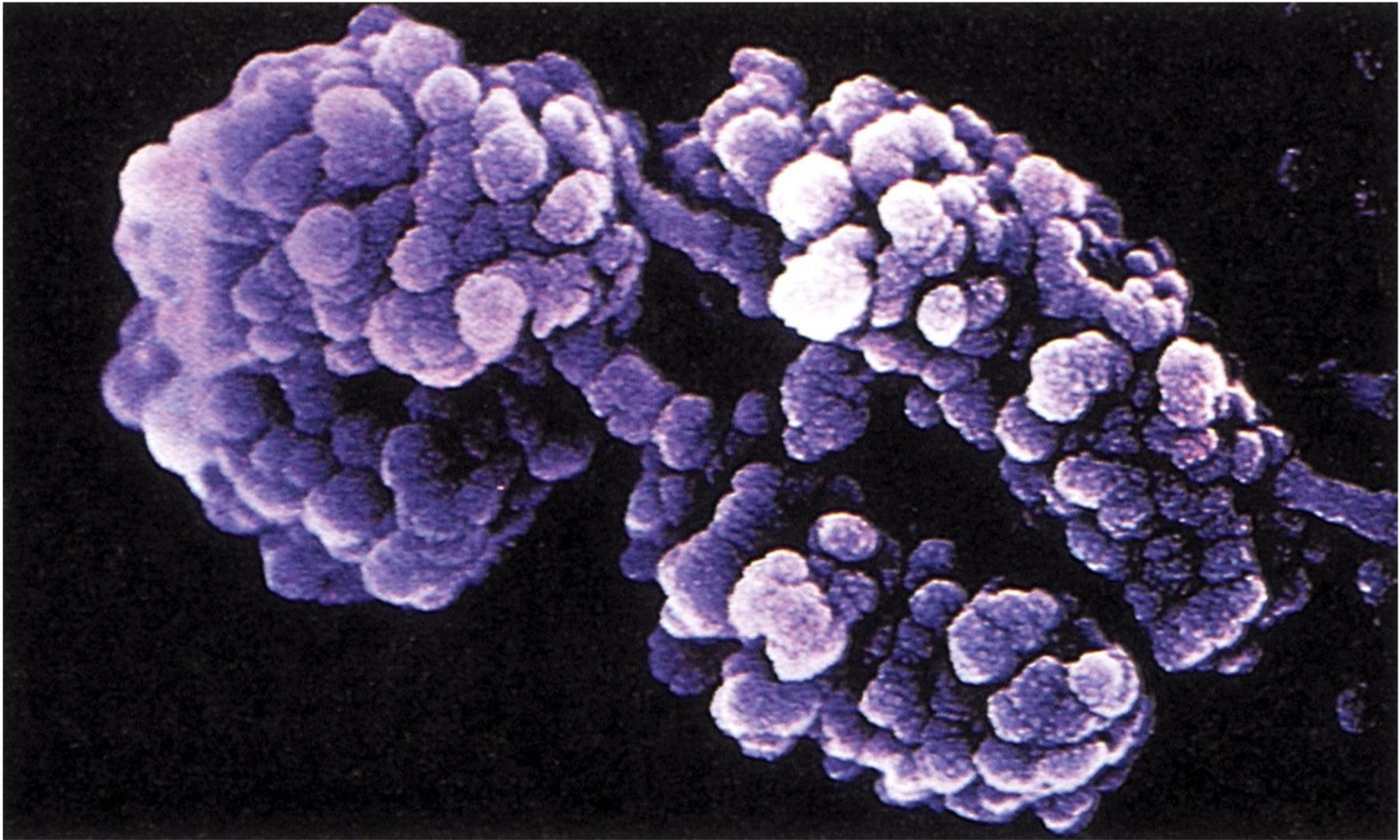
30

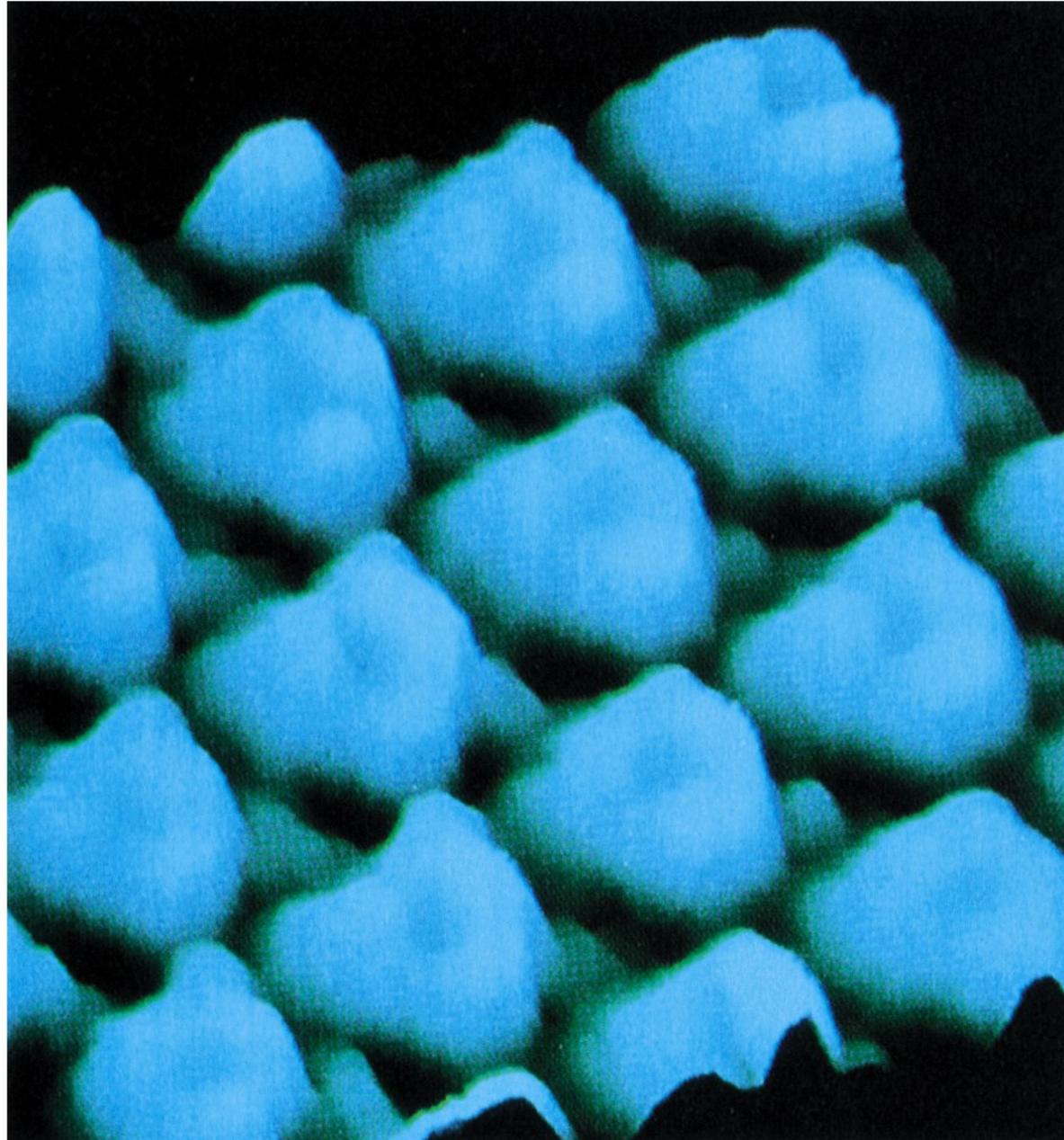


15-09-2009



15-09-2009





15-09-2009

No princípio ...

... as trevas cobriam o abismo ... e “Deus disse”»

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \qquad \nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \qquad \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\left(\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \qquad \vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{M} \qquad \vec{J} = \sigma \vec{E} \right)$$

e foi feita a ‘primeira criatura’ de Deus, **a luz** (Génesis 1, 1-4):

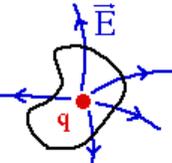
$$-\nabla^2 \vec{E} + \mu \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{J}}{\partial t^2} = -\mu \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2}$$

“Deus viu que a luz era boa e separou a luz das trevas.”

Equações de Maxwell

Maxwell's Equations

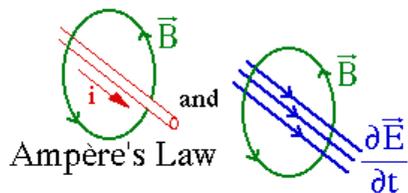
$$\oiint \vec{E} \cdot \hat{n} dS = \frac{q}{\epsilon_0}$$

Gauss's Law 

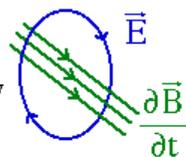
$$\oiint \vec{B} \cdot \hat{n} dS = 0$$

(no monopoles) 

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 \left(i + \epsilon_0 \frac{d\Phi_E}{dt} \right)$$

Ampère's Law 

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{l} = - \frac{d\Phi_B}{dt}$$

Faraday's Law 

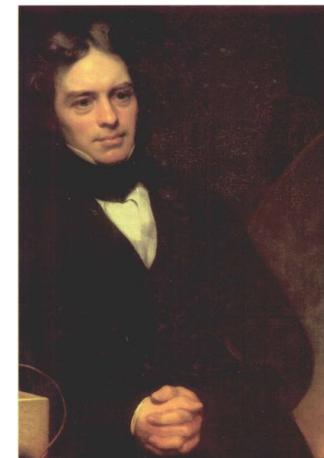
$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \left(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

(Differential Forms)



Equações de Maxwell

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$(\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P})$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{M}$$

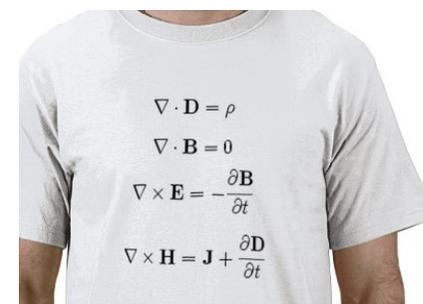
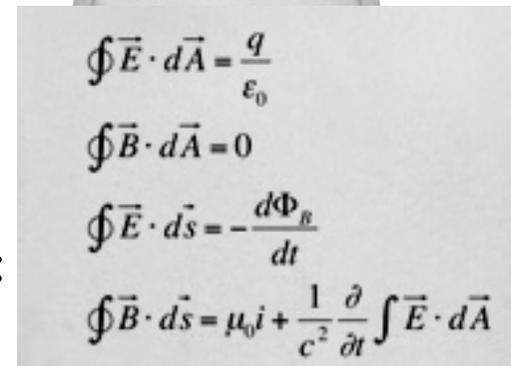
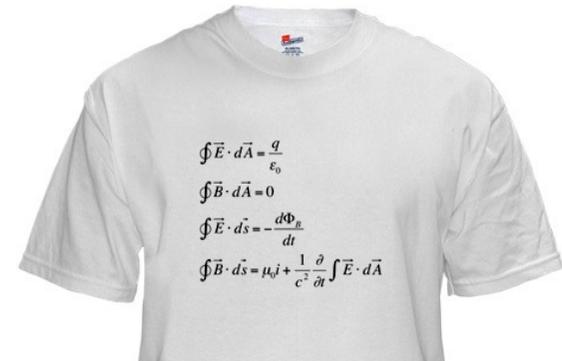
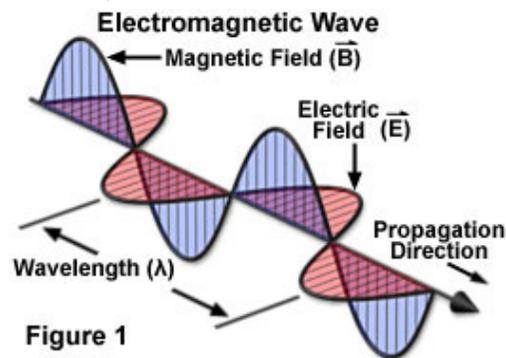
$$\vec{J} = \sigma \vec{E}$$

E fez-se **luz no vácuo**

$$(\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}, \vec{B} = \mu_0 \vec{H} \text{ e } \vec{J} = \vec{0}) :$$

$$\nabla^2 \vec{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\nabla^2 \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}$$

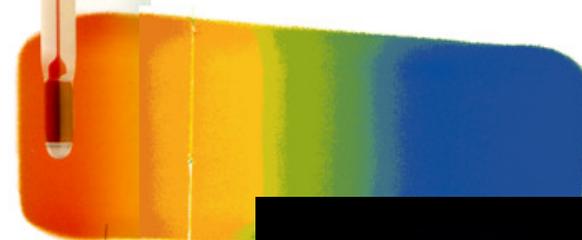
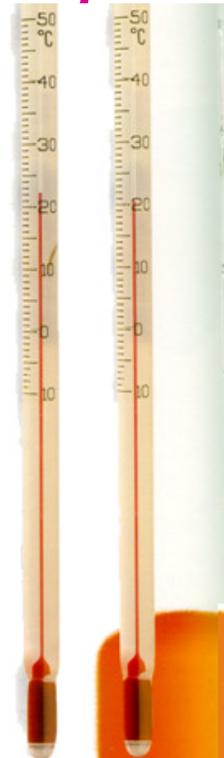


Descoberta da Radiação Infravermelha

~1800

uma determinada gama de
ntos de onda. O resto
o electromagnético é
ara o homem.

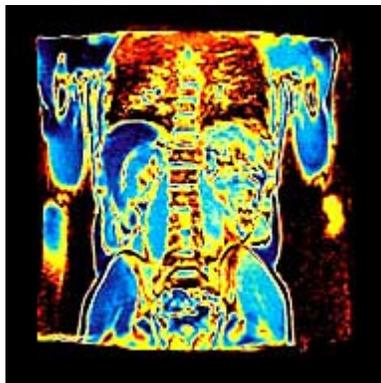
ESPECTRO
a, Herschel investigou
o de cada cor do
pós a luz com um
o projectar o
am com uma fenda,
ma só cor que fazia
iómetro. Também
cias para observar se



O espectro visível

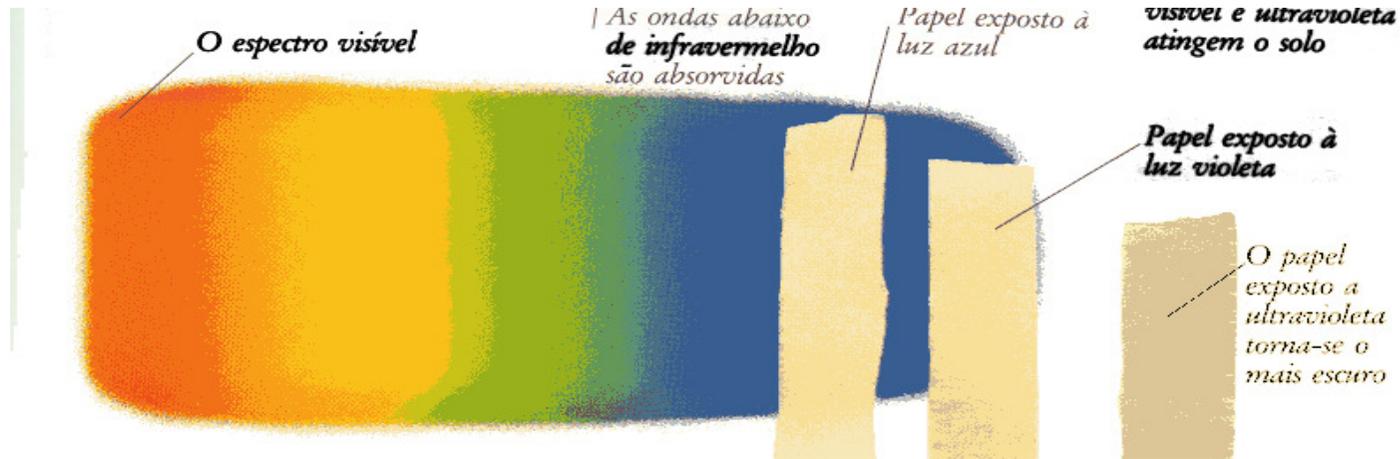


Will Burgess / Reuters

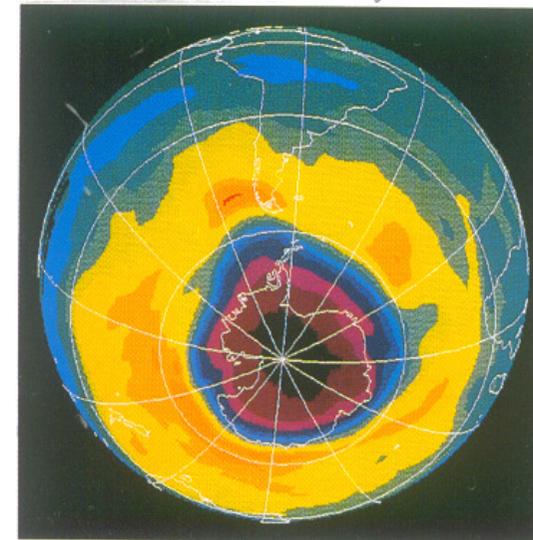
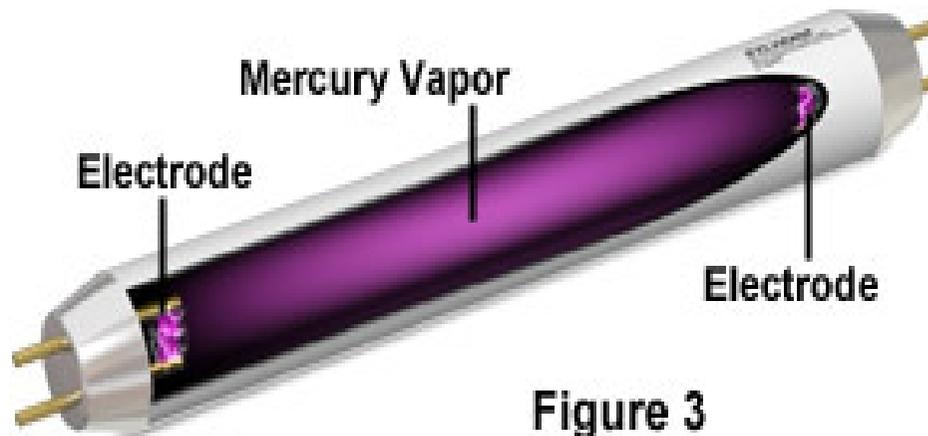


Descoberta da Radiação Ultravioleta

~1800

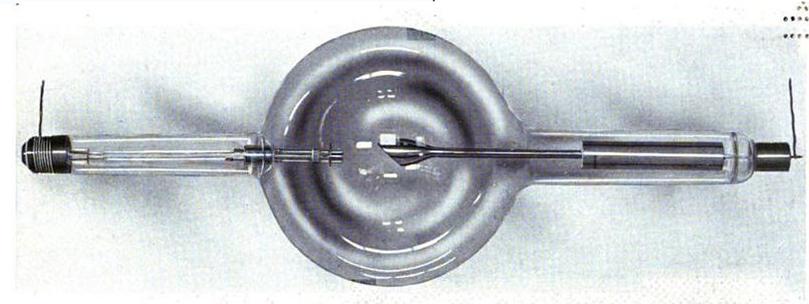
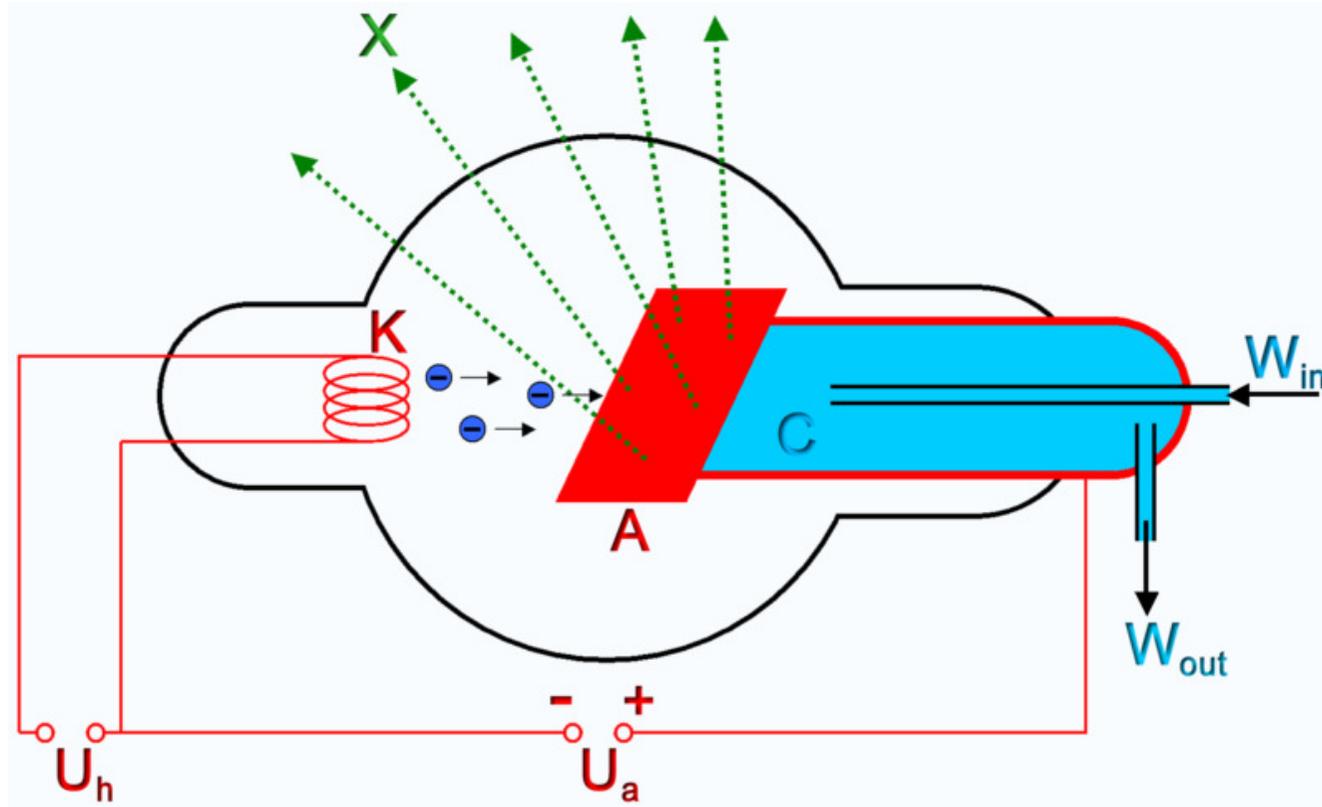


Fluorescent Mercury Vapor Lamp



Tubo de Crookes

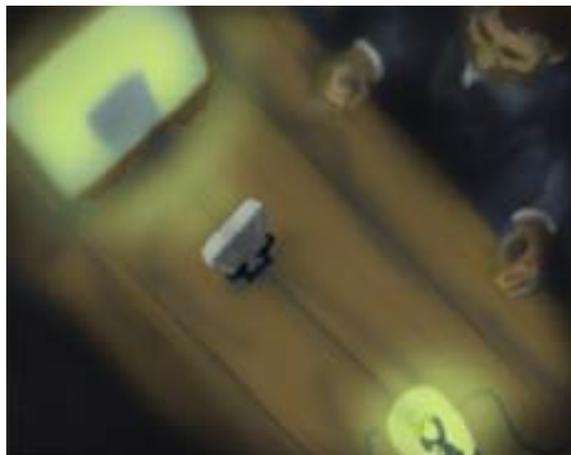
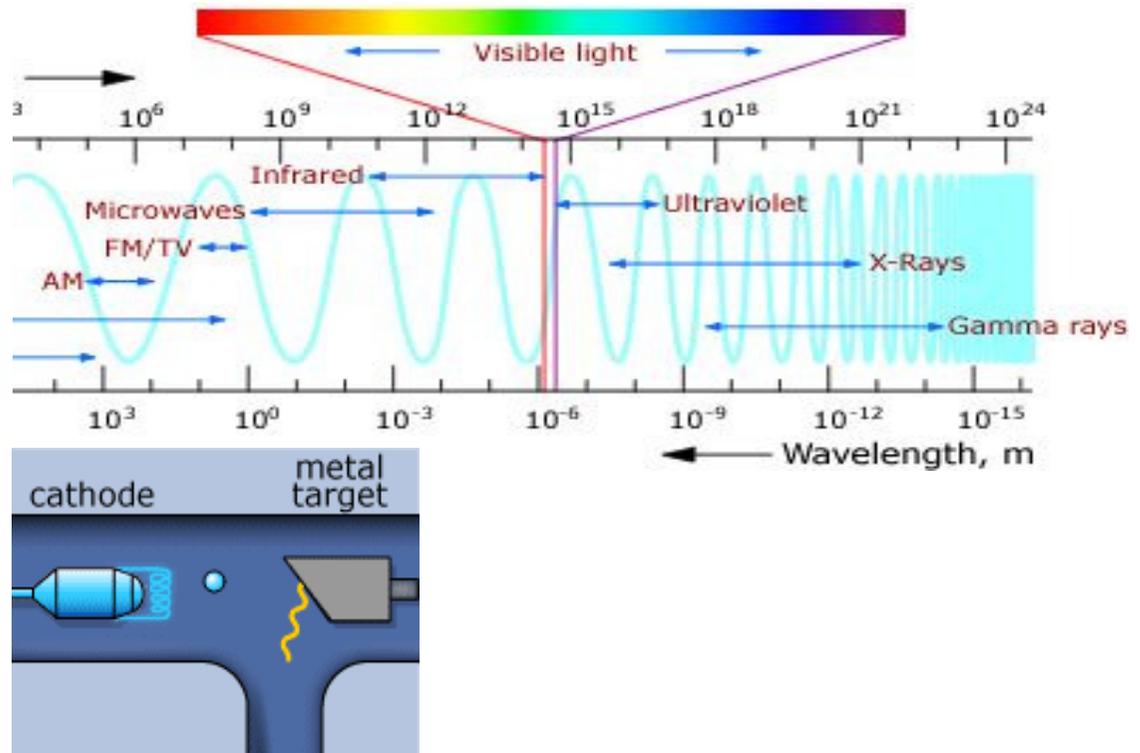
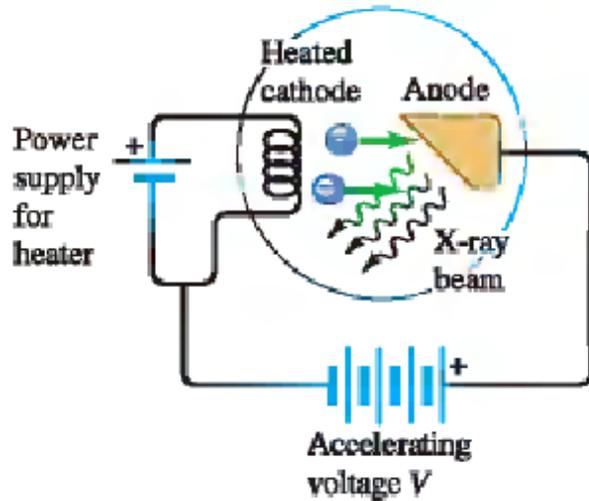
Descobertas dos raios catódicos, dos raios x e do electrão



Descoberta dos Raios X

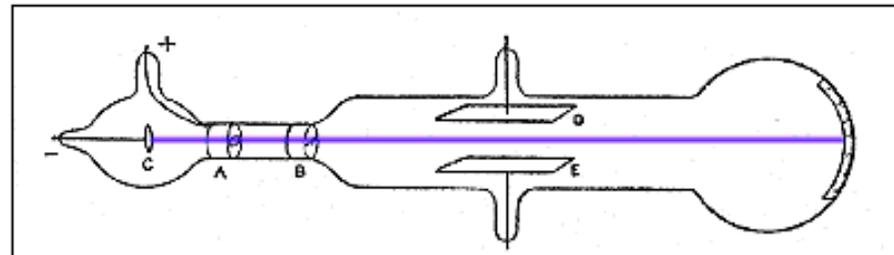
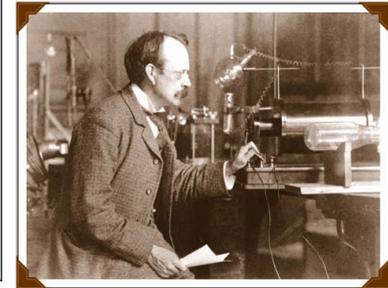
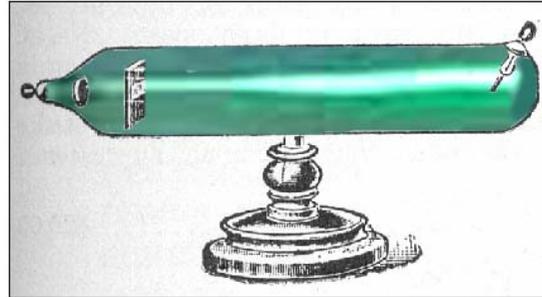
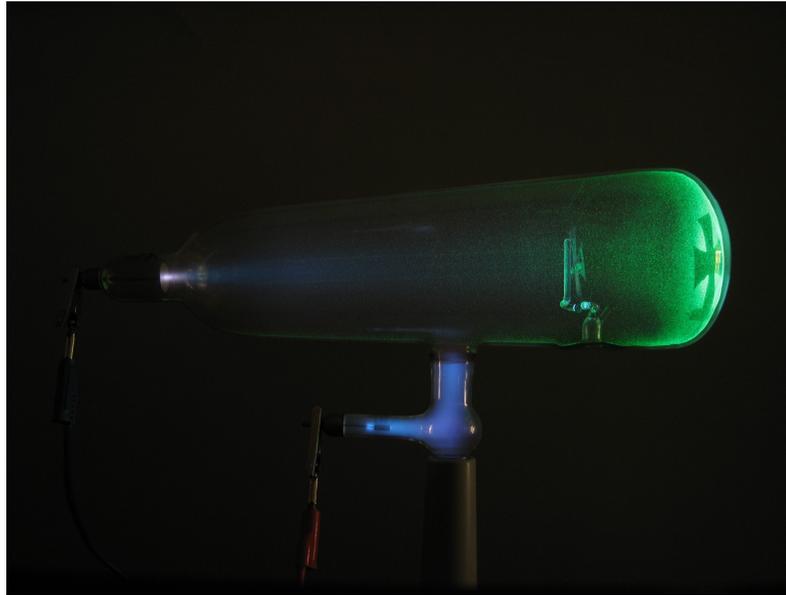
38.25 An apparatus used to produce x rays, similar to Röntgen's 1895 apparatus.

Electrons are emitted thermionically from the heated cathode and are accelerated toward the anode; when they strike it, x rays are produced.



Descoberta do electrão

J. J. Thomson, 1897

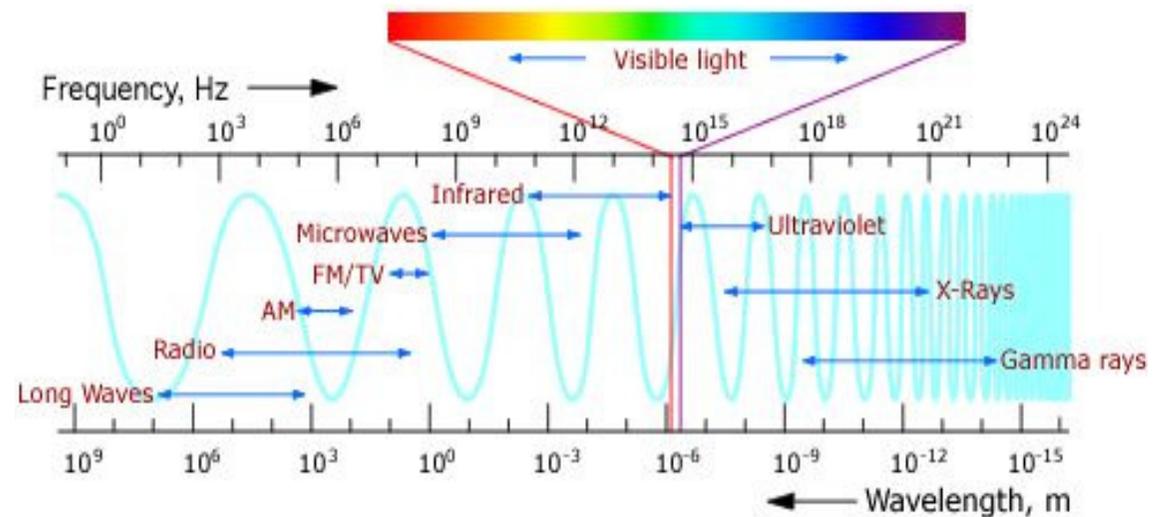
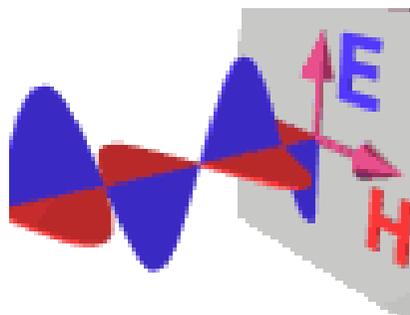
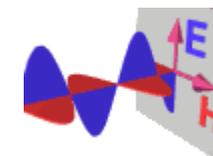
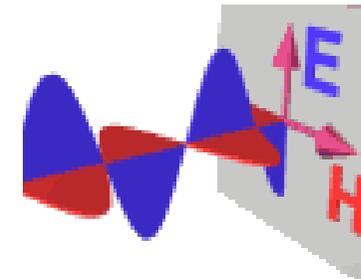
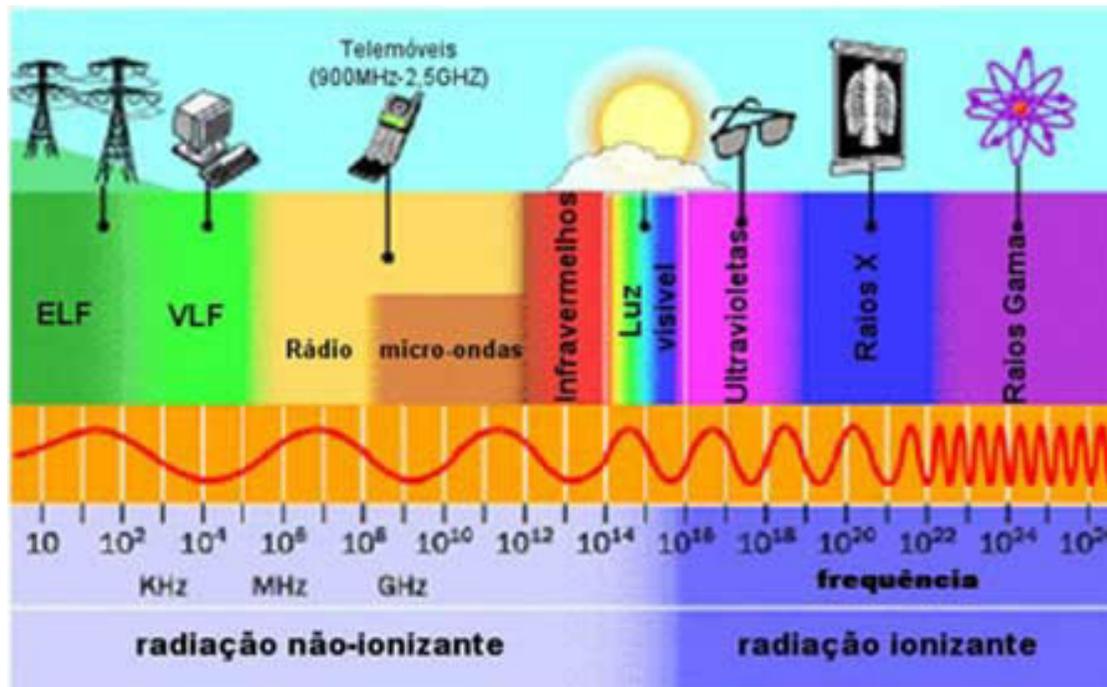


Electrão: partícula fundamental carregada de electricidade negativa (cujo valor corresponde ao simétrico da carga elementar, $1,6 \times 10^{-19}$ C) que entra na constituição de todos os átomos na natureza e é responsável pelas forças de ligação entre átomos nas moléculas.

No modelo padrão, o electrão é um leptão, junto com o muão, o tau e os neutrinos.

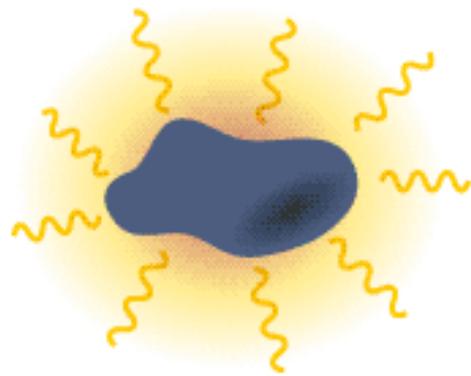
A massa do electrão é de $9,109 \times 10^{-31}$ kg ou $511,0$ keV/ c^2 , onde c representa o valor da velocidade da luz no vácuo. A massa de um electrão em repouso é cerca de 1840 vezes inferior à massa do átomo de hidrogénio, o mais leve dos elementos.

Espectro Electromagnético



Radiação do corpo negro

Emissão de radiação electromagnética pelos “sólidos”

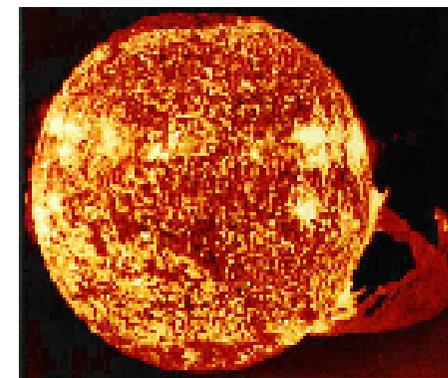
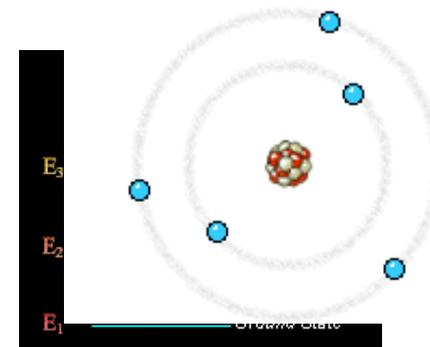
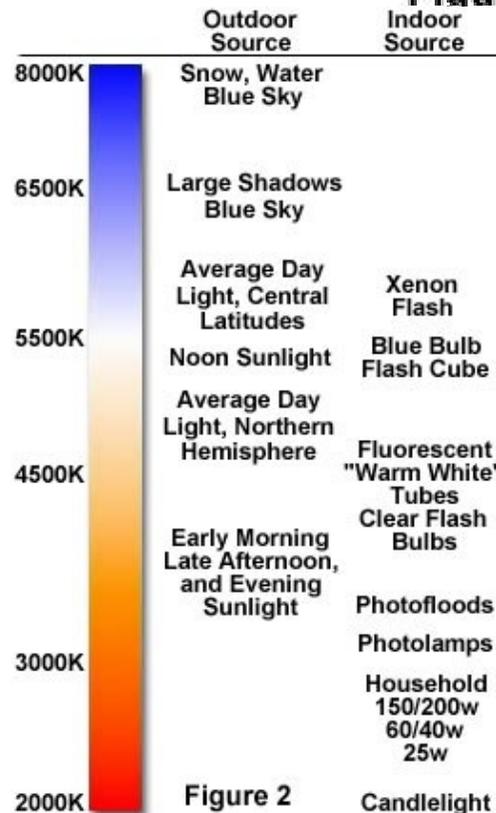
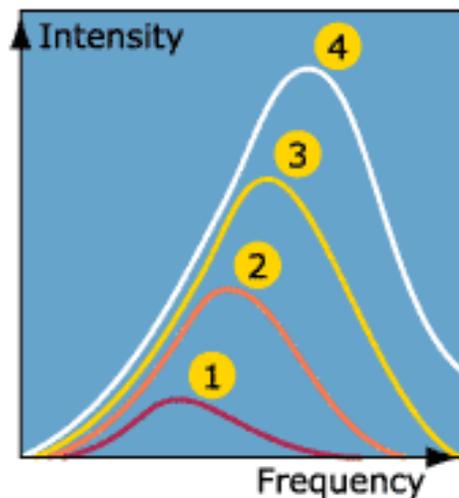


Color Temperature of a Black-Body Radiator

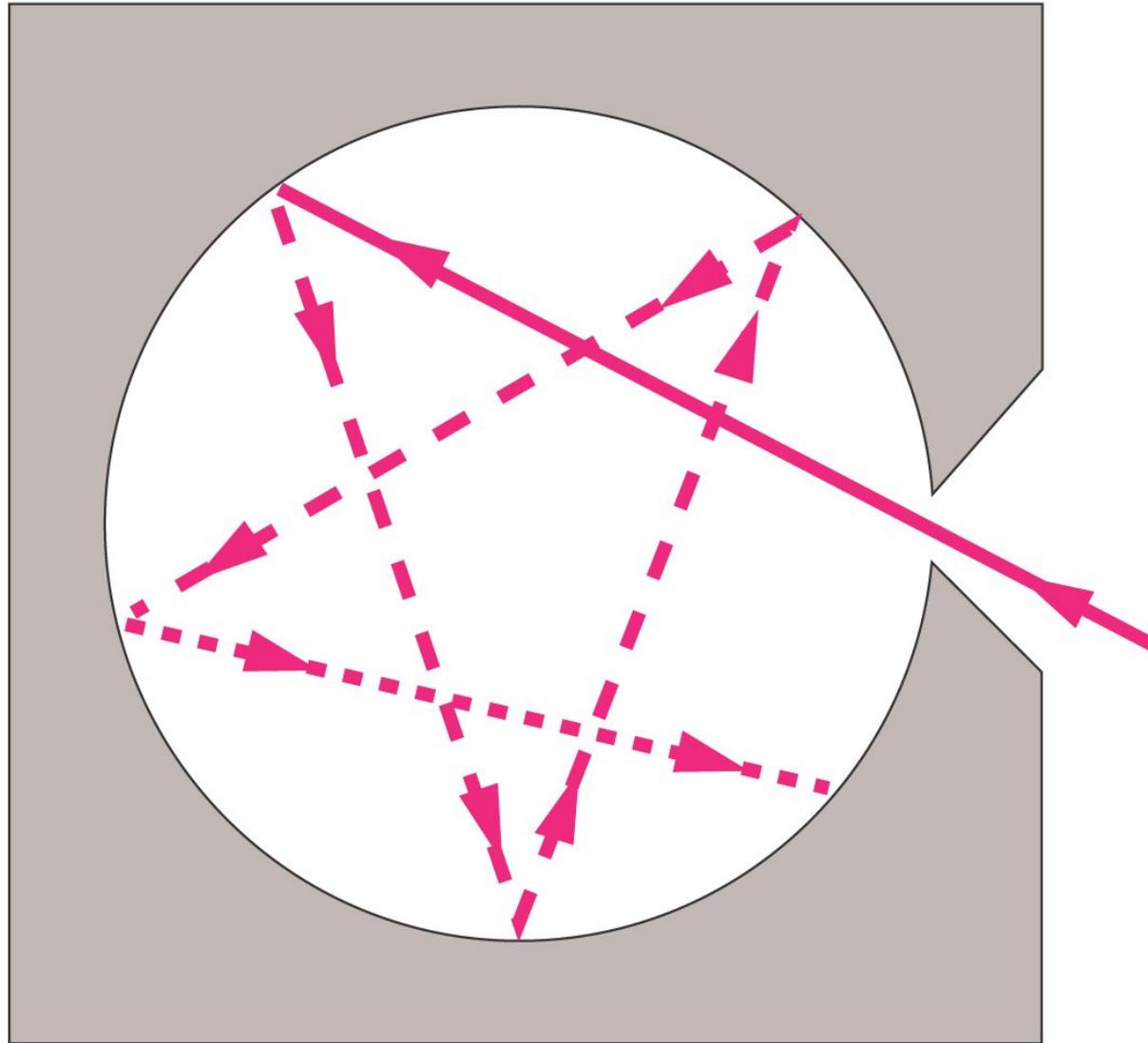


Figure 1

- 1 550°C » Dark Red
- 2 800°C » Cherry Red
- 3 1000°C » Yellow
- 4 1200°C » White

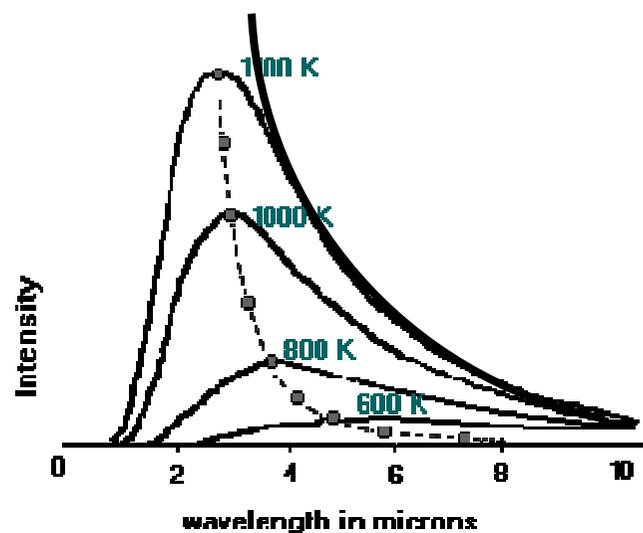
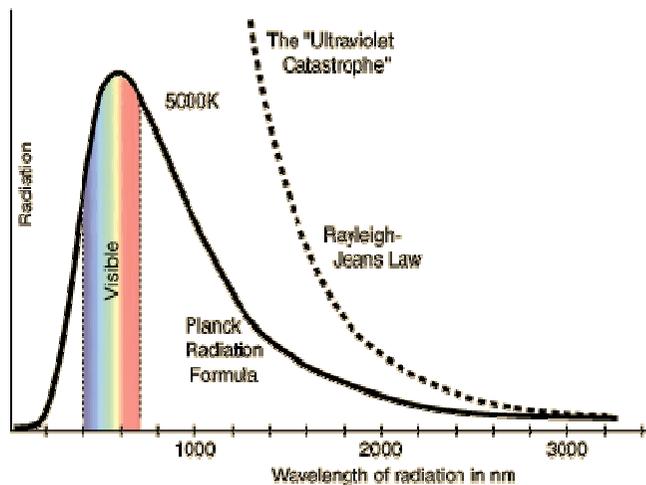


Cavidade “corpos negro”



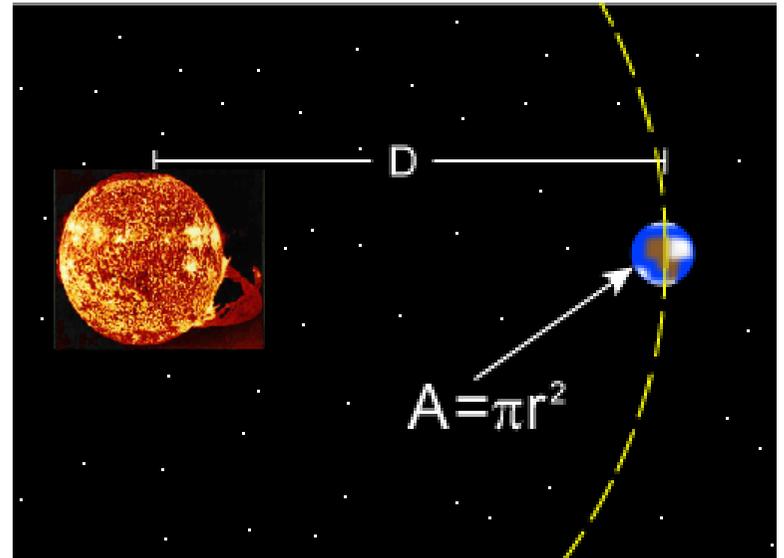
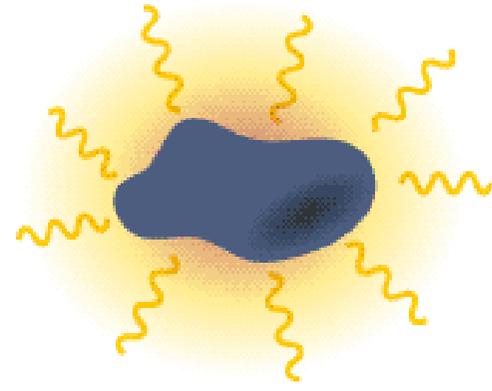
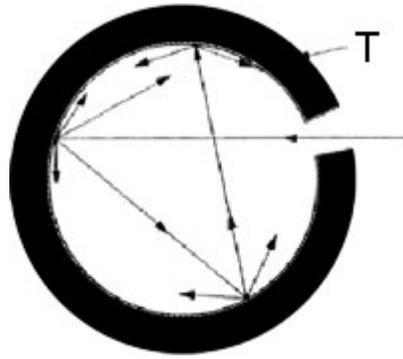
Problema “maior” da Física no início do séc. XX

Como explicar a distribuição de energia na radiação do corpo negro.

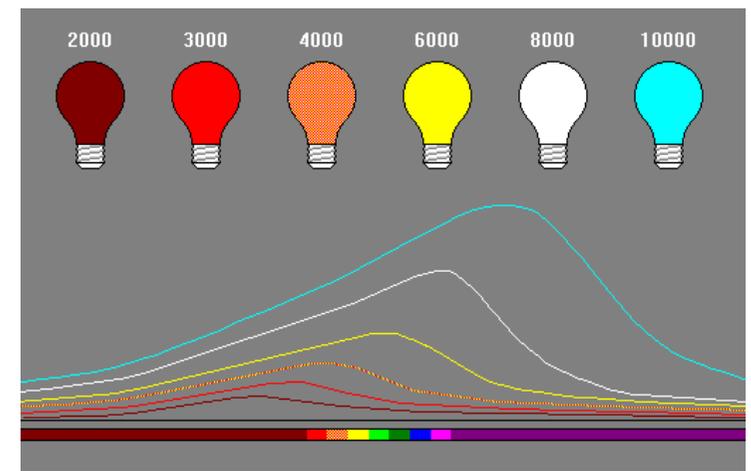
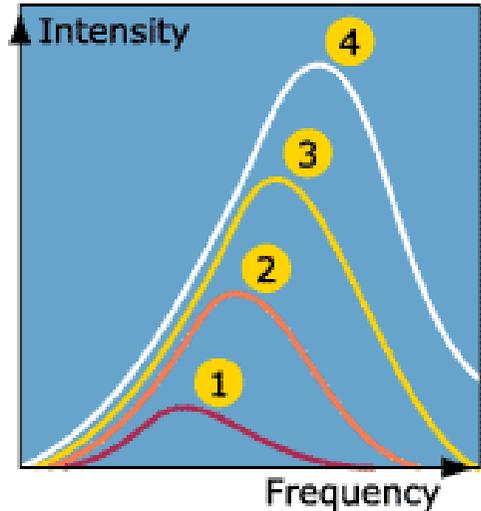


- **Corpo negro:** radiador integral, substância que absorve completamente qualquer radiação que nele incida (o negro-de-fumo aproxima-se bastante do corpo negro ideal);
- Uma cavidade fechada, a uma dada temperatura (“**corpo negro**”), com uma pequena abertura, emite um espectro de radiação contínuo.
- A Física Clássica prevê que a cavidade deve emitir mais radiação de menor comprimento de onda do que de maior comprimento de onda. **Porém, não era isso o que se observava.**

Exemplos de “corpos negros”

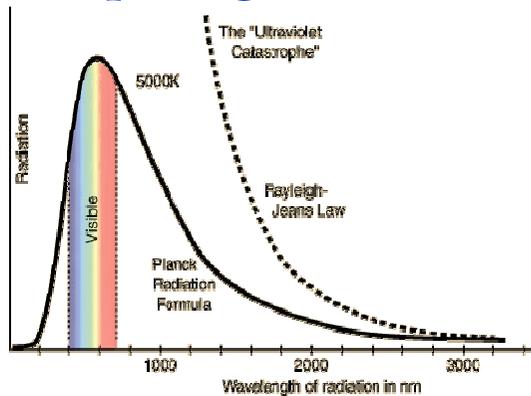


- 1 550°C » Dark Red
- 2 800°C » Cherry Red
- 3 1000°C » Yellow
- 4 1200°C » White



Radiação do corpo negro: hipótese de Planck

Irradiância espectral do corpo negro

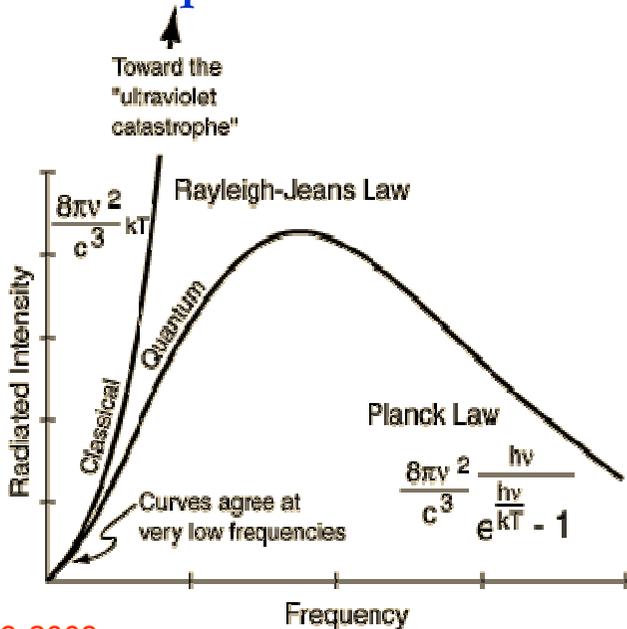


Emitância espectral $S(\lambda)$, $S(\nu)$: potência radiada por unidade de área e por unidade de comprimento de onda/frequência.

Hipótese quântica (Planck, 1900, de forma *ad hoc*)

A energia é emitida/absorvida em “pacotes” (quanta)

Comparação teoria clássica vs teoria quântica



$$E = h\nu$$

frequency of radiation, sometimes written as f giving expression $E = hf$.
Quantum energy of a photon.

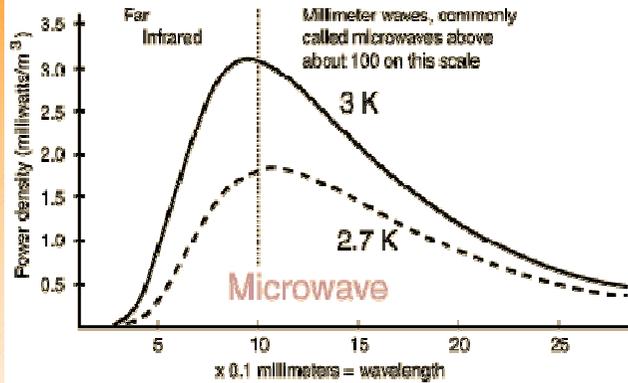
$$h = \text{Planck's constant} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Joule}\cdot\text{sec} = 4.136 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

Energy per unit volume per unit wavelength

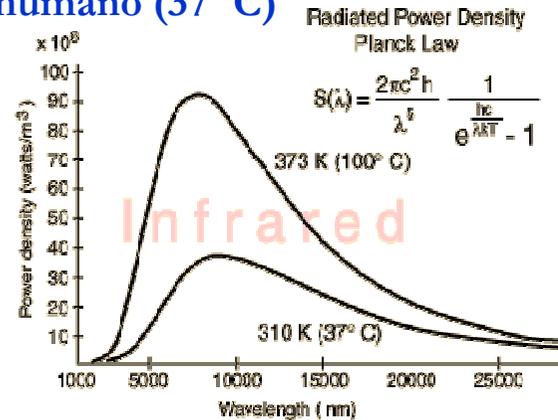
$$S_\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

Exemplos de curvas de radiação de vários “corpos negros”

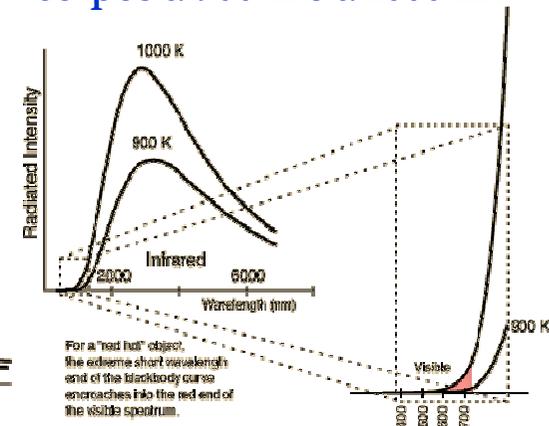
Radiação cósmica de fundo
~3 K e ~2,7 K



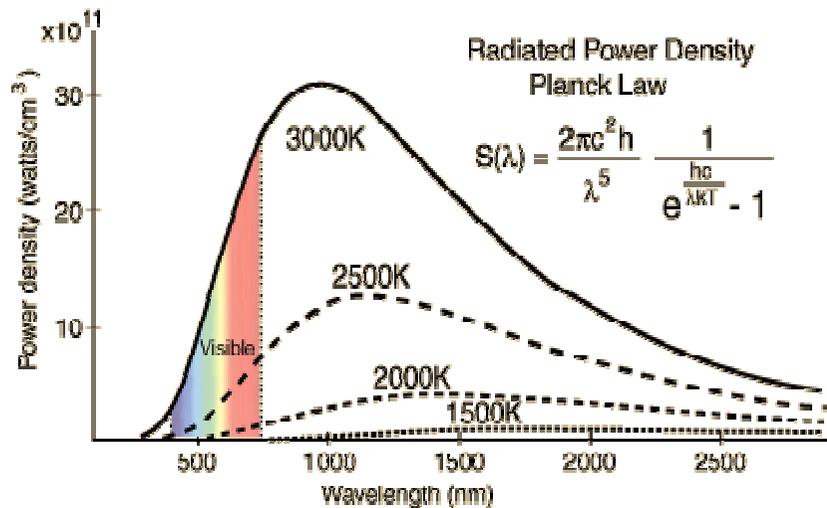
Emitância espectral:
corpo a 100 °C e corpo humano (37 °C)



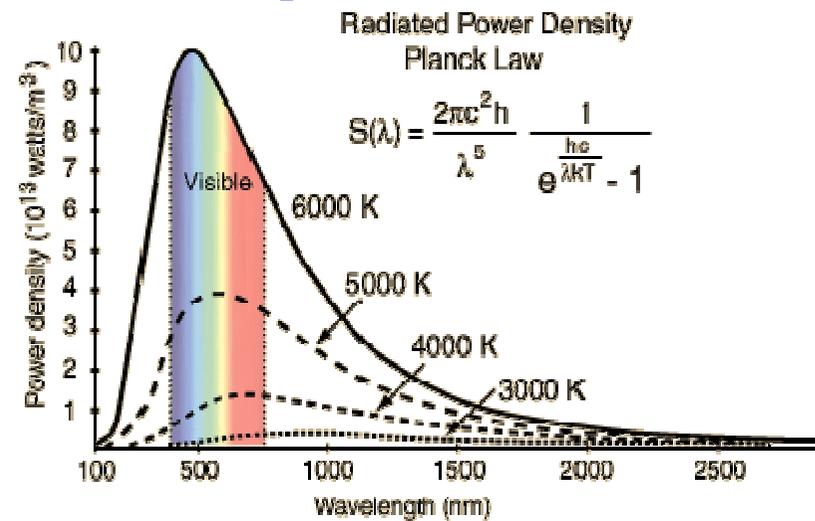
Emitância espectral
corpos a 900 K e a 1000 K



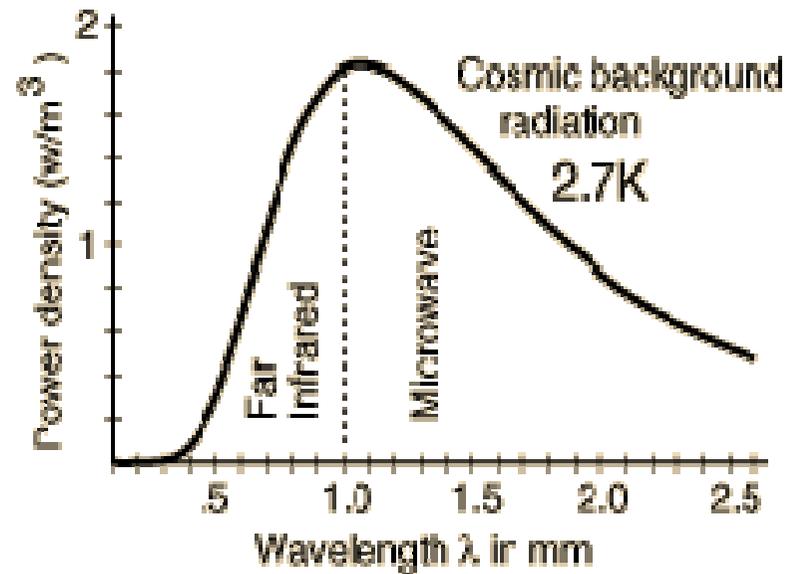
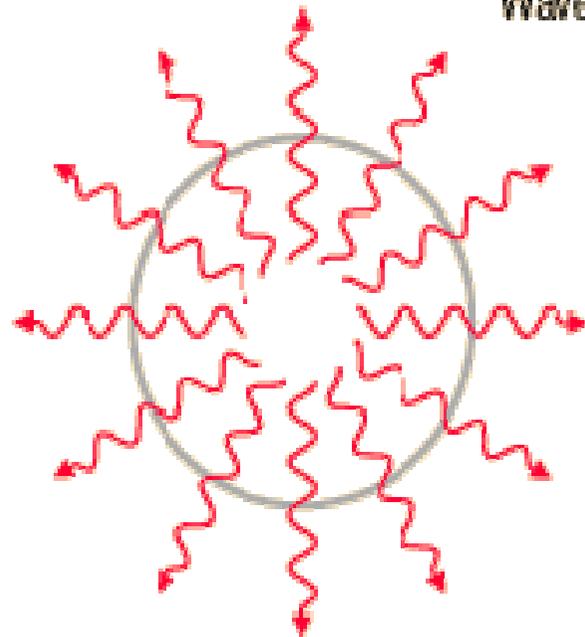
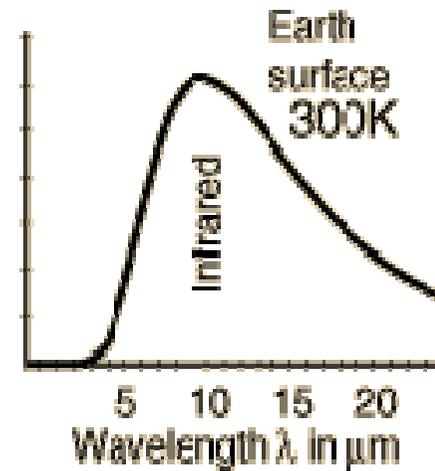
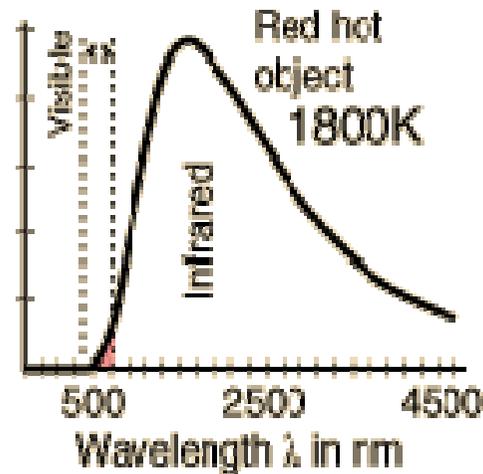
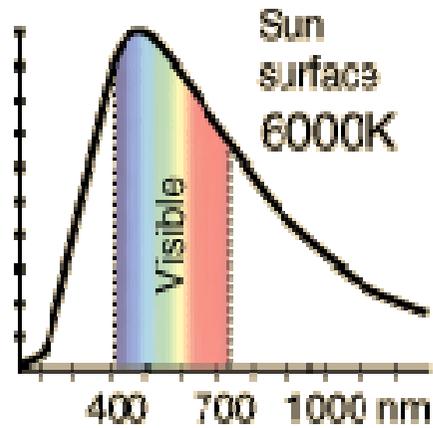
Emitância espectral de um corpo a ~3000 K



Emitância espectral do Sol

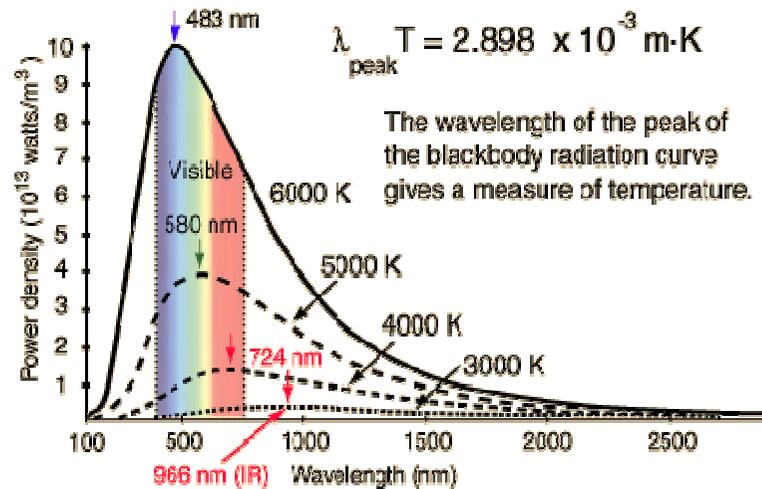


Radiação cósmica de fundo, ~2,725 K

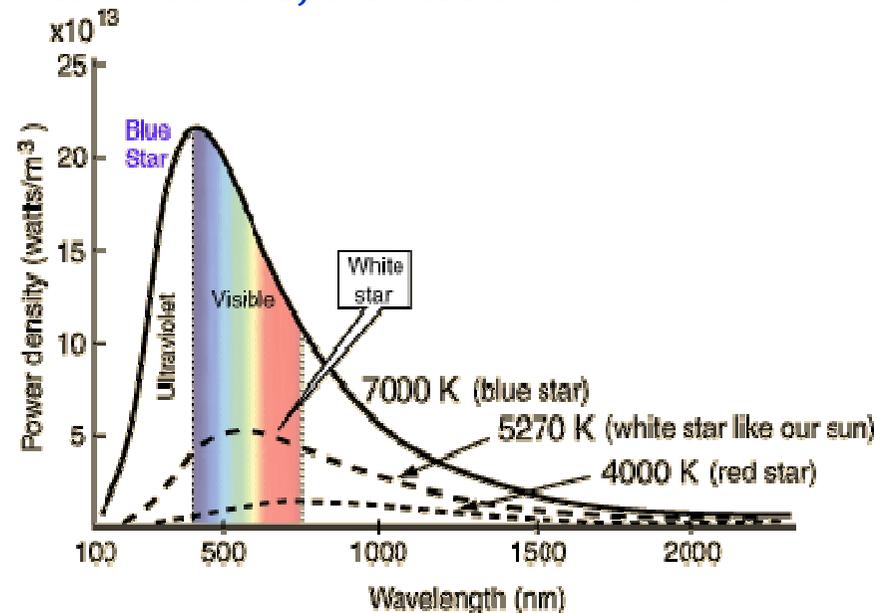


Corpo negro: leis de Wien e de Stefan-Boltzmann. Estrelas

Lei do deslocamento de Wien



Estrelas azuis, brancas e vermelhas



Lei de Stefan-Boltzmann (emitância, W/m²)

A emitância radiante (potência por unidade de área, $E(T)=P/A$) das paredes de uma cavidade, em cujo interior a radiação de corpo negro está em equilíbrio, obtém-se a partir de $S(\lambda)$:

$$\frac{dP}{d\lambda} \frac{1}{A} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)} \rightarrow \frac{P}{A} = 2\pi hc^2 \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)}$$

$$x = \frac{hc}{\lambda kT} \quad dx = \frac{-hc}{\lambda^2 kT} d\lambda \rightarrow \frac{P}{A} = \frac{2\pi (kT)^4}{h^3 c^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{(e^x - 1)} dx$$

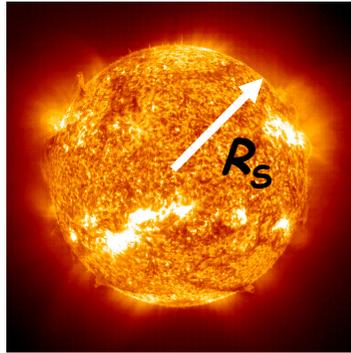
$$\frac{P}{A} = \frac{2\pi^5 k^4}{15 h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4 \quad \int_0^\infty \frac{x^3}{(e^x - 1)} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

$\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ é a constante de Stefan-Boltzmann.

Exercícios de aplicação da lei de Stefan-Boltzmann:

1. Durante a noite, a superfície da Terra perde energia por radiação. Assuma que a temperatura do solo é 10 °C, e que este se comporta como um corpo negro. Qual é a taxa de perda de energia por metro quadrado? Se a noite estiver clara, o solo arrefece mais fortemente, podendo formar-se geada, do que no caso de uma noite com elevada nebulosidade, formando-se «apenas» orvalho. Porquê?
2. Os astrónomos às vezes determinam o tamanho de uma estrela pela lei de Stefan-Boltzmann. Determine o raio da estrela Capela a partir dos seguintes dados: fluxo da luz da estrela que chega à Terra $1,2 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2$; distância à estrela $4,3 \times 10^{17} \text{ m}$; temperatura na «superfície» da estrela 5200 K. Assuma que a estrela se comporta como um corpo negro.

Espectro de emissão do Sol



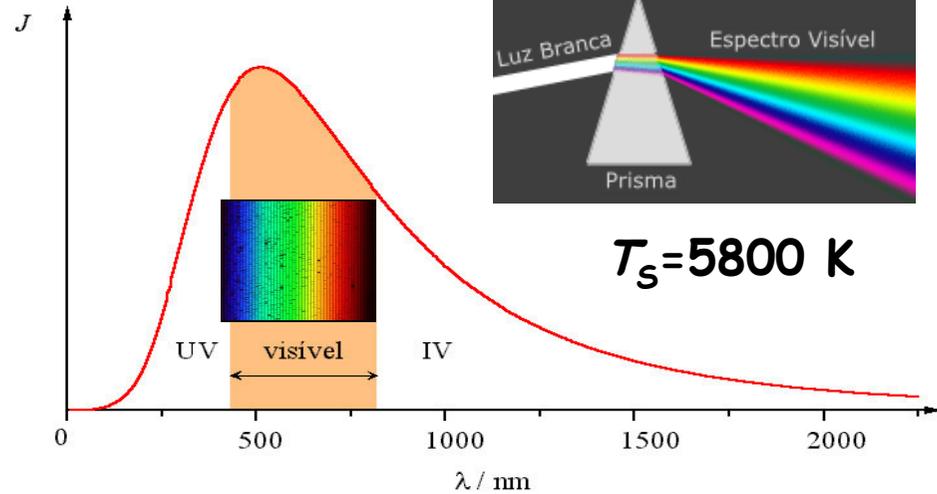
Potência emitida pelo Sol (P_S):

$$P_S = \sigma T_S^4 (4\pi R_S^2)$$

$$P_S = 3.839 \times 10^{26} \text{ W}$$

$$(R_S = 700 \text{ Mm})$$

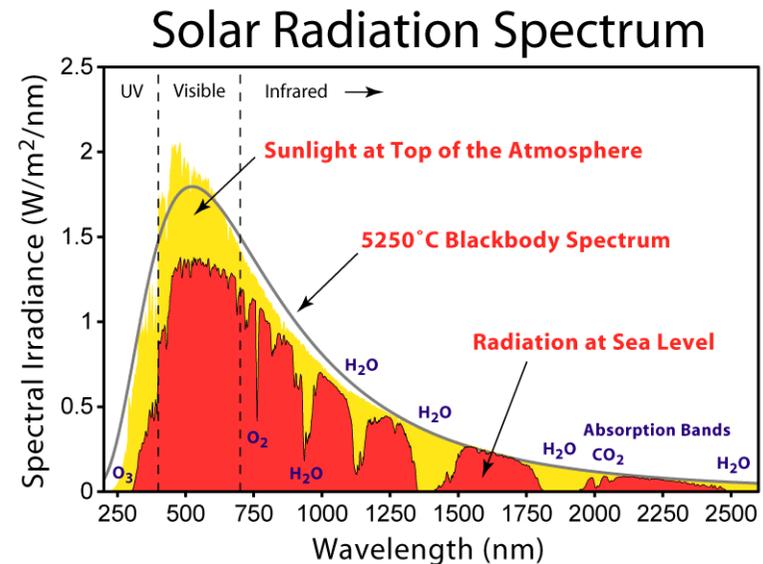
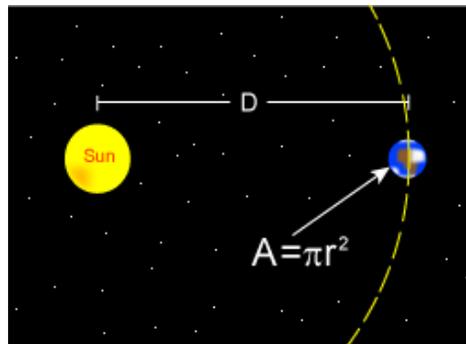
$$\sigma = 5,6 \times 10^{-8} \text{ J}/(\text{s m}^2 \text{K}^4)$$



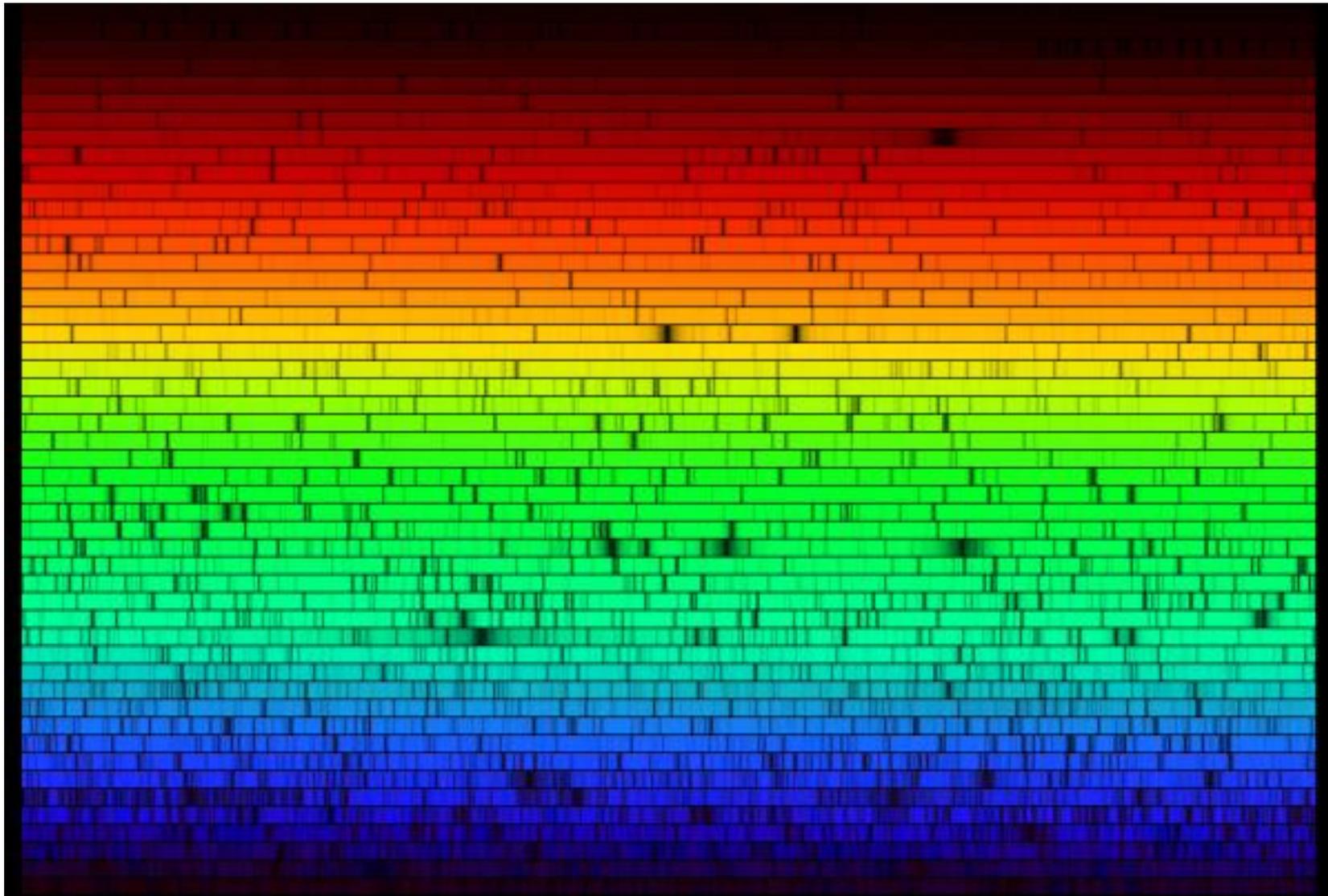
Constante solar: quantidade de energia que atinge o limite superior da atmosfera por unidade de área, perpendicularmente aos raios solares, por unidade de tempo, cujo valor médio é: $1,4 \text{ kW}/\text{m}^2$.

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

Vídeo: experiência de William Herschel - determinação da potência emitida pelo Sol;

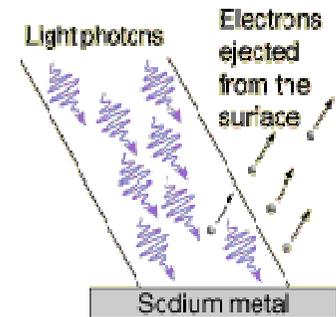
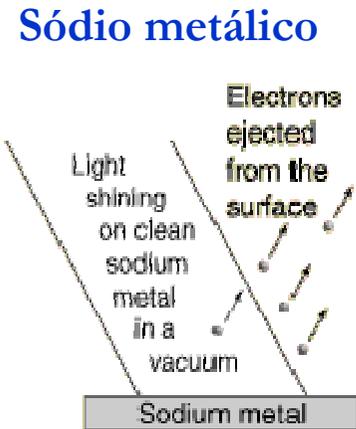
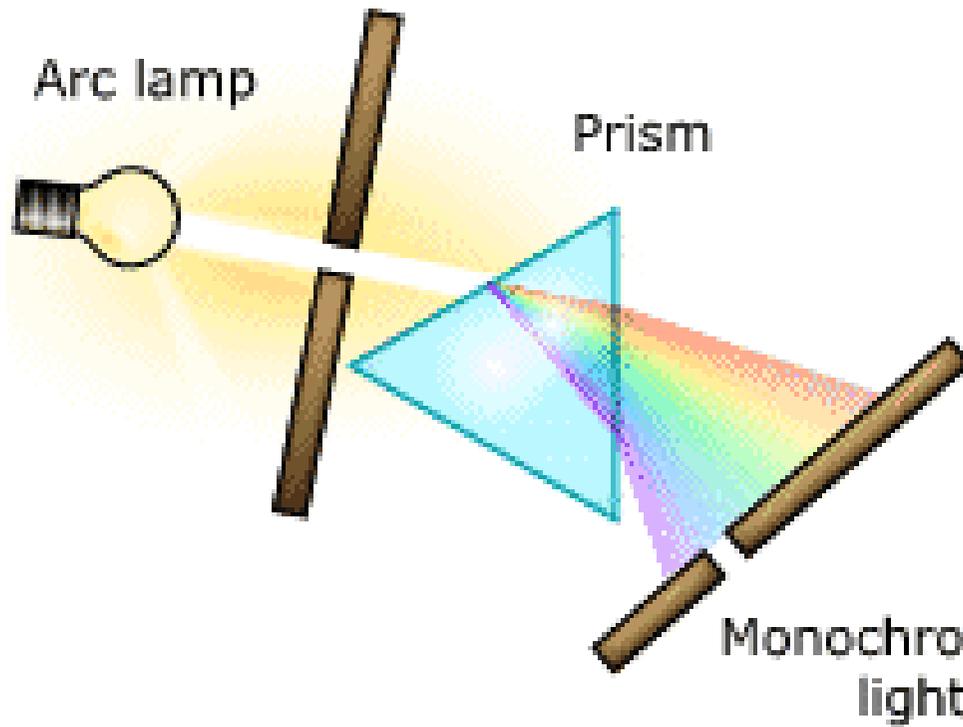


Espectro de Emissão do Sol na banda visível



Efeito Fotoelétrico

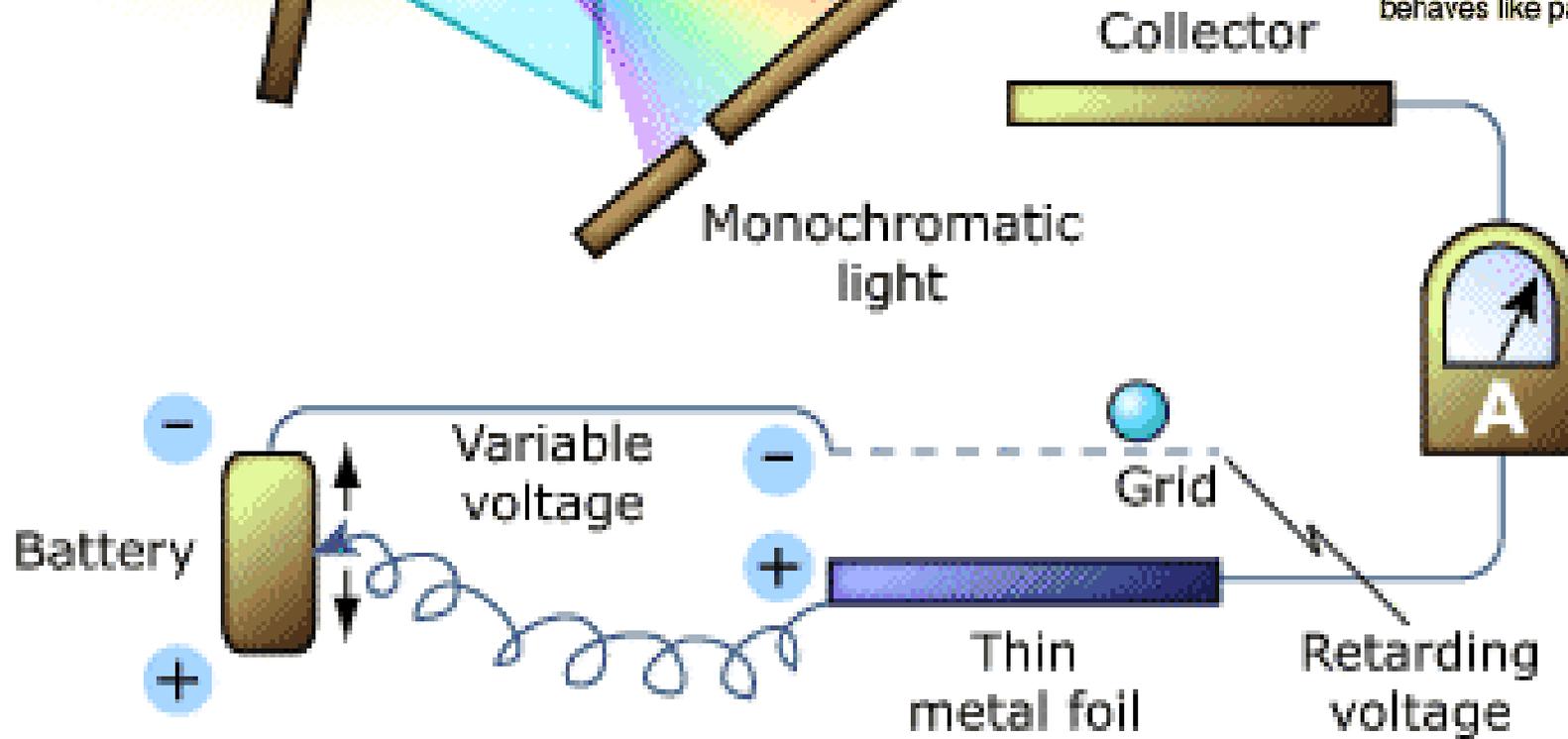
Efeito fotoelétrico



Photon energy

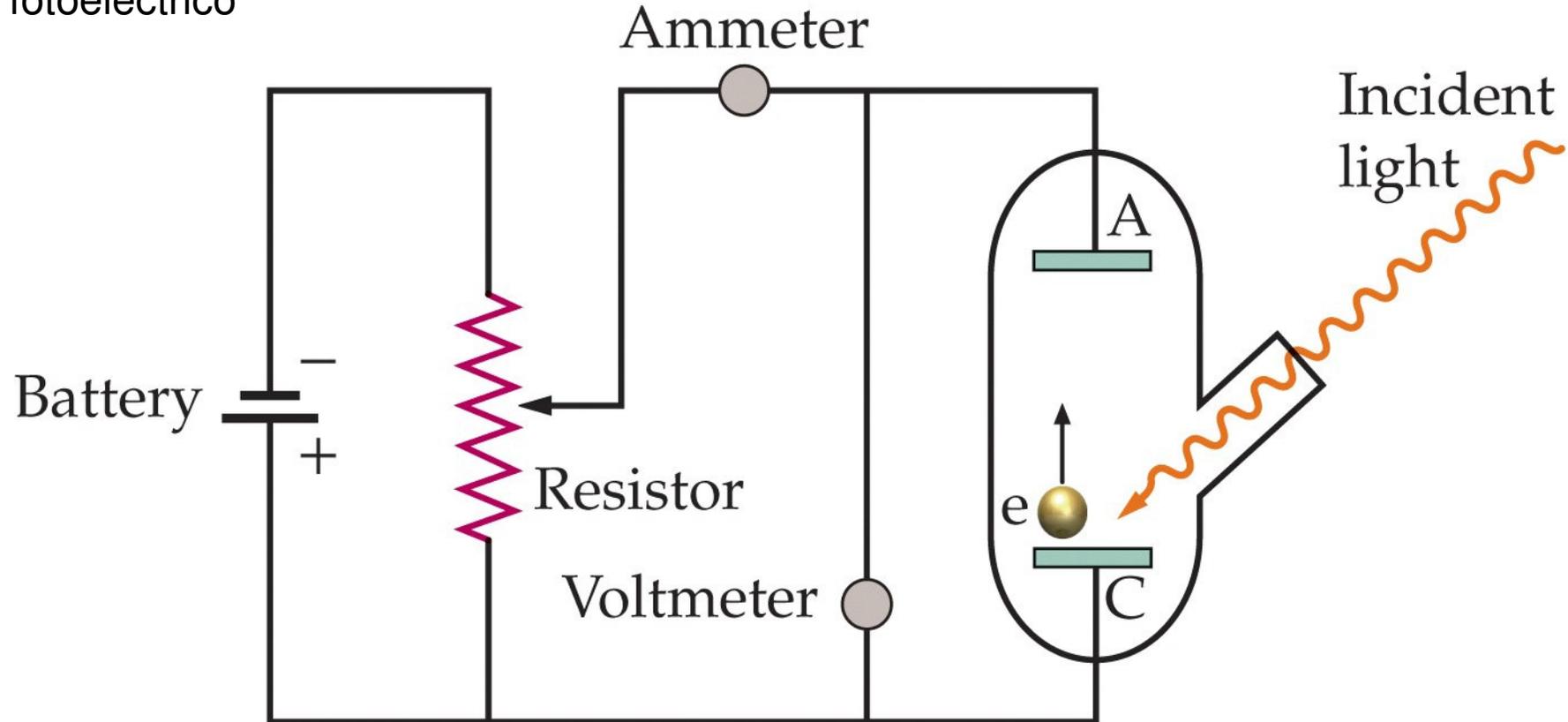
$$E = hv$$

explains the experiment and shows that light behaves like particles.



Efeito fotoelétrico

Esquema de uma montagem para observação e caracterização do efeito fotoelétrico



[Alexandre Edmond Becquerel](#), 1839

[Willoughby Smith](#), 1873

[Heinrich Hertz](#), 1887

[Wilhelm Hallwachs](#)

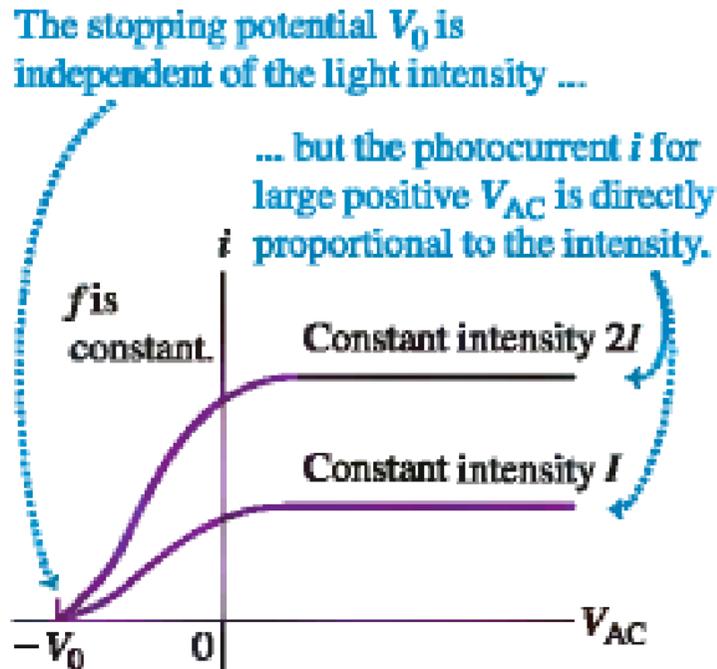
[Philipp Eduard Anton von Lenard](#), 1900

<http://www.acolytescience.co.uk/origins/herz.html>

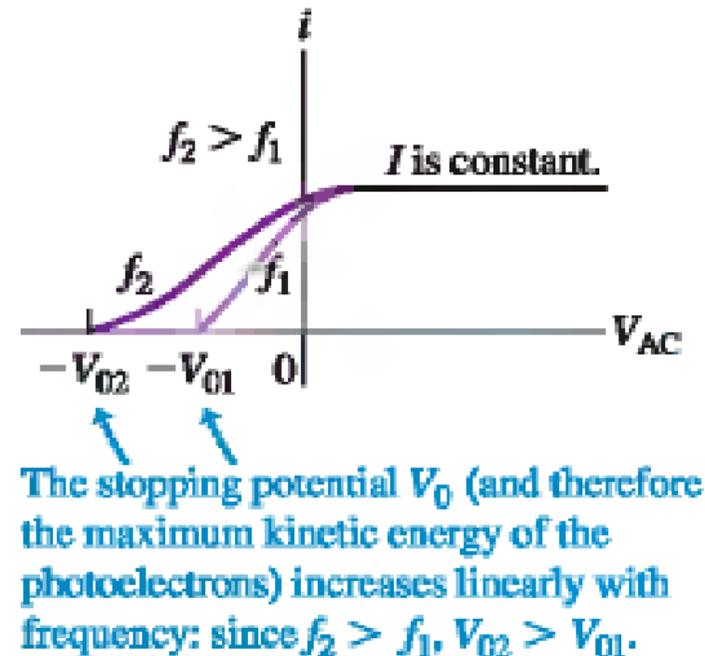
Efeito fotoelétrico

Intensidade de corrente eléctrica em função da intensidade luminosa e da frequência da radiação incidente.

38.4 Photocurrent i for a constant light frequency f as a function of the potential V_{AC} of the anode with respect to the cathode.

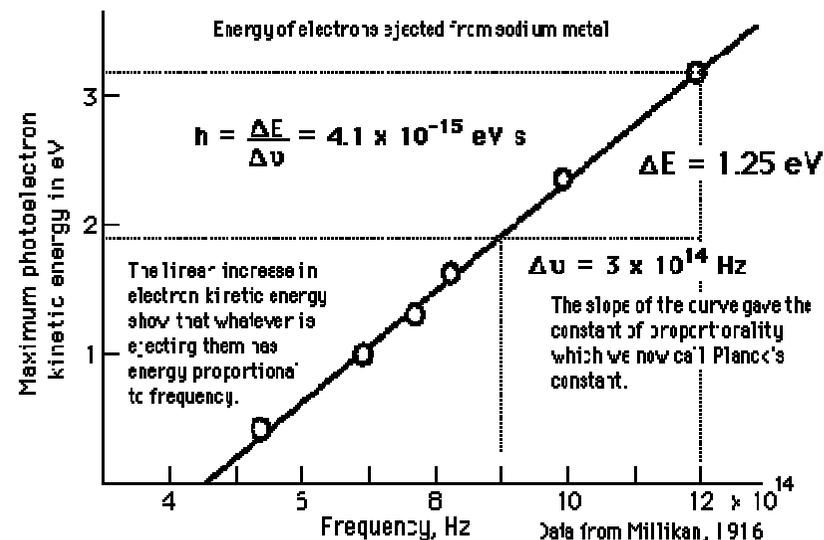
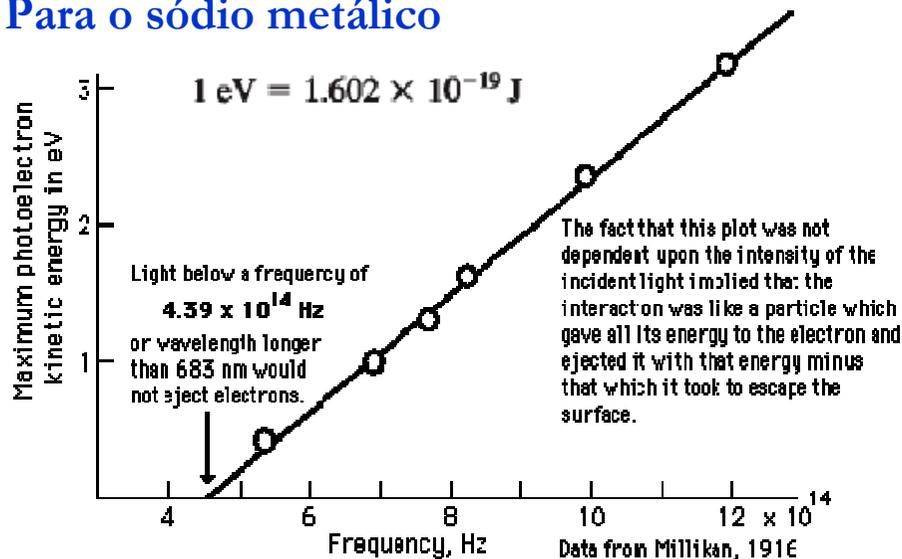


38.5 Photocurrent i for two different light frequencies f_1 and f_2 as functions of the potential V_{AC} of the anode with respect to the cathode.



Explicação do efeito fotoelétrico (Einstein)

Para o sódio metálico



Equações de Einstein para o efeito fotoelétrico

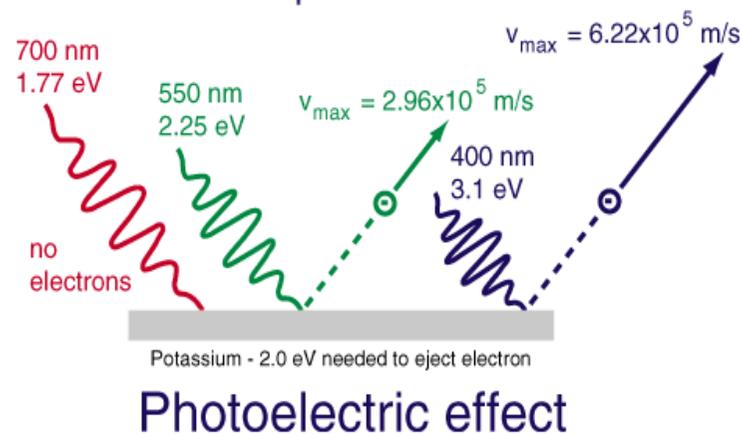
$$E_{c,máx} = h\nu - \phi, \quad E_{c,máx} = \frac{1}{2} m_e v_{e,máx}^2$$

$$eV_{0,p} = E_{c,máx} = h\nu - \phi \quad (\phi: \text{função de trabalho})$$

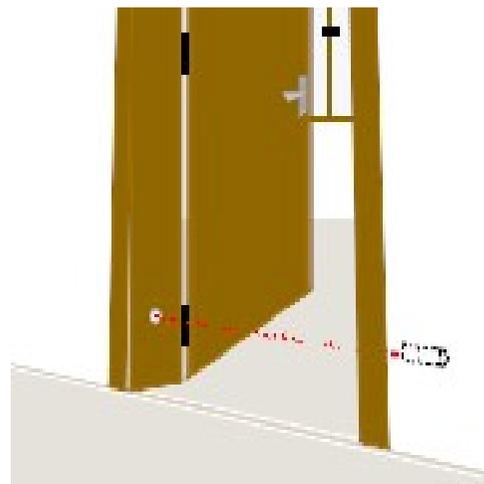
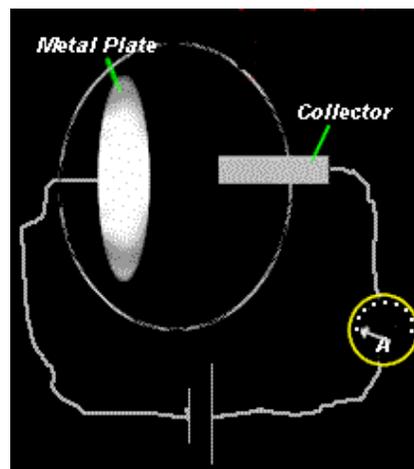
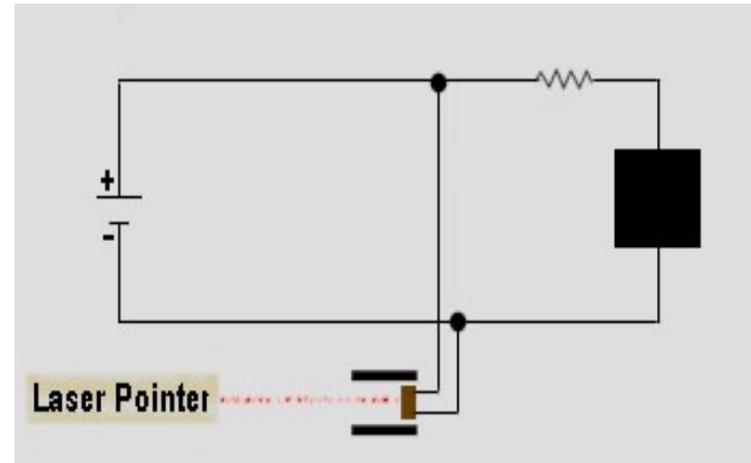
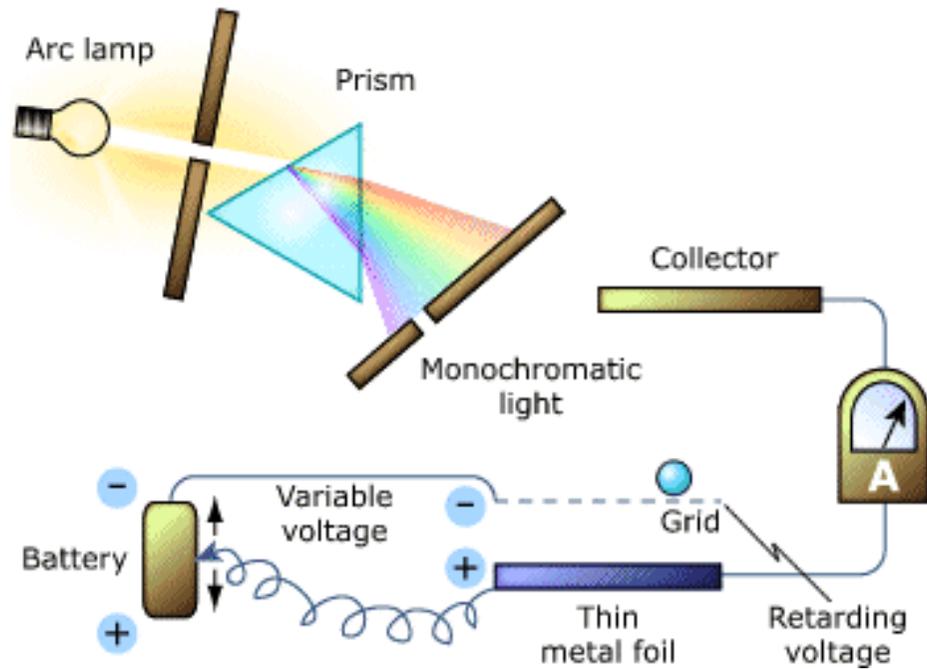
O mínimo de energia requerida para ejectar um electrão de uma superfície designa-se **função de trabalho** de extracção do material, ϕ . O limiar de energia para o sódio metálico corresponde ao comprimento de onda 683 nm. Usando este valor de comprimento de onda, obtém-se através da relação de Planck, para a função de trabalho do sódio 1,82 eV.

Caso do potássio metálico

$$E_{\text{photon}} = h\nu$$



Aplicações do efeito Fotoelétrico

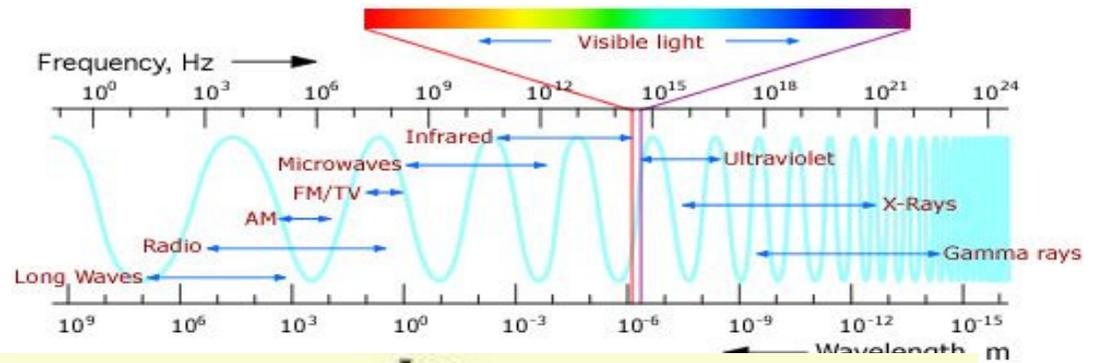
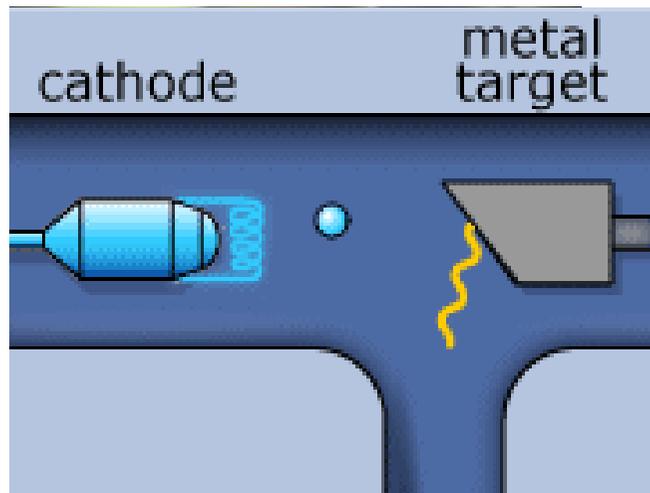
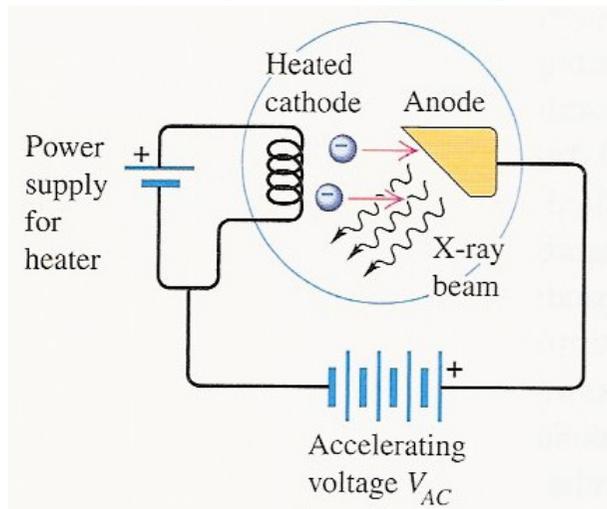


Efeito de Compton

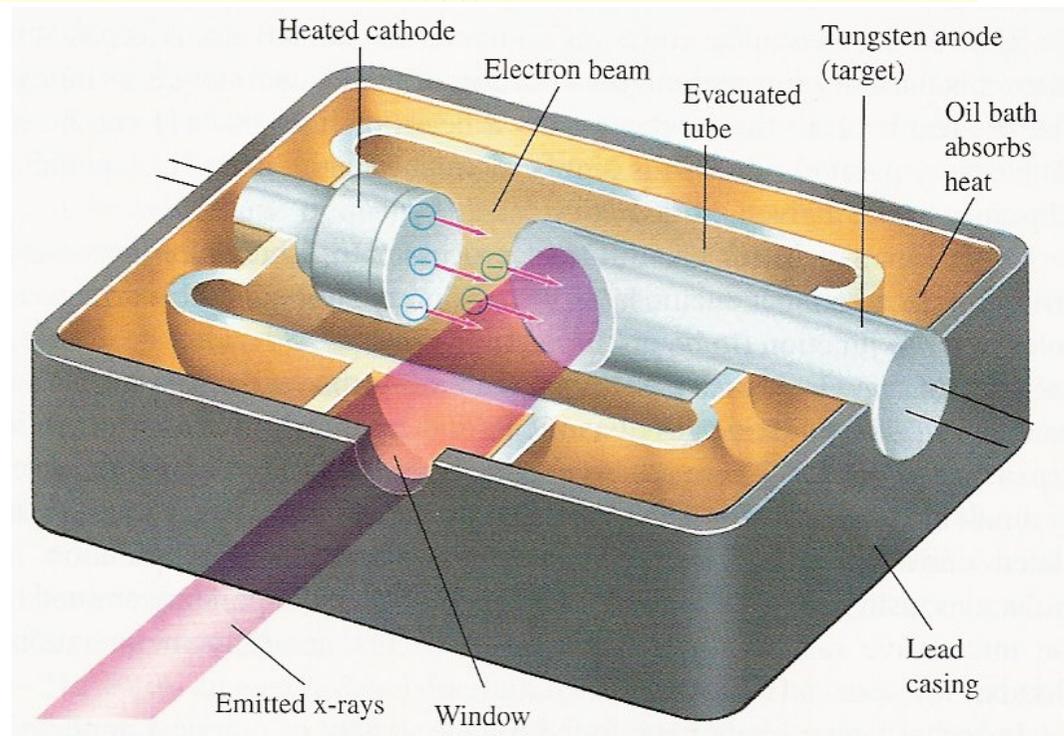
Produção de raios x

38.25 An apparatus used to produce x rays, similar to Röntgen's 1895 apparatus.

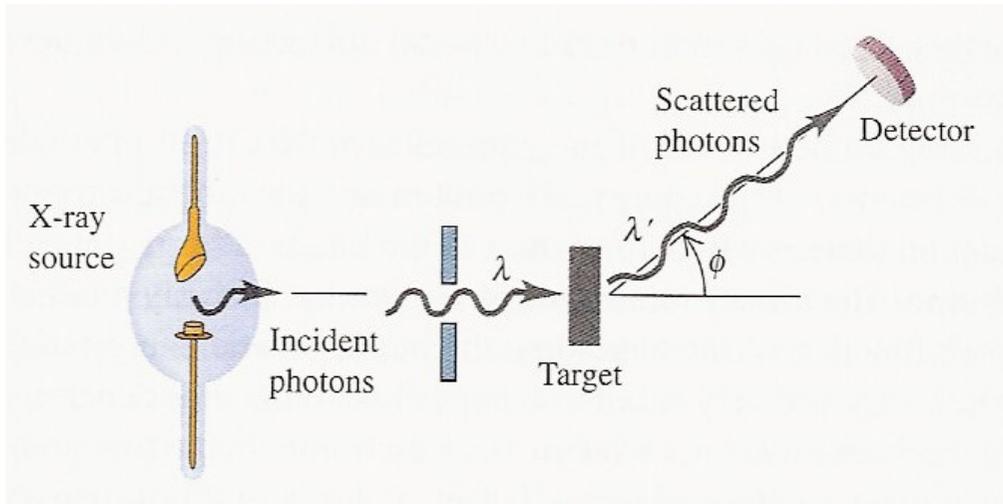
Electrons are emitted thermionically from the heated cathode and are accelerated toward the anode; when they strike it, x rays are produced.



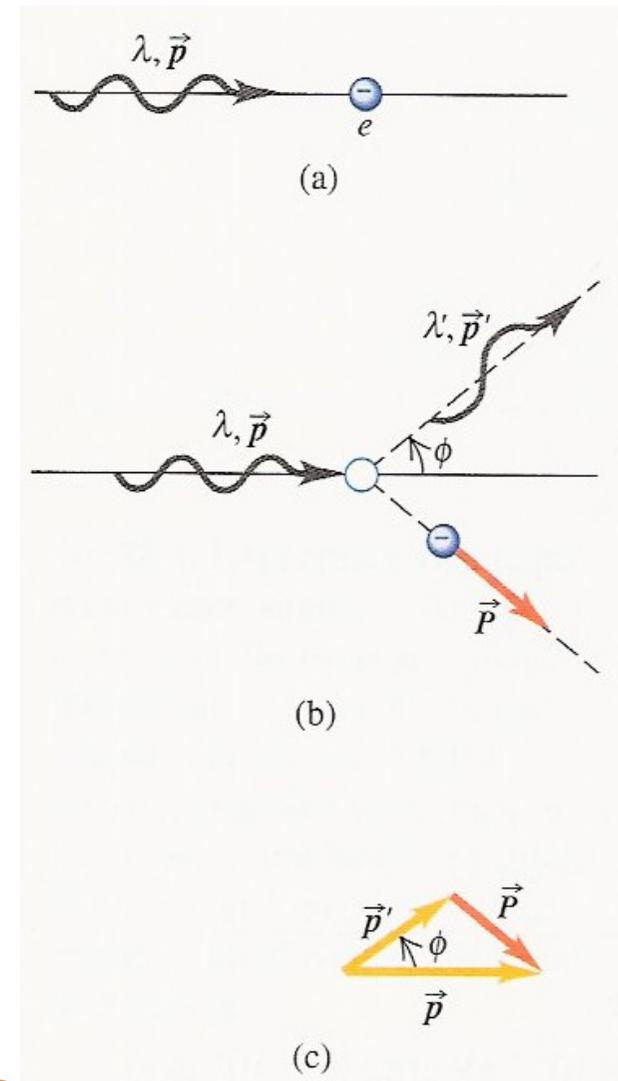
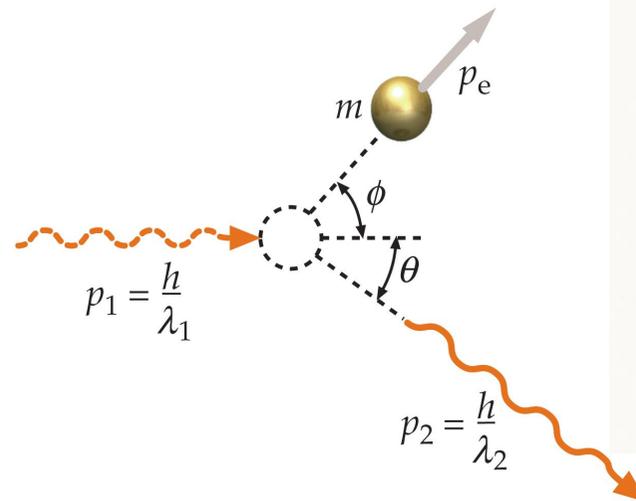
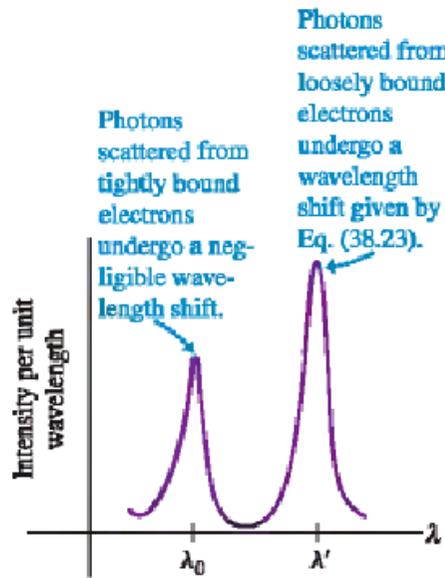
$$eV_{AC} = hf_{\text{max}} = \frac{hc}{\lambda_{\text{min}}} \quad (\text{bremsstrahlung})$$



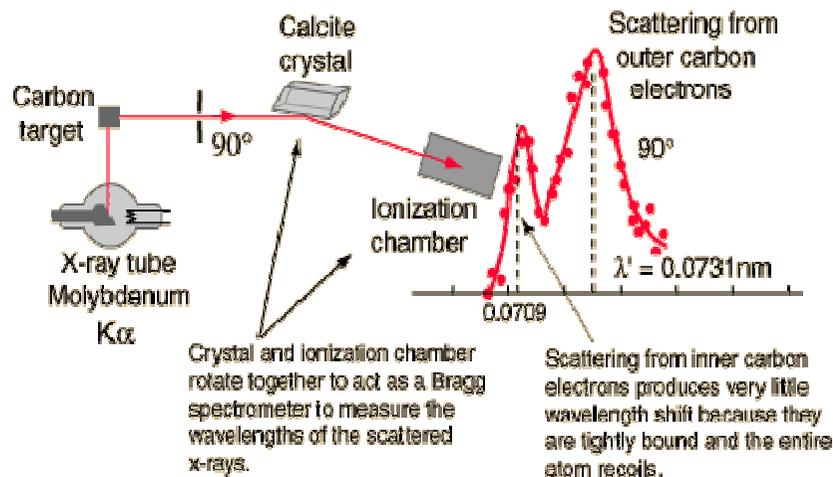
Efeito de Compton



38.28 Intensity as a function of wavelength for photons scattered at an angle of 135° in a Compton scattering experiment.



Efeito de Compton

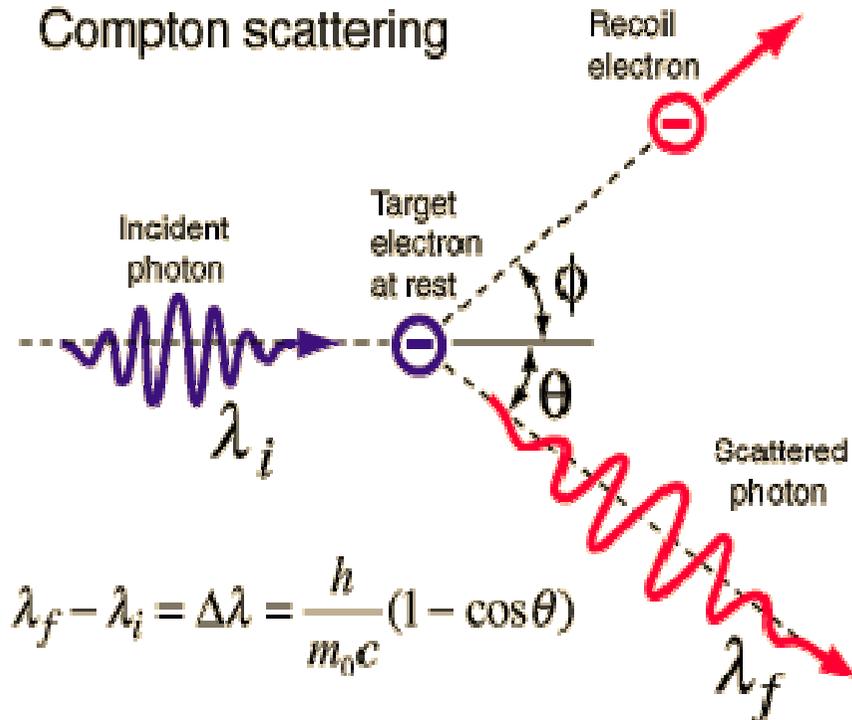


Conservação da energia e de momento

$$h\frac{c}{\lambda_i} + E_i^{\text{el}} = h\frac{c}{\lambda_f} + E_f^{\text{el}}$$

$$\vec{p}_i^{\text{fo}} + \vec{p}_i^{\text{el}} = \vec{p}_f^{\text{fo}} + \vec{p}_f^{\text{el}}$$

Compton scattering



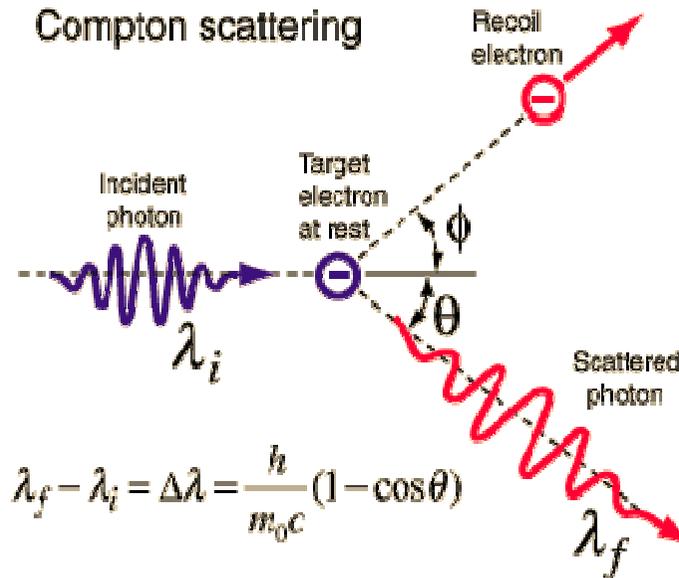
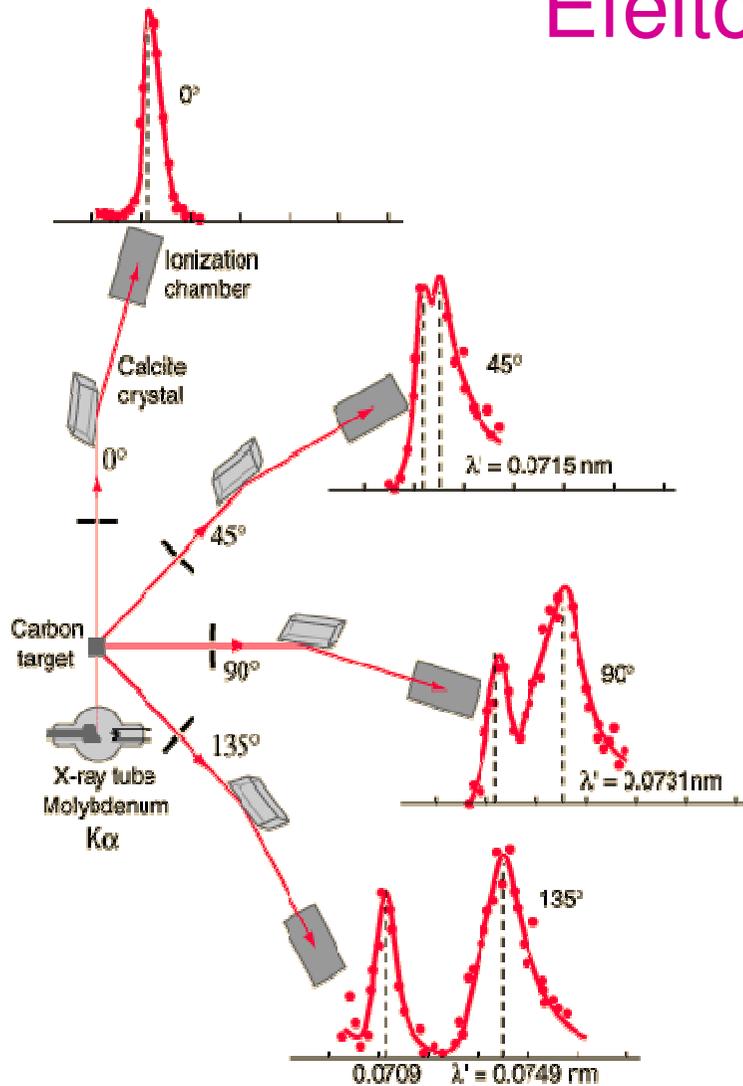
$$\lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta)$$

$$\lambda_f - \lambda_i = \lambda_c (1 - \cos\theta)$$

Comprimento de onda de Compton:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$$

Efeito de Compton



$$\lambda_f - \lambda_i = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos\theta)$$

$$\tan\phi = - \left[\left(1 + \frac{h\nu_i}{m_0c^2} \right) \tan\left(\frac{1}{2}\theta\right) \right]^{-1}$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0c} \text{ (comprimento de onda de Compton)}$$

A. H. Compton e A. W. Simon, *Phys. Rev.*, 97, 1710, 1925.

A. H. Compton, *Phys. Rev.*, 21, 483-502, 1923.

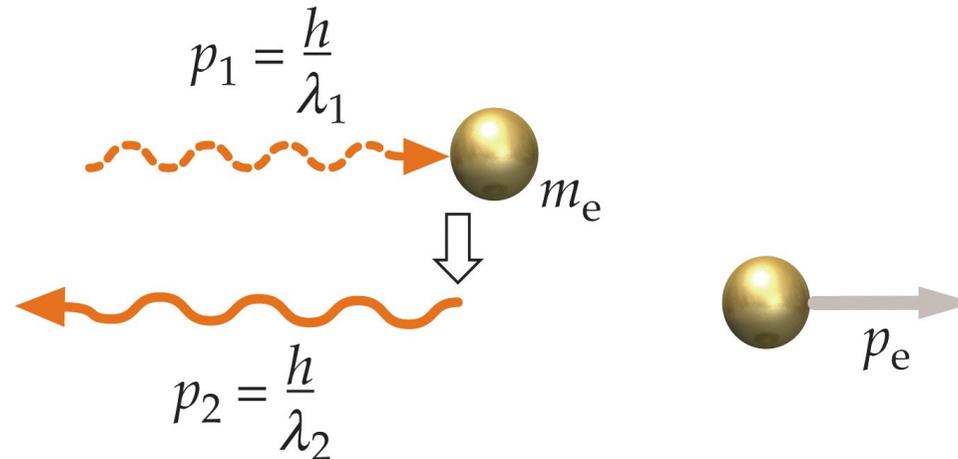
Ter presente que o fóton espalhado não é o mesmo que o fóton incidente: o fóton incidente é absorvido pelo átomo, sendo emitido um novo fóton com energia menor que o fóton incidente. Tanto quanto se sabe um fóton não pode «perder» parte da sua energia.

Efeito de Compton

Um fóton de raios x de comprimento de onda 6 pm colide frontalmente com um electrão, inicialmente em repouso.

- Em que direcção e sentido é emitido o fóton resultado da colisão? E o electrão?
- Qual o aumento de comprimento de onda do fóton emitido?
- Qual é a energia cinética do fóton após a colisão?

R: a)



R: b) 4.86 pm ($\lambda_2=10.86$ pm)

R: c) 93 keV

Nota: como a energia cinética do electrão é 93 keV, cerca de 18% da energia em repouso do electrão ($E_0=m_e c^2=511$ keV, não é válida expressão clássica da energia cinética $E_c=\frac{1}{2}m_e v^2$). Qual seria a velocidade do electrão se se aplicasse a formula não relativista da inércia cinética?

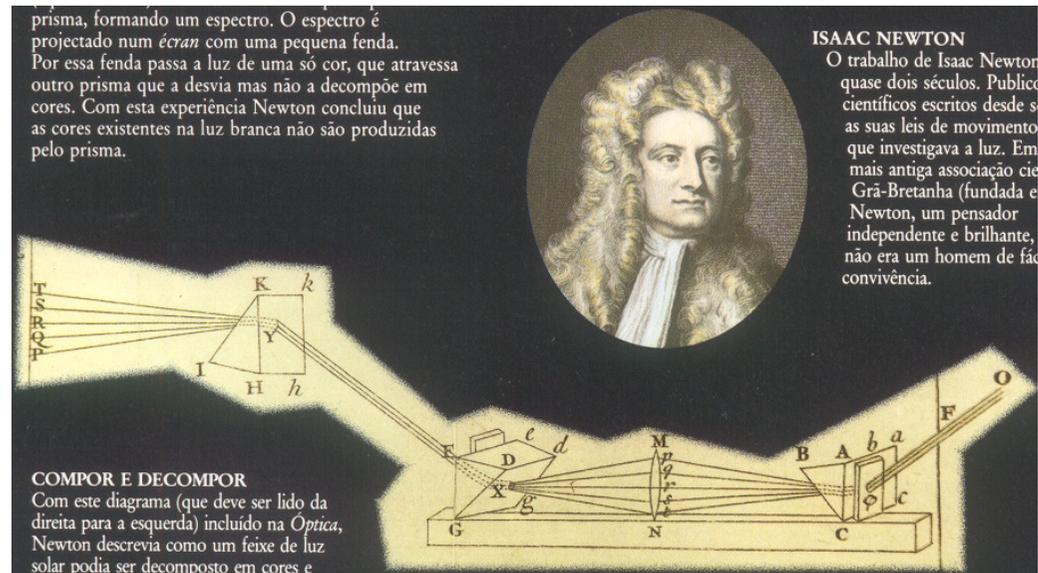
Espectros de emissão e absorção atômicos

Espectro da luz branca

Decomposição da luz branca



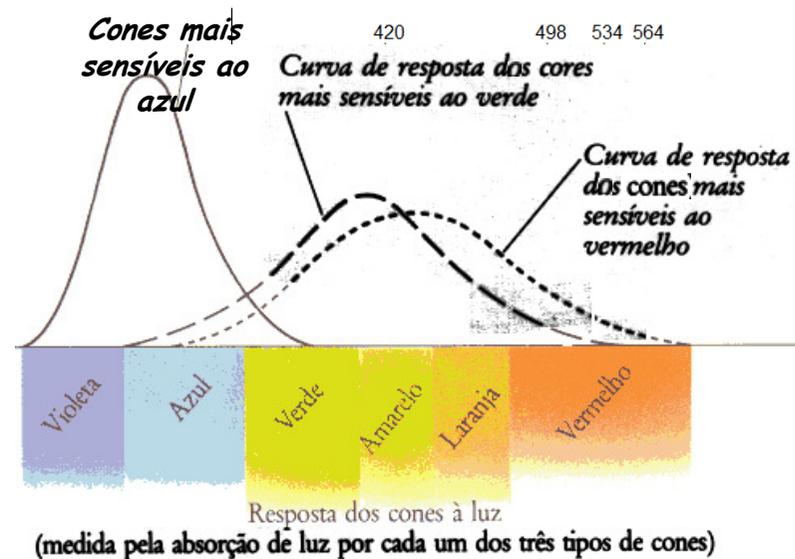
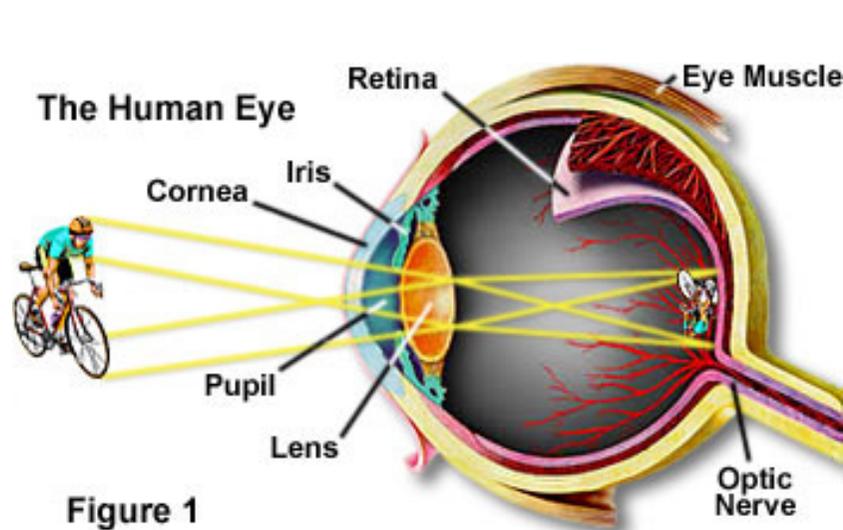
Recomposição da luz branca



Luz visível e o olho humano

O **olho** é um órgão que permite detectar a luz e transformar essa percepção em impulsos eléctricos. Os olhos mais simples não fazem mais do que detectar se as zonas ao seu redor estão iluminadas ou escuras. Os mais complexos servem para proporcionar o sentido da visão.

O cristalino, uma lente natural, focaliza a imagem. Nos seres humanos e nos outros hominídeos a retina é constituída por dois tipos de células foto-receptoras, os bastonetes, que nos dão a percepção de claro e escuro, e os cones, que nos dão a percepção das cores.



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

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

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

A percepção da cor

Luz visível: fluxo radiante capaz de estimular a retina para produzir a sensação visual. O **olho** é um órgão dos animais que permite detectar a luz e transformar essa percepção em impulsos eléctricos.

A cor é uma percepção visual provocada pela acção de um feixe de fótons sobre células especializadas da retina, que transmitem através de informação pré-processada no nervo óptico, impressões para o sistema nervoso.

A cor de um material é determinada pelas médias de frequência dos pacotes de onda que as suas moléculas constituintes reflectem. Um objecto terá determinada cor se não absorver justamente a luz correspondentes à frequência daquela cor.

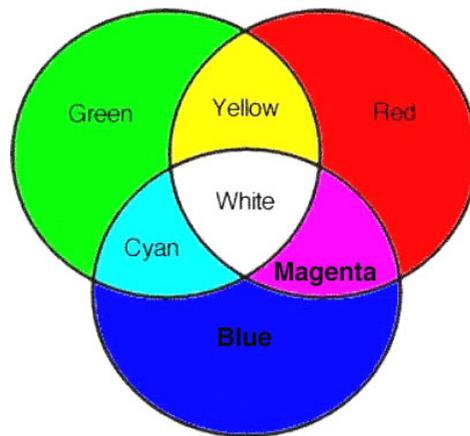
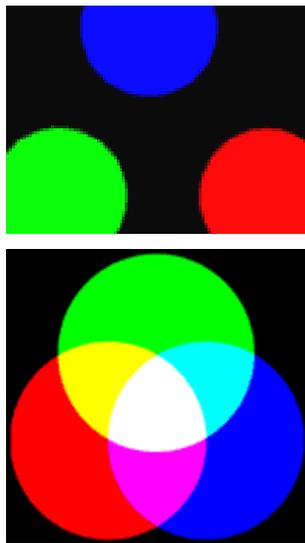
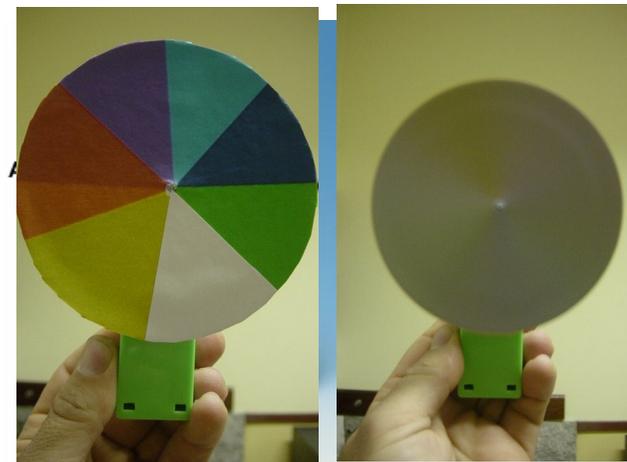


Figure 3. Additive colour mixtures of blue, green and red to produce cyan, magenta, yellow and white.

Disco de Newton



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

<http://www.youtube.com/watch?v=dmZG2UWZHuY>

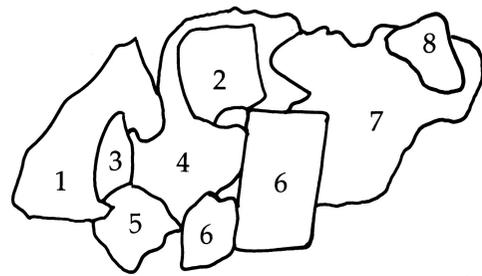
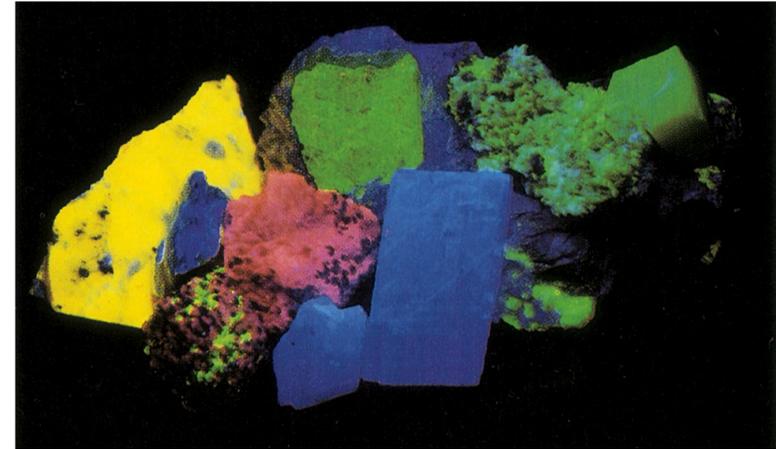
http://pt.wikipedia.org/wiki/Percep%C3%A7%C3%A3o_visual

A cor e as condições de iluminação

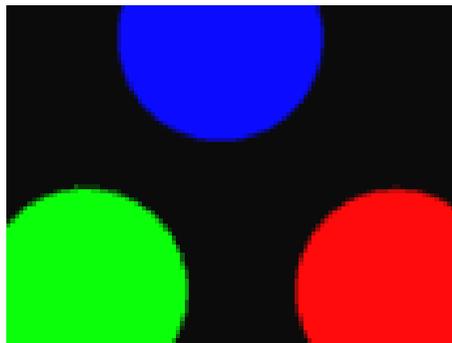
Conjunto de cristais iluminados com luz branca.



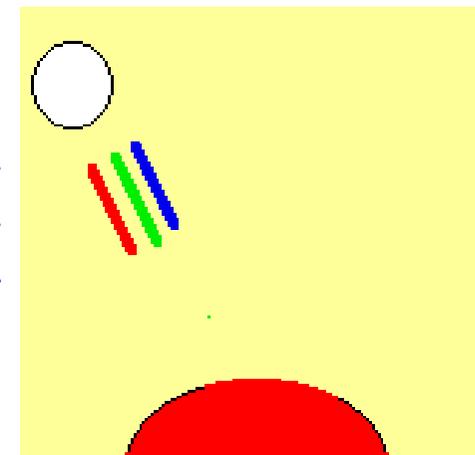
Conjunto de cristais iluminados com ultravioleta (luz negra)



1 powerlita; 2 vilemita; 3 scheelita; 4 calcita; 5 composto de calcita e vilemita; 6 calcita óptica; 7 vilemita; 8 opal.



A variação na cor é devida à fluorescência sob luz ultravioleta. Na calcita óptica tanto ocorre a fluorescência como a fosforescência.

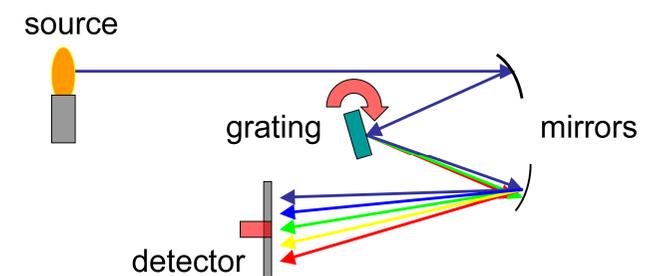
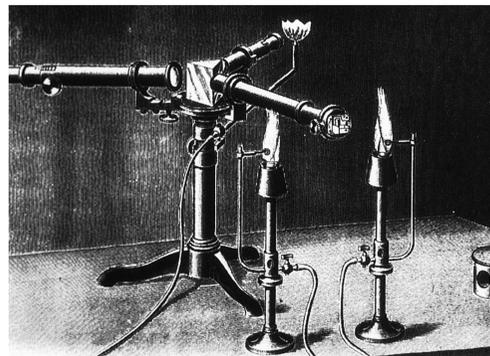
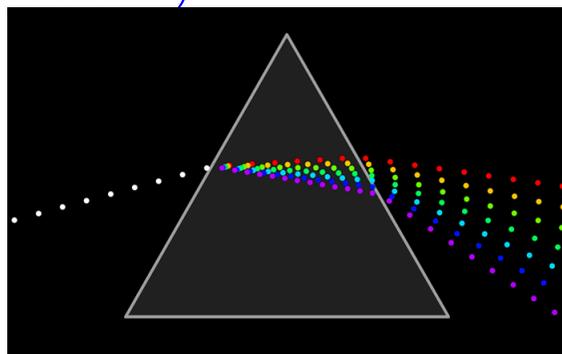
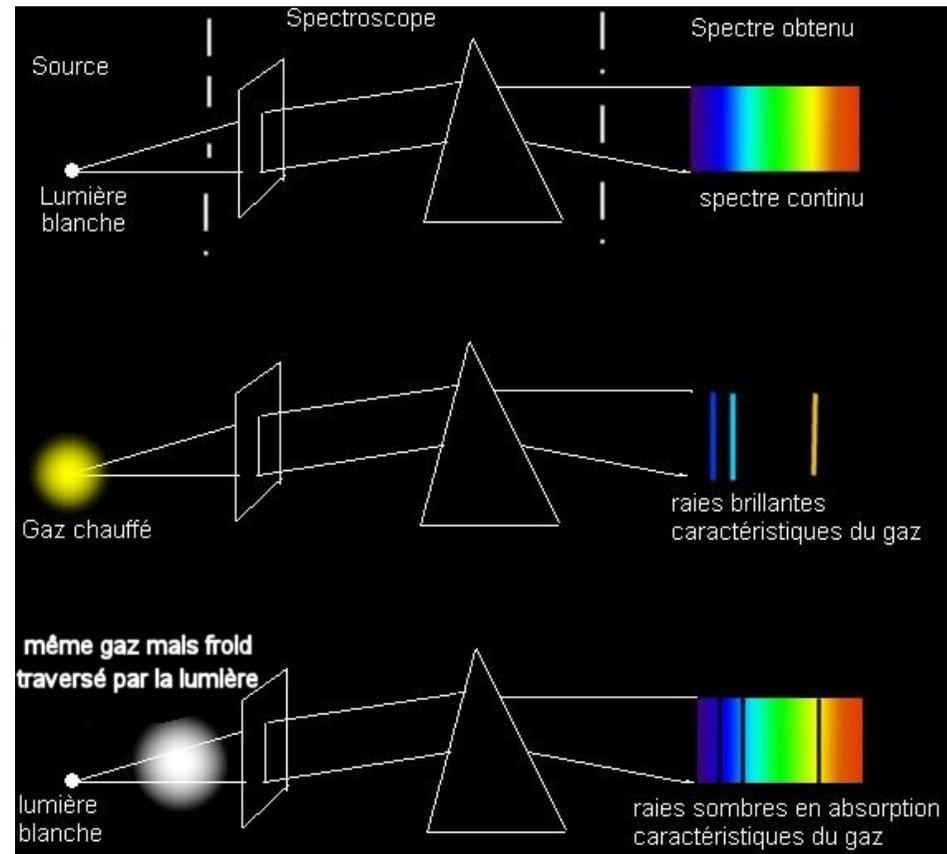


Espectroscopia

Espectroscopia: estudo das radiações luminosas por meio dos espectros (do lat. spectru-, «espectro»+gr. skope, n, «olhar»+ -ia)

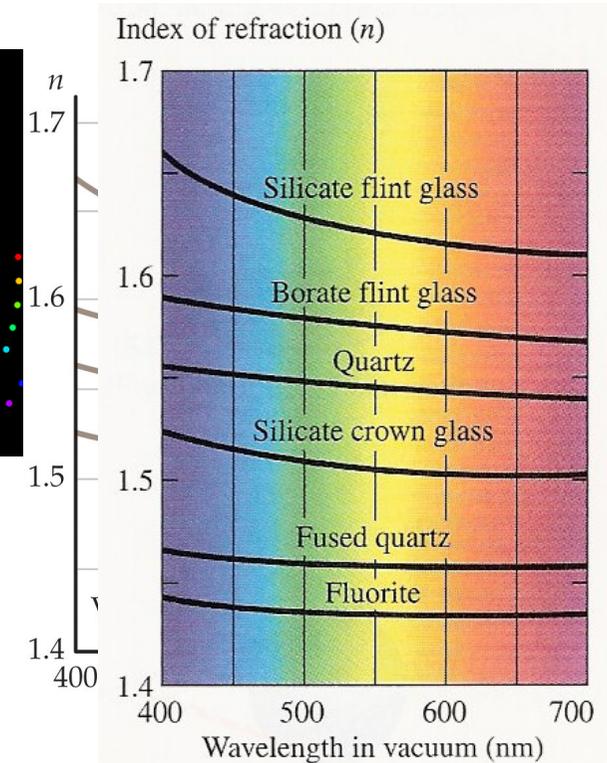
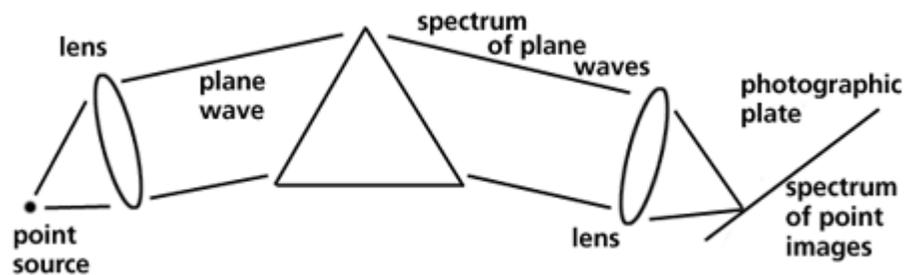
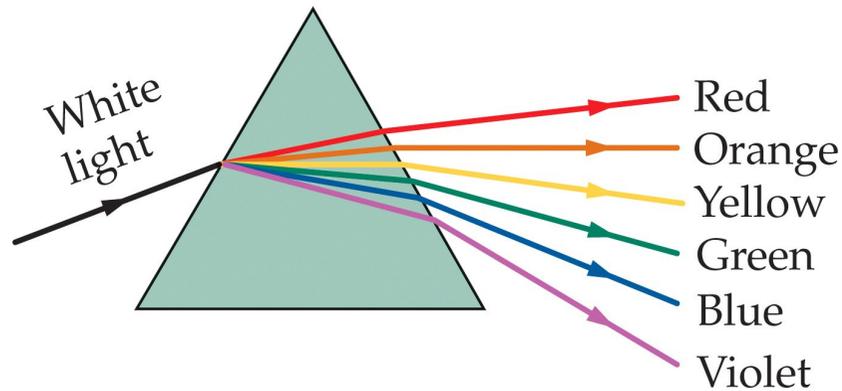
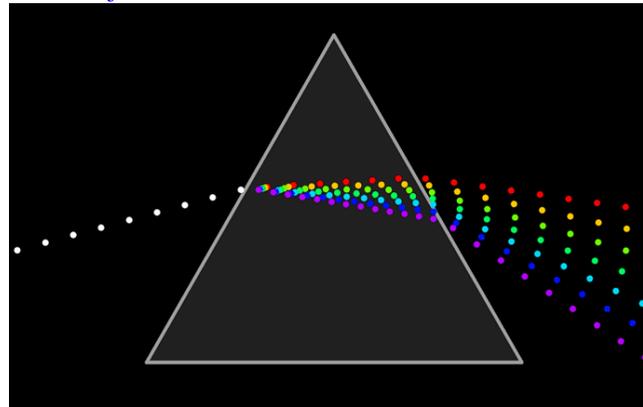
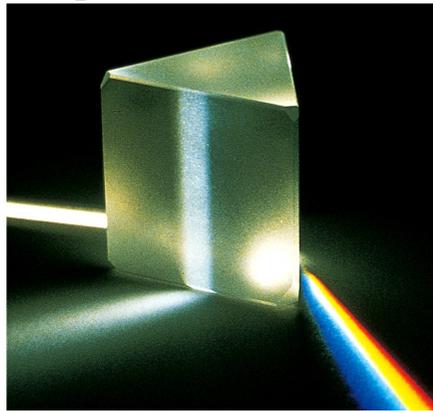
Espectroscópio: s. m. instrumento para observar o espectro de qualquer luz (do lat. spectru-, «espectro» + gr. skope, n, «olhar» + -io)

Espectrómetro: s. m. espectroscópio que tem por função medir os comprimentos de onda dos traços de um espectro luminoso. (Do lat. spectru-, «espectro» + gr. métron, «medida»)



Dispersão da luz

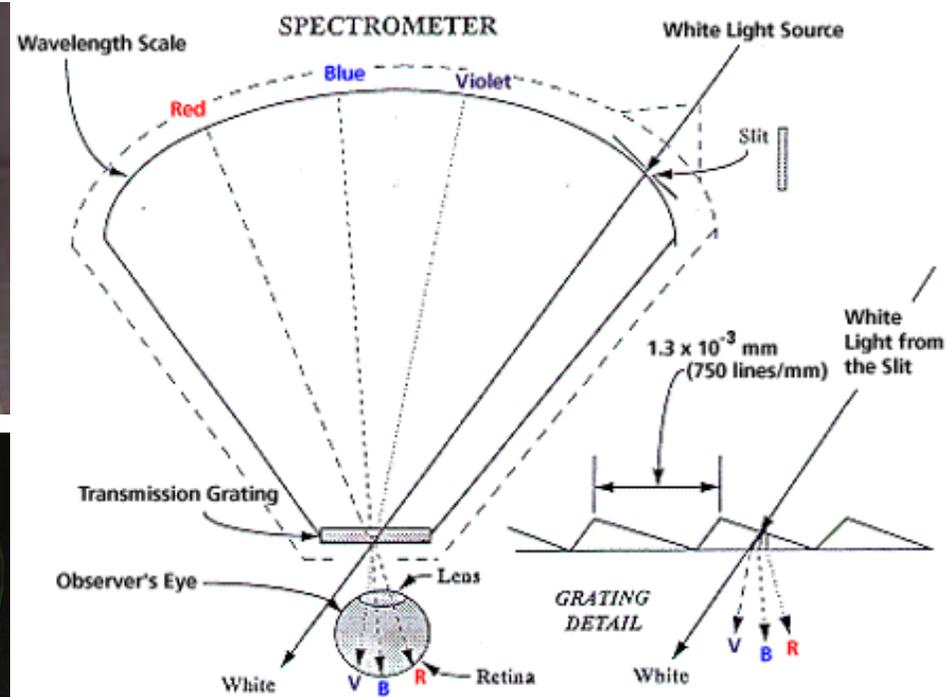
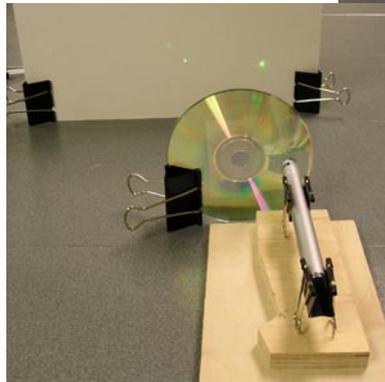
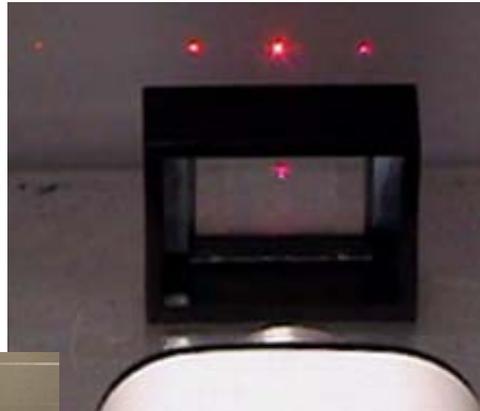
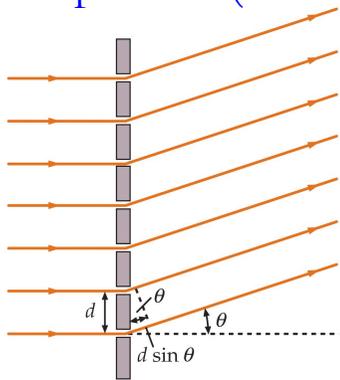
Dispersão: (fís.) separação de uma radiação heterocromática nas radiações simples que a compõem; disseminação; variação do índice de refração de uma substância com o comprimento de onda da radiação;



34-13 Variation of index of refraction n with wavelength for different transparent materials. The horizontal axis shows the wavelength λ_0 of the light *in vacuum*; the wavelength in the material is equal to $\lambda = \lambda_0/n$.

Rede de difracção

Difracção: fenómeno observado quando a luz passa através de uma abertura muito estreita ou próximo do contorno de um obstáculo opaco e que é devido à interferência da luz directa consigo própria; Rede de difracção: qualquer arranjo periódico de objectos difractivos, como um cristal (rede tridimensional), apropriado para a difracção de raios X, ou uma série de riscas paralelas efectuadas por diamante numa superfície de vidro, ou uma reprodução de tais riscas em plástico (rede óptica a uma dimensão).



<http://www.exo.net/~pauld/activities/lasers/laserdiffraction.htm>

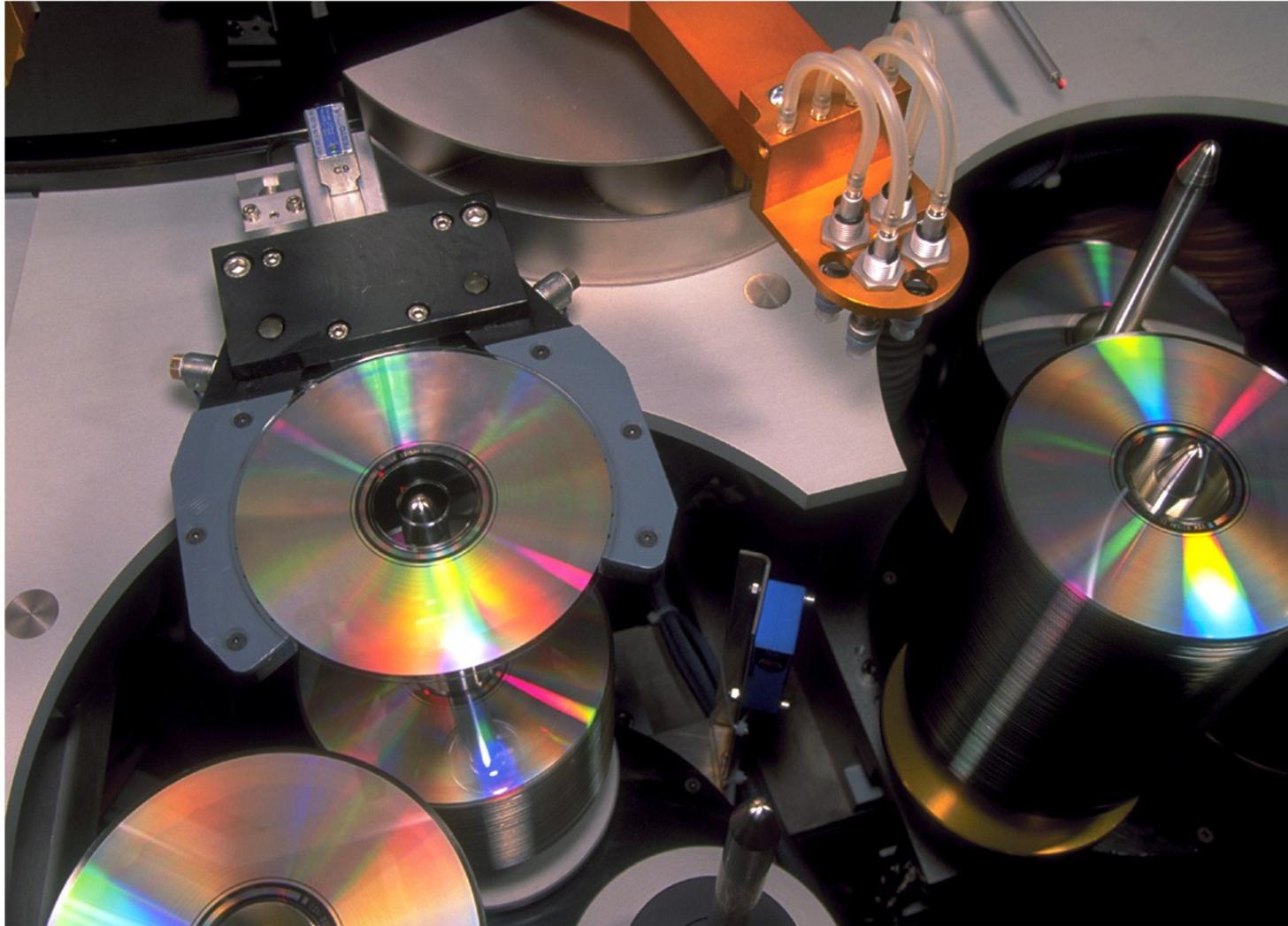
<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/phyopt/gratingcon.html#c1>

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

15-09-2009

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

CDs e DVDs actuam como redes de difracção



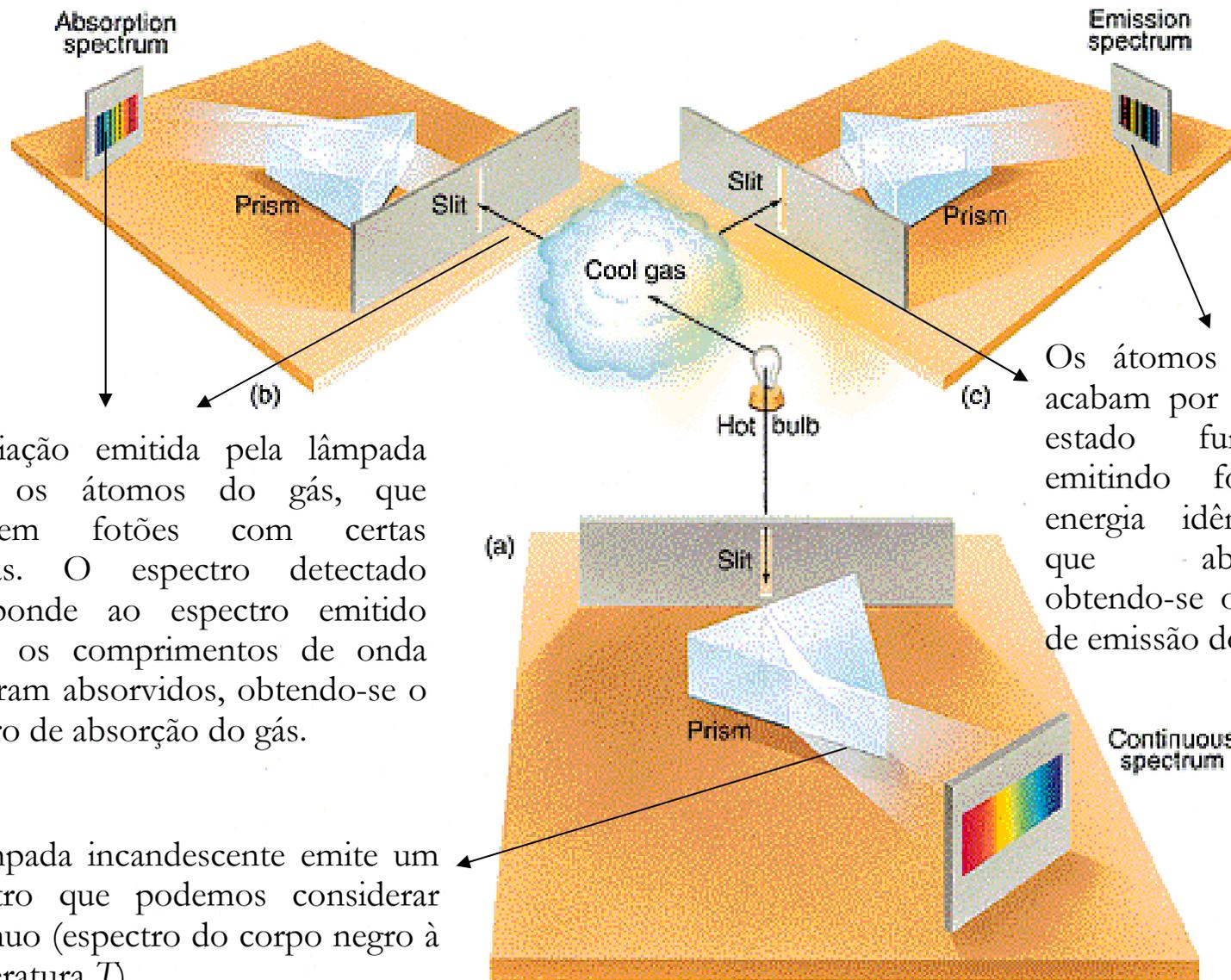
<http://www.exo.net/~pauld/activities/lasers/laserdiffraction.htm>

Espectrómetro

Espectro: resultado da dispersão, por um prisma ou uma rede de difracção, de qualquer radiação composta nas suas radiações simples, como, por ex., a imagem com as cores do arco-íris, que resulta da decomposição de um feixe de luz solar;



Emissão e absorção de radiação pela matéria



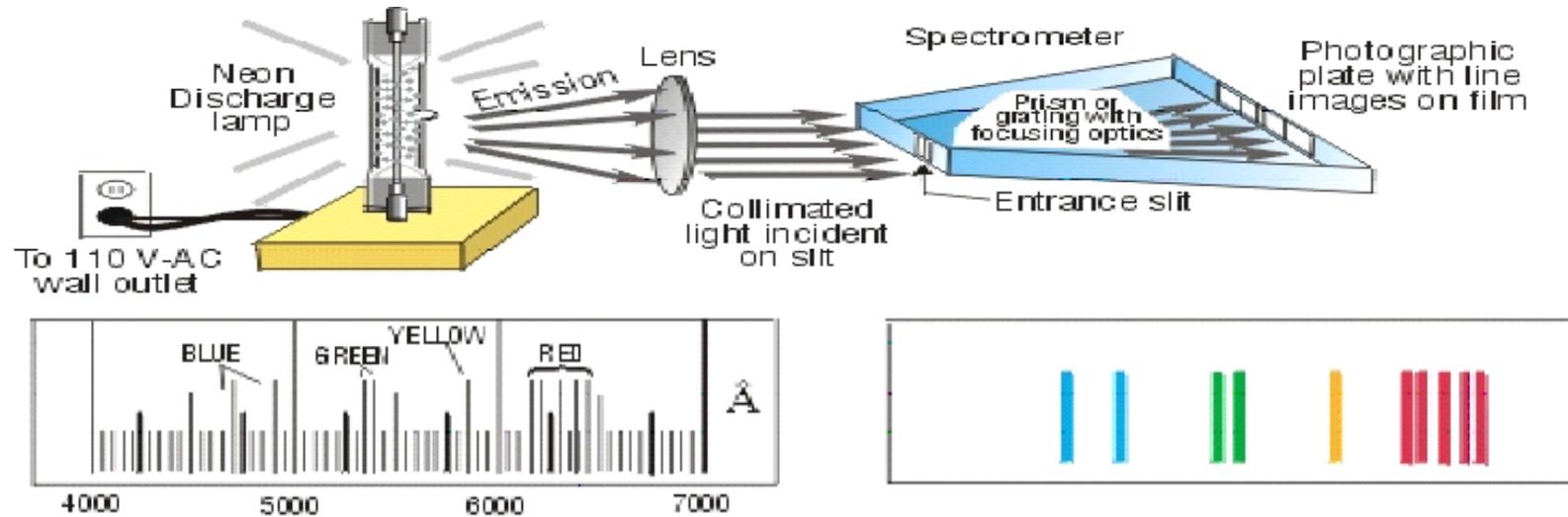
A radiação emitida pela lâmpada excita os átomos do gás, que absorvem fótons com certas energias. O espectro detectado corresponde ao espectro emitido menos os comprimentos de onda que foram absorvidos, obtendo-se o espectro de absorção do gás.

A lâmpada incandescente emite um espectro que podemos considerar contínuo (espectro do corpo negro à temperatura T).

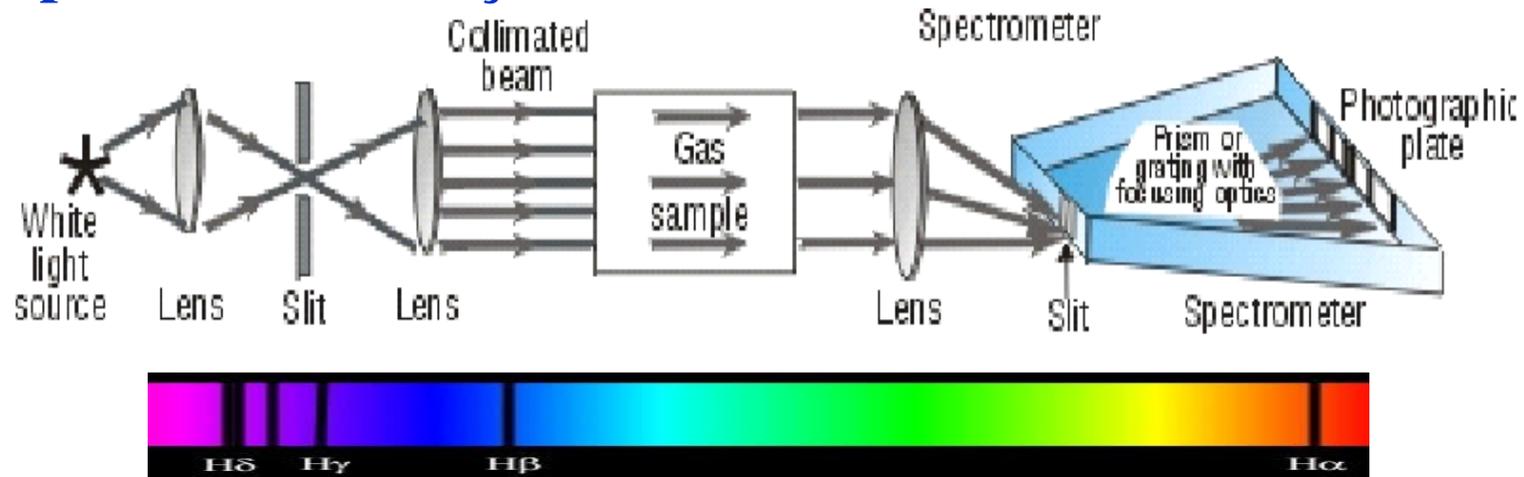
Os átomos excitados acabam por passar ao estado fundamental emitindo fótons de energia idêntica aos que absorveram, obtendo-se o espectro de emissão do gás.

Espectrometria

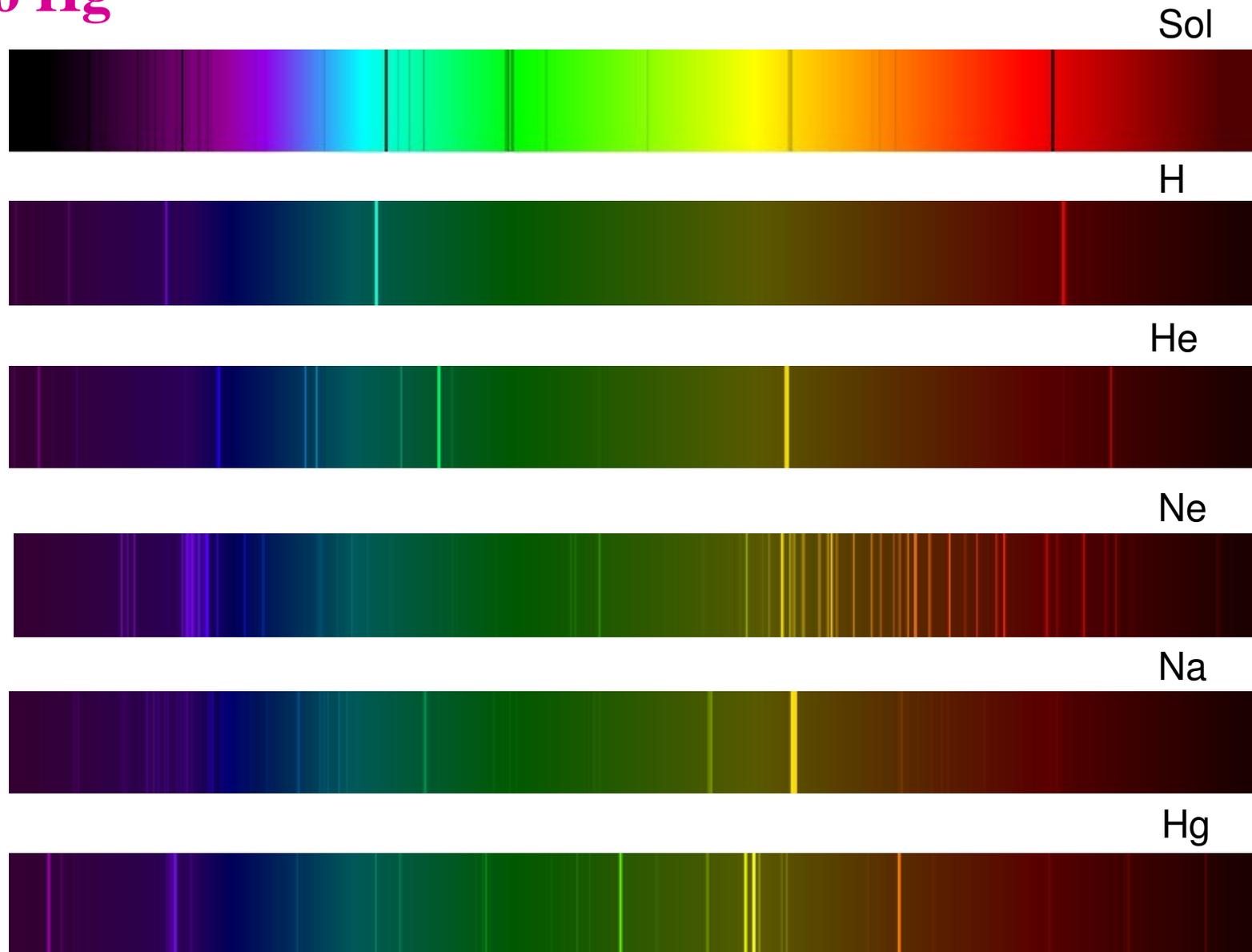
Espectro de Emissão



Espectro de Absorção



Espectros de emissão do Sol, do H, do He, do Ne, do Na e do Hg



Espectro do Átomo de hidrogénio – *série de Balmer*



Os comprimentos de onda das riscas de emissão do átomo de hidrogénio são obtidas usando uma expressão empírica descoberta por **Johann Jakob Balmer**, 1848. A fórmula de Balmer contém apenas uma constante e representa com exactidão todas as **linhas visíveis** do hidrogénio atómico. As linhas espectrais que podem ser calculados por esta fórmula constituem a chamada série de Balmer, a primeira das séries espectrais a serem observadas experimentalmente. A fórmula de Balmer serviu como modelo para as fórmulas de outras séries espectrais, sendo fundamental na espectrografia atómica.

Série de Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots$$

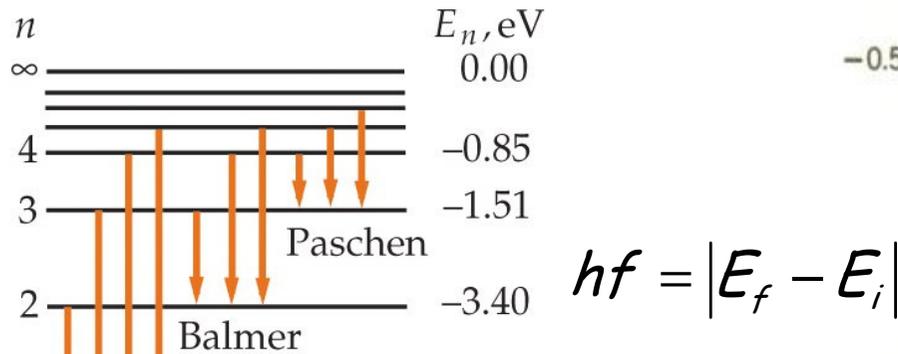
Principais riscas da série de Balmer no visível

Comp. de onda - intensidade relativa - transição – cor

410,174 nm	15	6-2	violeta
434,047 nm	30	5-2	violeta
486,133 nm	80	4-2	ciânico
656,2852 nm	180	3-2	vermelho

A primeira linha no espectro ultravioleta da série de Lyman do hidrogénio foi descoberta em 1906 pelo físico da Theodore Lyman, que estudava o espectro ultravioleta do hidrogénio gasoso electricamente excitado. As restantes linhas do espectro ultravioleta foram descobertas também por Lyman entre 1906 e 1914. Estes resultados demonstravam que o espectro da radiação emitido pelo hidrogénio não é contínuo.

Principais séries do espectro do *hidrogénio*



Série de Lyman

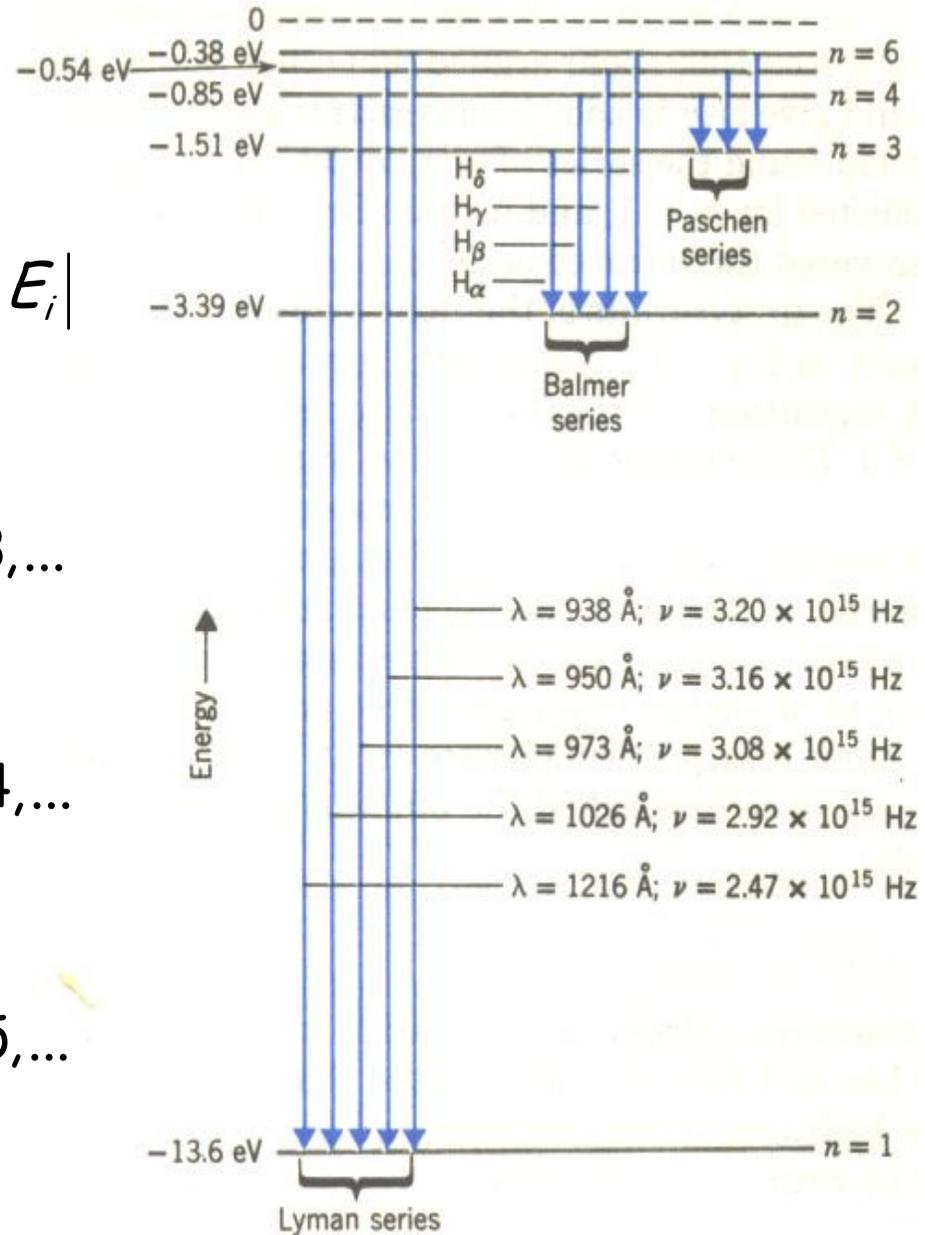
$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, \dots$$

Série de Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, \dots$$

Série de Paschen

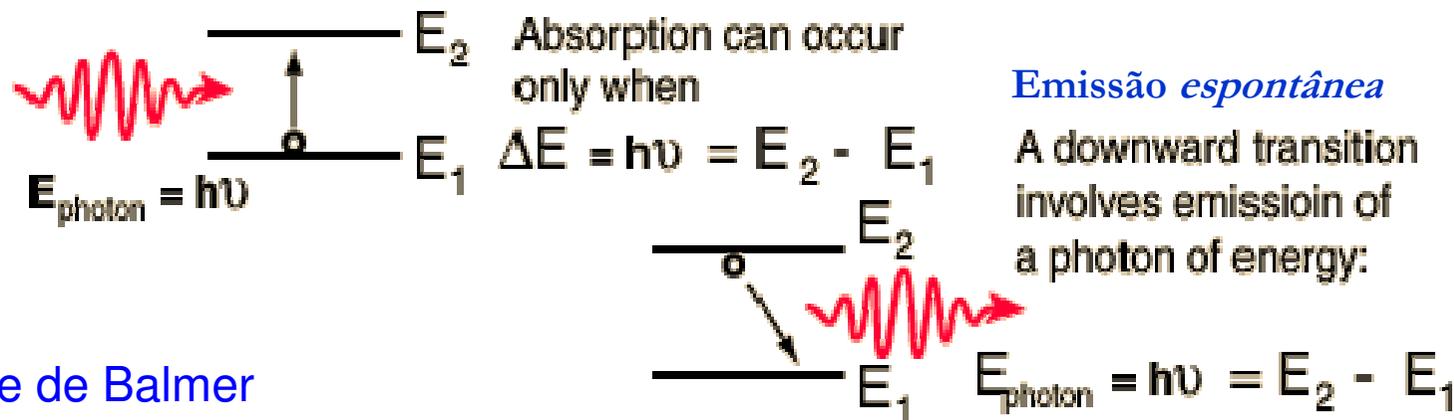
$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 4, 5, \dots$$



Espectro do Átomo de hidrogénio *segundo* Bohr



Segundo Bohr, a **energia do átomos está quantizada**, isto é, a energia do átomo apenas pode tomar certos valores – **níveis de energia do átomo**. Quando ocorre emissão ou absorção de luz (fotões), o átomo sofre uma transição para um outro estado energético, em que a a diferenças de energia entre o estado inicial e o estado final é igual è energia do fotão emitido ou absorvido.



Série de Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, \dots$$

Na série de Balmer, se fizermos $E_i = -hcR_y/n^2$ e $E_f = -hcR_y/2^2$, obtém-se que a energia do átomo no estado n é dada por $E_n = -hcR_y/n^2 = -E_0/n^2$.

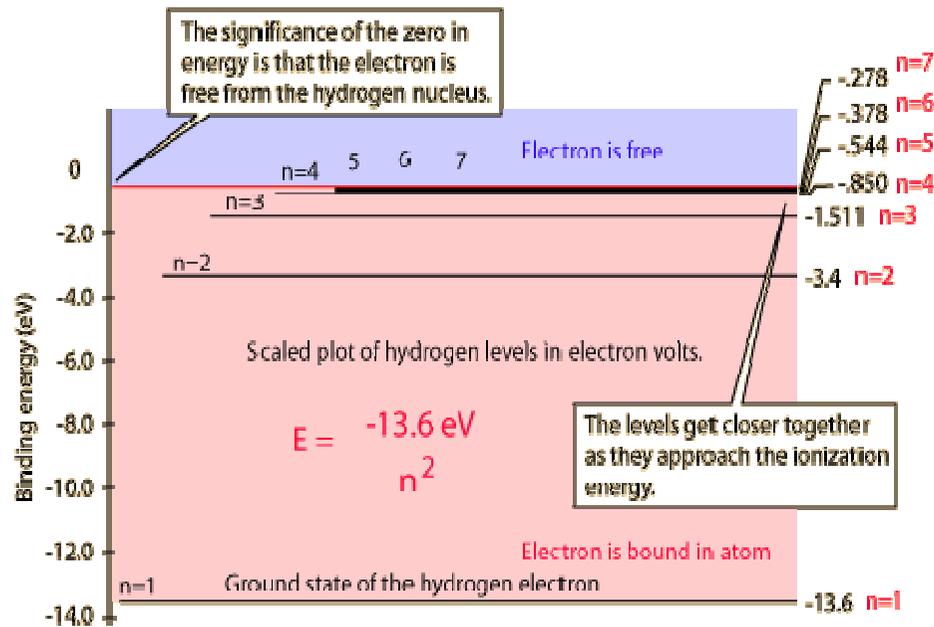
$R_y = \frac{E_0}{hc}$ é a constante de Rydberg para o H.

Espectro do Átomo de hidrogénio *segundo* Bohr

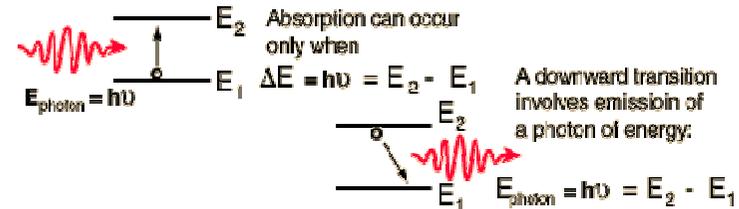


Na série de Balmer, se fizermos $E_i = -hcR_y/n^2$ e $E_f = -hcR_y/2^2$, obtém-se que a energia do átomo no estado n é dada por $E_n = -hcR_y/n^2 = -E_0/n^2$, com $E_0 = 13,6$ eV..

Níveis de energia do átomo de hidrogénio



Transições atómicas



Absorção ($n_2 > n_1$): $\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

ou $f = cR_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

$\Delta E_{21} = E_2 - E_1 = -hcR_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = -E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = -hf$

Emissão ($n_2 > n_1$): $\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

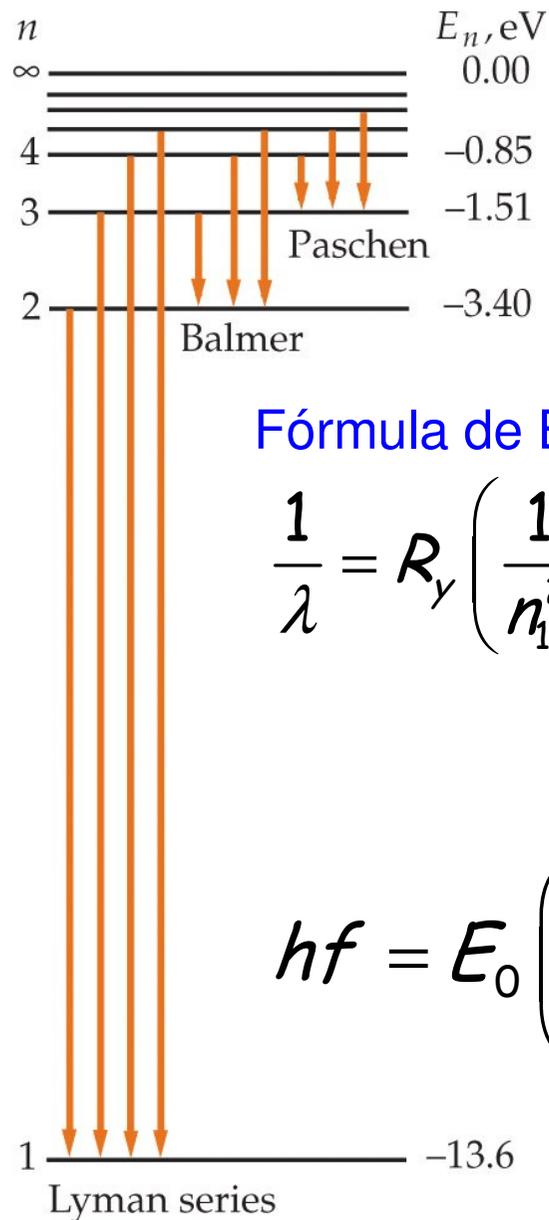
ou $f = cR_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

$\Delta E_{12} = E_1 - E_2 = --- hcR_y \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) = E_0 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) = hf$

Fórmula de Balmer-Rydberg

$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ ou $hf = E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

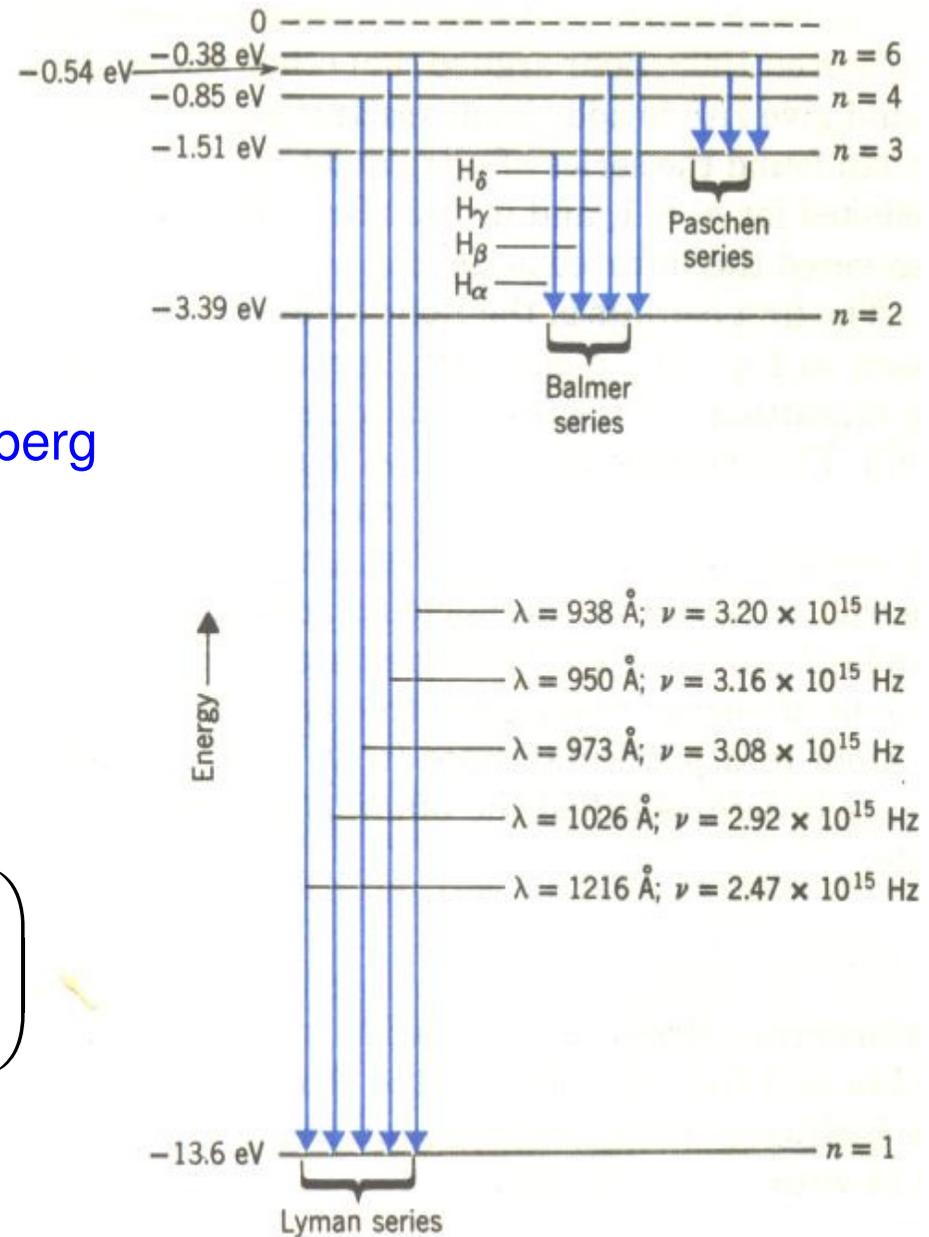
Principais séries do espectro do *hidrogénio*



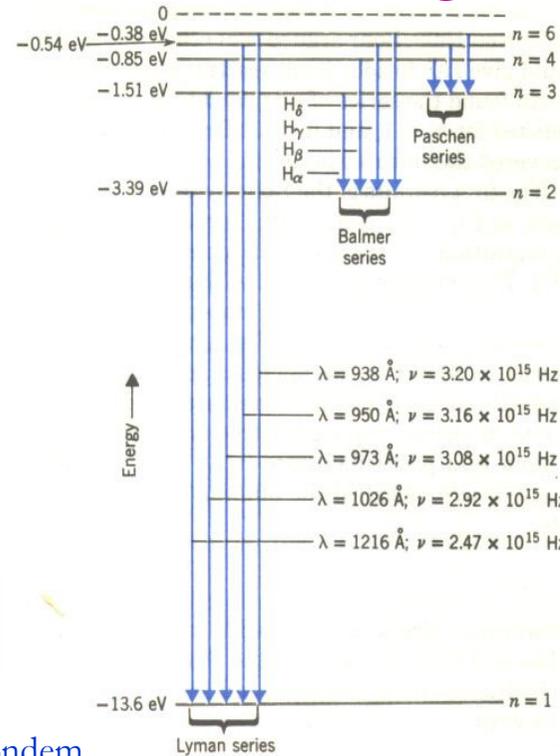
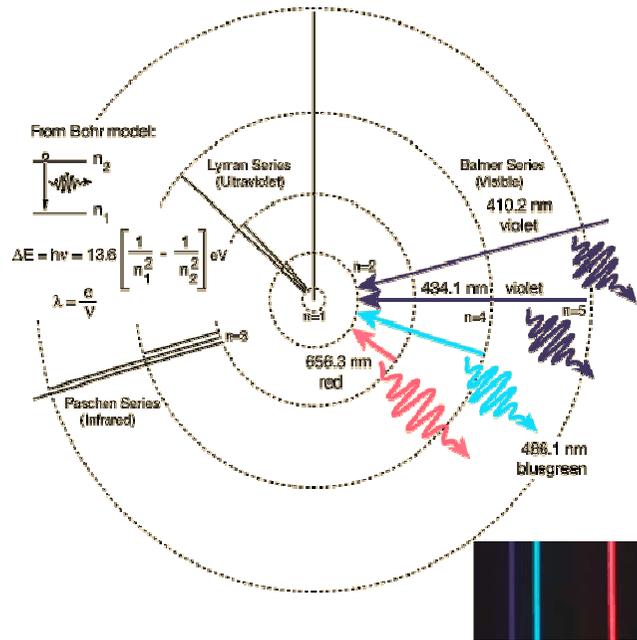
Fórmula de Balmer-Rydberg

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

$$hf = E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

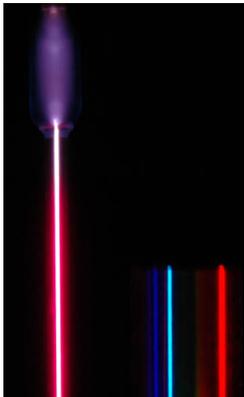


Espectro do átomo de hidrogénio



«Classificação» das cores espectrais:

- Violeta (380 nm – 435 nm);
- Azul (435 nm – 500 nm),
- Ciânico (500 nm – 520 nm);
- Verde (520 nm – 565 nm);
- Amarelo (565 nm – 590 nm);
- Laranja (590 nm – 625 nm);
- Vermelho (625 nm – 740 nm);
- Raios x (<10 nm);
- Ultravioleta (10 nm – 400 nm);
- Visível (400 nm – 750 nm);
- Infravermelho (>750 nm)



As riscas ao lado correspondem ao espectro emitido por um tubo contendo hidrogénio excitado com uma descarga de 5000 V. A imagem das riscas predominantes foi formada com uma rede de difracção com 600 linhas/mm.

Série de Balmer no visível

Comprimento de onda - intensidade relativa - transição – cor

383,5384 nm	5	9-2	violeta
388,9049 nm	6	8-2	violeta
397,0072 nm	8	7-2	violeta
410,174 nm	15	6-2	violeta
434,047 nm	30	5-2	violeta
486,133 nm	80	4-2	ciânico
656,272 nm	120	3-2	vermelho
656,2852 nm	180	3-2	vermelho

A risca vermelha do deutério é medida a 656,1065 nm (diferença de 0,1787 nm)

Níveis de energia do Hidrogénio e do ião Hélio

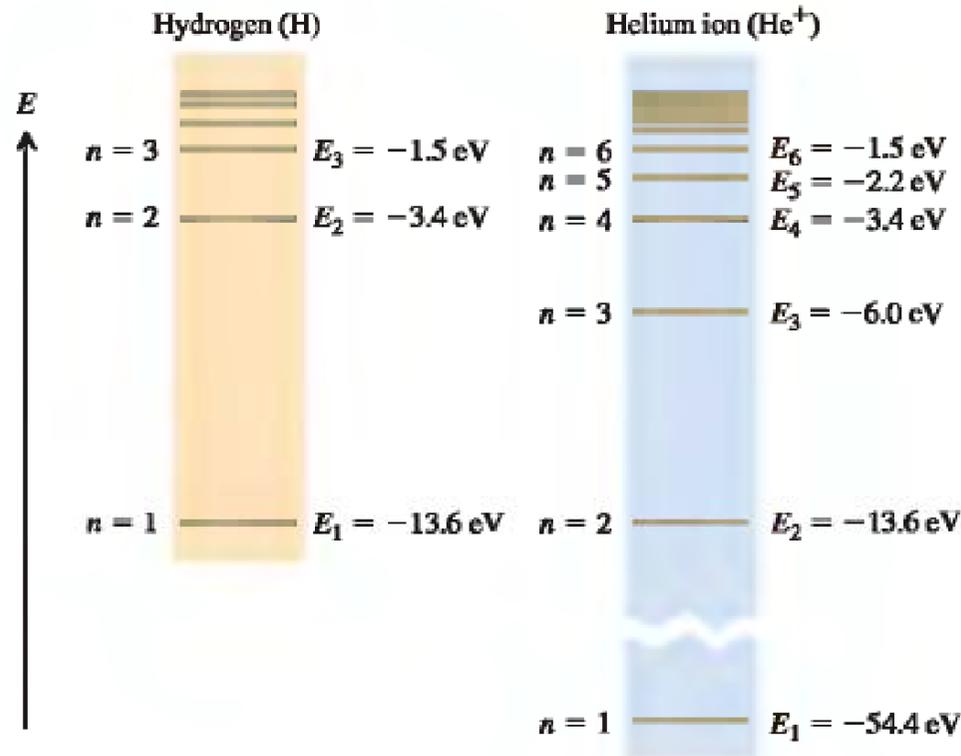
Comparação entre dos níveis de energia do hidrogénio atómico e do ião He^+ . Como se pode ver, a estrutura de níveis é a mesma. As razões da diferença nos valores das energias será determinada mais tarde quando estudarmos o modelo do átomo proposto por Niels Bohr.

Fórmula de Balmer-Rydberg para o H

$$\frac{1}{\lambda} = R_{y,H} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\text{ou } hf = E_{0,H} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

$$\text{com } E_{0,H} = -13.6 \text{ eV}$$

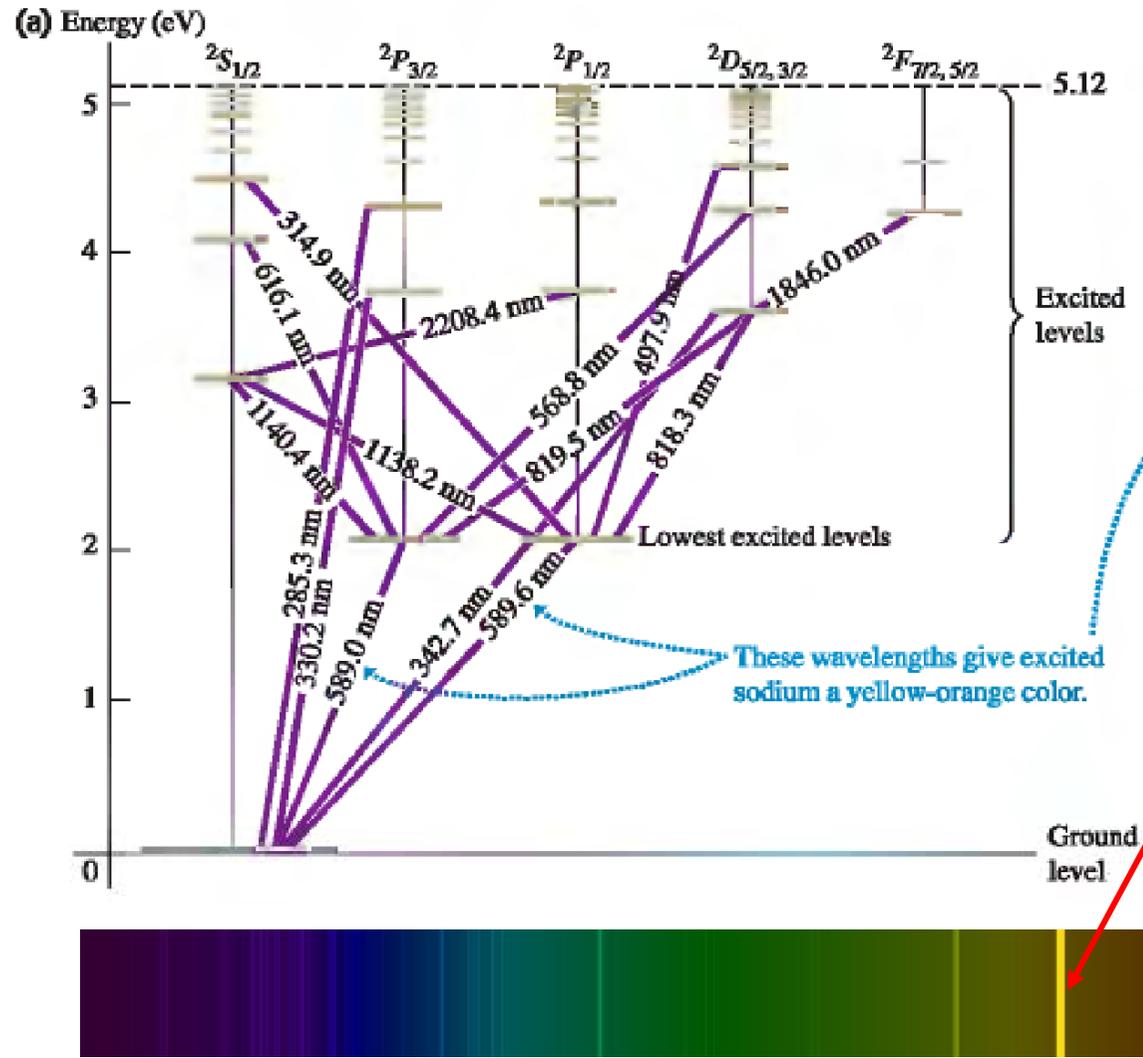


Fórmula de Balmer-Rydberg para o He^+

$$\frac{1}{\lambda} = R_{y,\text{He}^+} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{ ou } hf = E_{0,\text{He}^+} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \text{ com } E_{0,\text{He}^+} = -54.4 \text{ eV}$$

Níveis de energia do Sódio (átomo *poli*-electrónico)

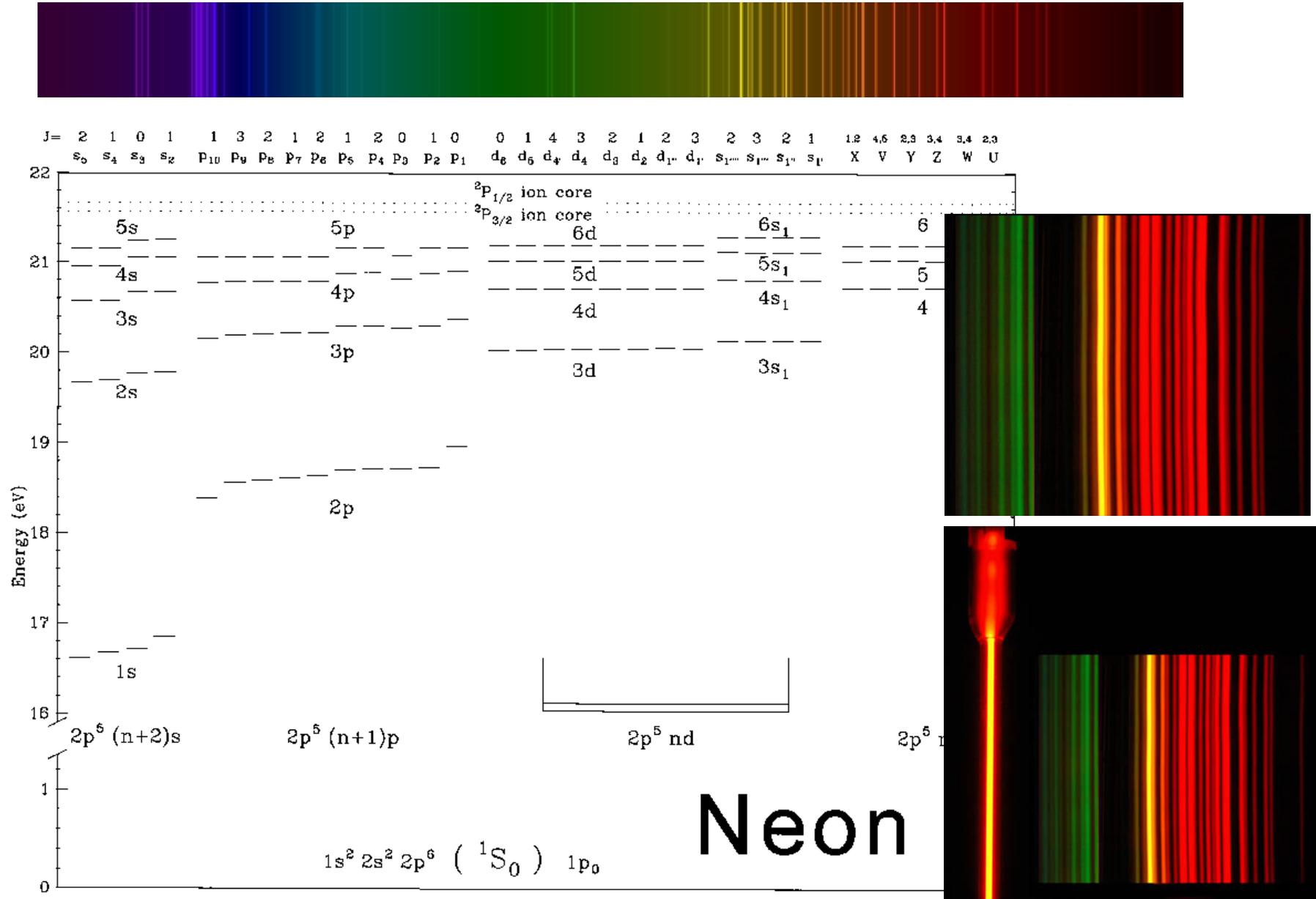
38.10 (a) Energy levels of the sodium atom relative to the ground level. Numbers on the lines between levels are wavelengths. The column labels, such as $^2S_{1/2}$, refer to some quantum states of the valence electron (to be discussed in Chapter 41). (b) When a sodium compound is placed in a flame, sodium atoms are excited into the lowest excited levels. As they drop back to the ground level, the atoms emit photons of yellow-orange light with wavelengths 589.0 and 589.6 nm.



Ver trabalho prático

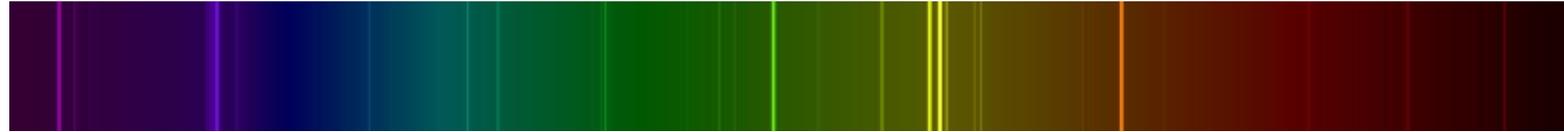


Níveis de energia do Néon (átomo *poli*-electrónico)



Níveis de energia do mercúrio (Hg)

Hg



Fluorescent Mercury Vapor Lamp

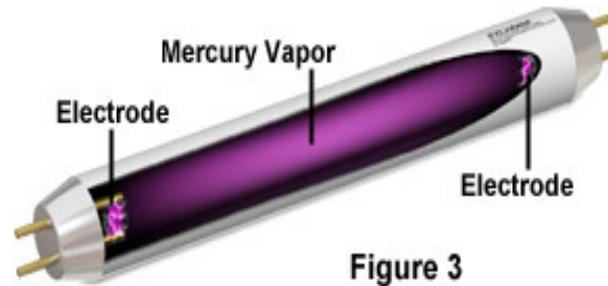
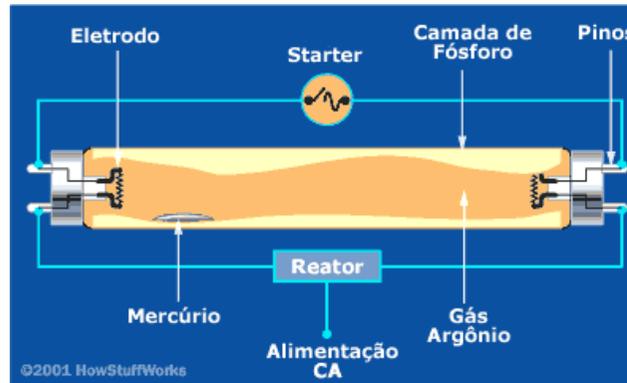


Figure 3



Ver trabalho prático

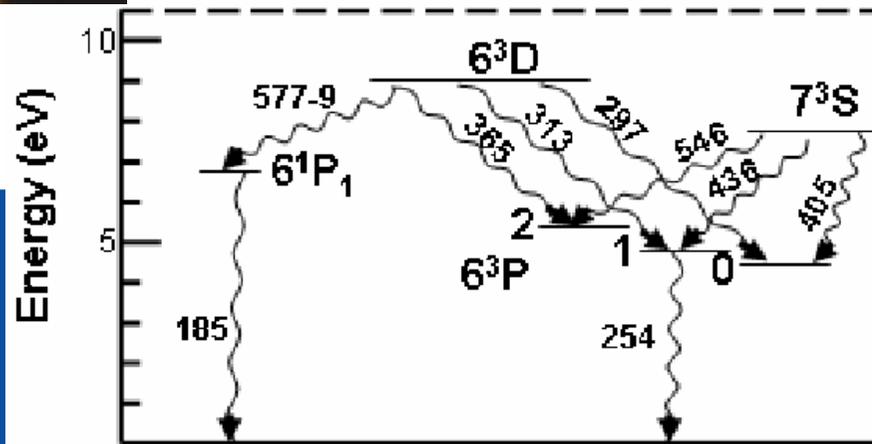
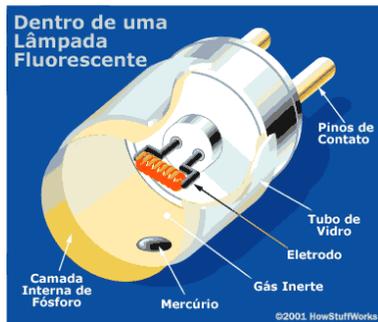
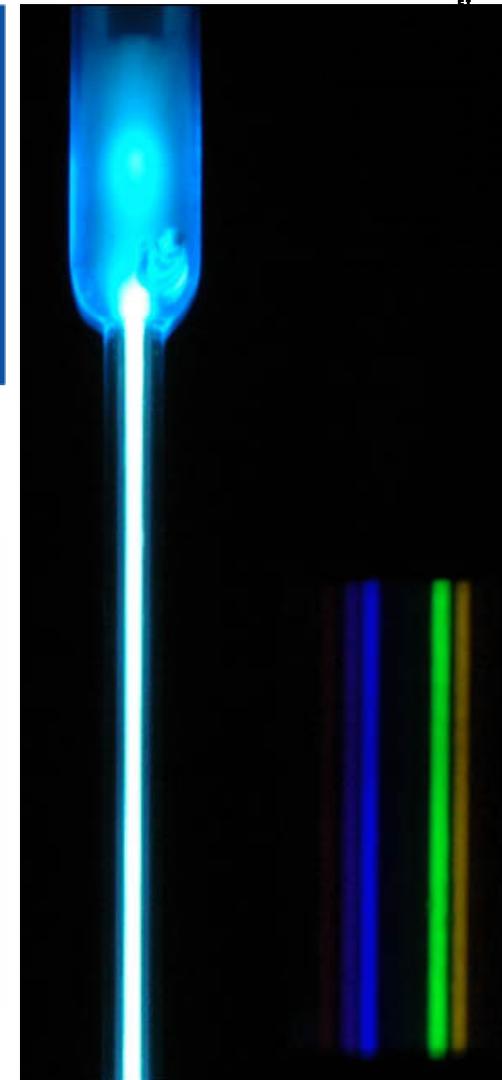
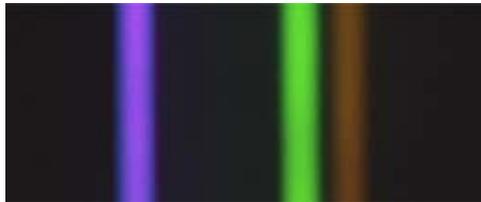
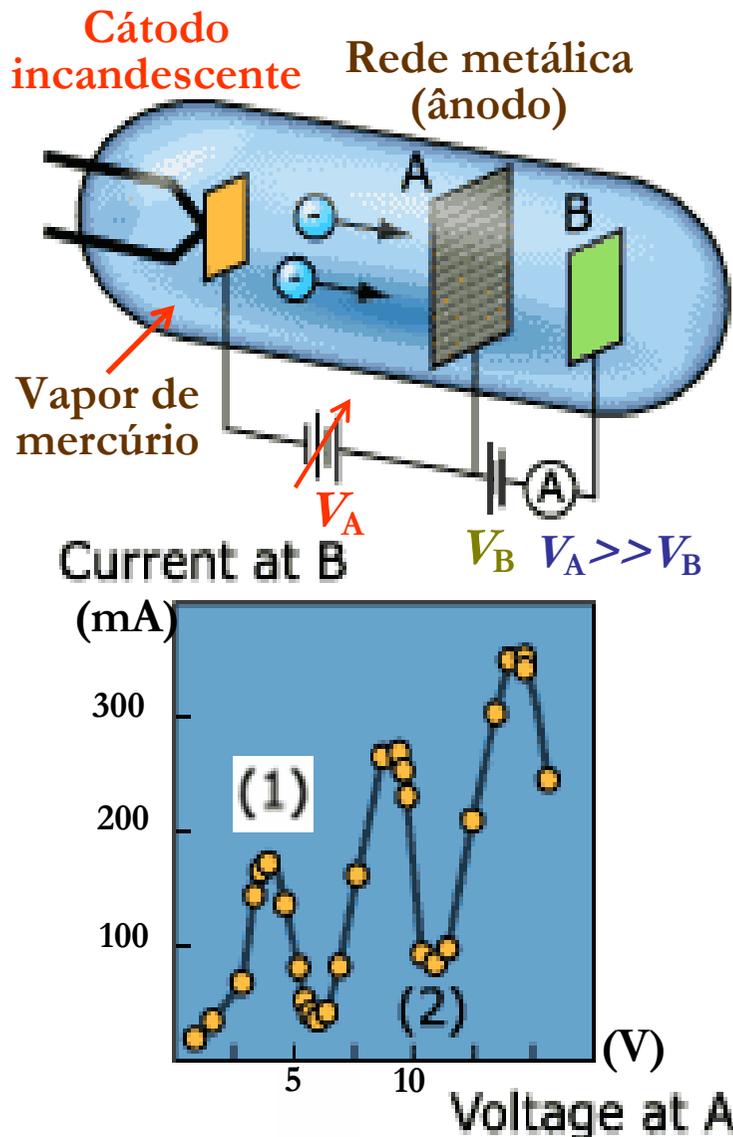


Fig.7 Energy level diagram for mercury
(All wavelengths given in nanometers.)

Experiência de Franck-Hertz

Modelo de Bohr, 1913 Experiência de Franck-Hertz, 1914 (absorção ressonante)



Esta experiência *confirma* a existência de estados discretos de energia nos átomos (ex. vapor de mercúrio), o que corroborava a teoria de Bohr que propunha que o átomo só podia assumir determinados estados de energia – a quantização da energia do átomo.

Nesta experiência, os electrões são acelerados pela tensão V_A : à medida que a tensão entre o cátodo e o ânodo sobe, a corrente de A para B aumenta marcadamente até se atingir a tensão 4,9 V, diminuindo acentuadamente logo que a tensão ultrapassa este valor; o mesmo acontece quando $V_A \approx 9,8$ V, 14,7 V, etc.: 4,9 eV corresponde à energia da risca 253,7 nm ($E_2 - E_1 = hc/\lambda e = 4,9$ eV). Para vapor de sódio, observa-se a risca amarela 589 nm, quando $V_A \approx 2,1$ V.

Observa-se emissão de radiação quando a energia cinética dos electrões é superior às energias de excitação ΔE_{exci} dos átomos do gás (valores de eV_A a partir dos quais há diminuição de corrente).

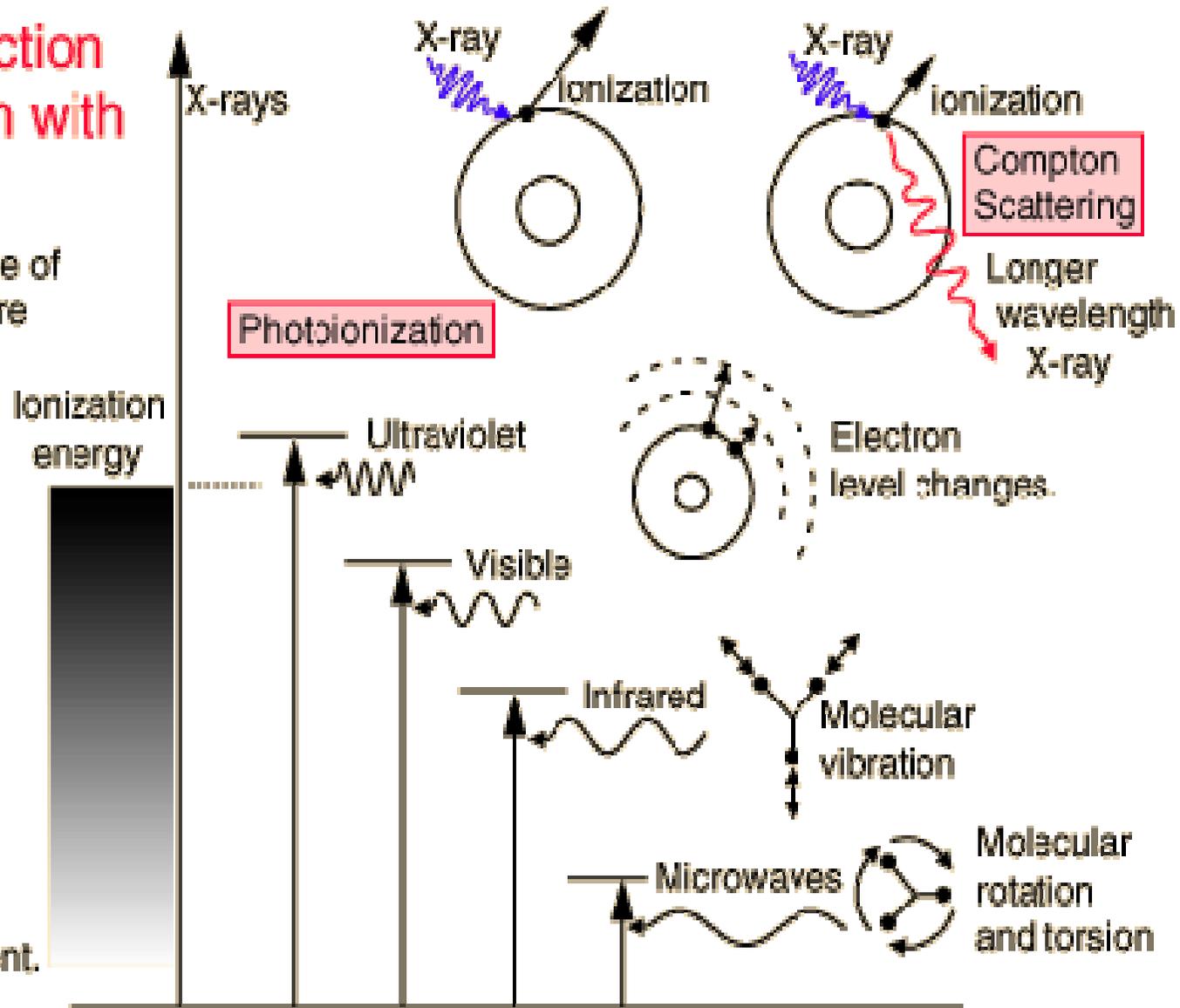
Resumo das principais formas de interacção entre a radiação e a matéria

The interaction of radiation with matter.

Click on any type of radiation for more information.

Large number of available energy states, strongly absorbed.

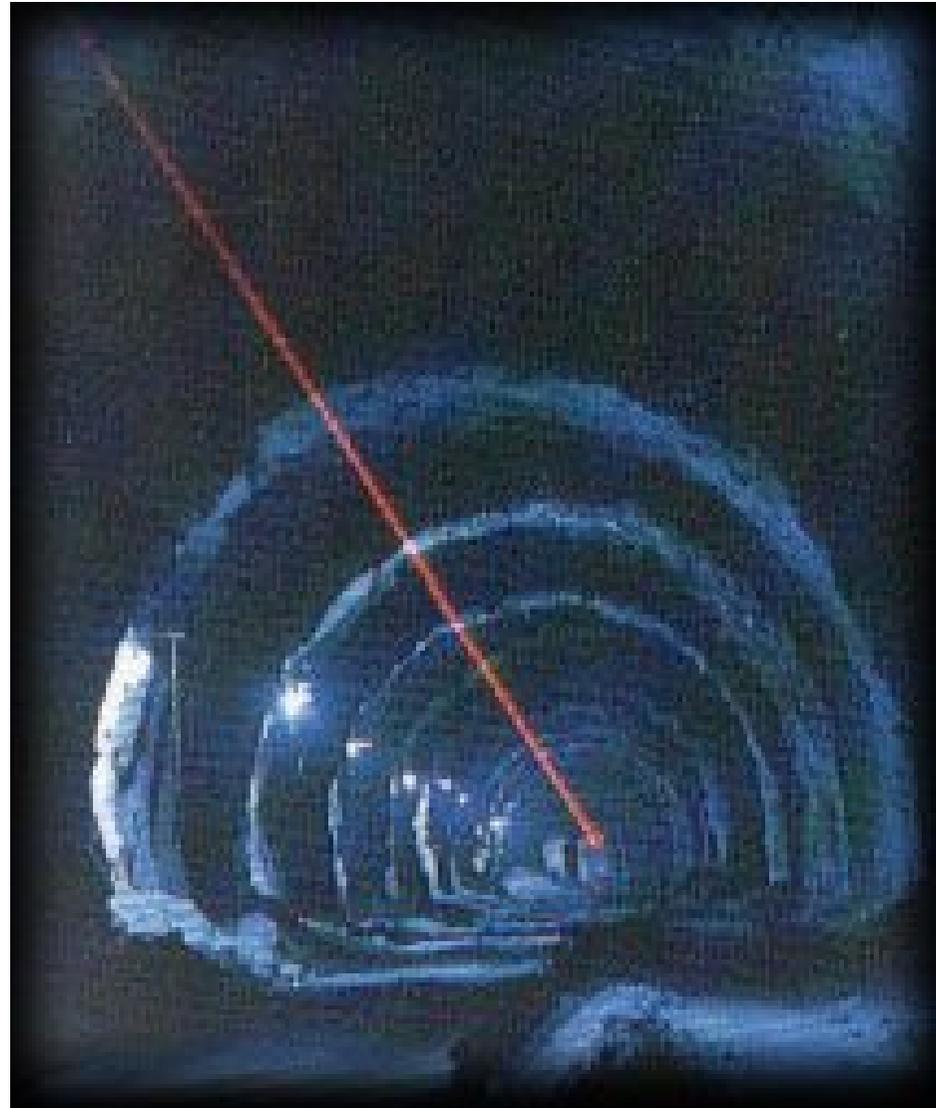
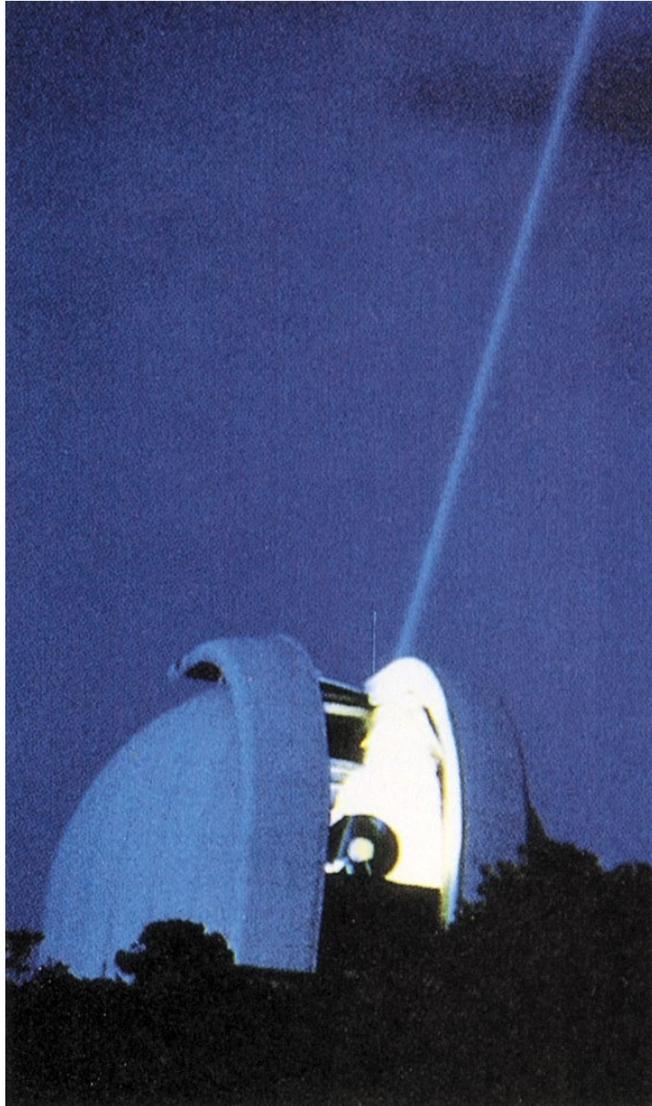
Small number of available states, almost transparent.



Acção laser e Laser de Hélio-Néon

Aplicação: Radiação laser / Luz laser

Laser: acrónimo de L[ight] A[mplification] (by) S[timulated] E[mission] (of) R[adiation], amplificação de luz por meio de emissão estimulada de radiação; dispositivo gerador de um feixe de radiação electromagnética intensa, **coerente** e *quasi*-monocromática.



O laser

Laser: acrónimo de L[ight] A[mplification] (by) S[timulated] E[mission] (of) R[adiation], **amplificação de luz por meio de emissão estimulada de radiação**; dispositivo gerador de um feixe de radiação electromagnética intensa, quase monocromática, possuindo múltiplas aplicações nos campos da indústria, da investigação e tecnologia, da Medicina e militar.

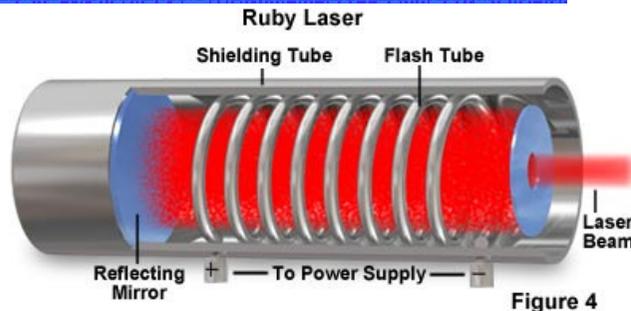
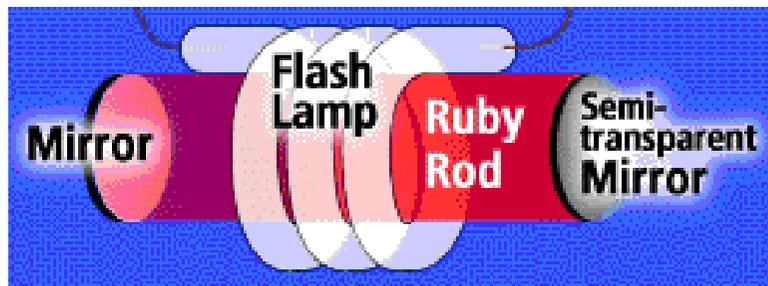
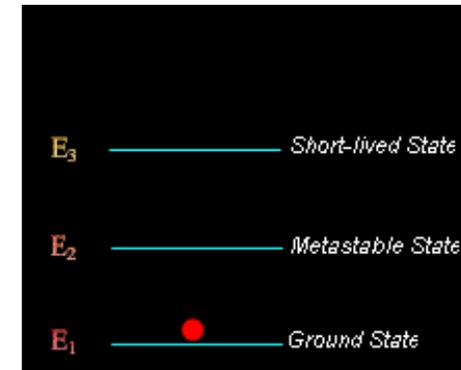
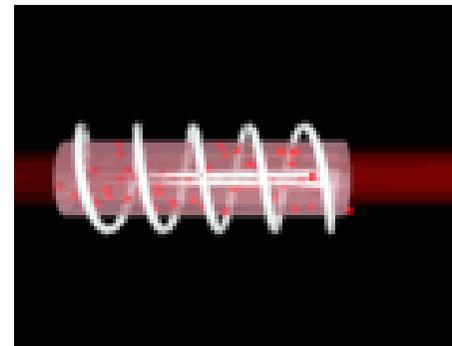
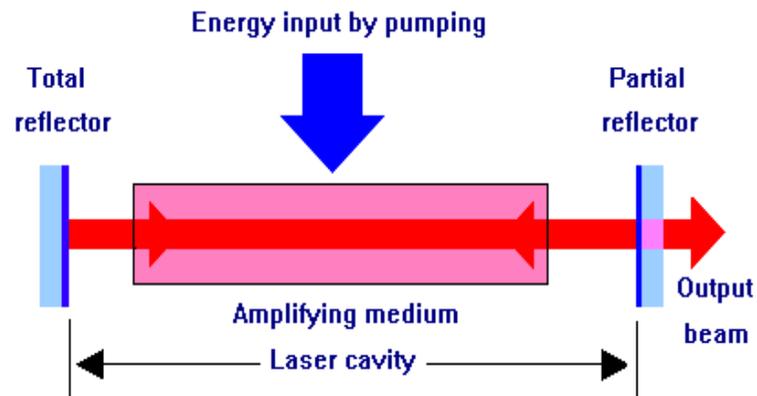
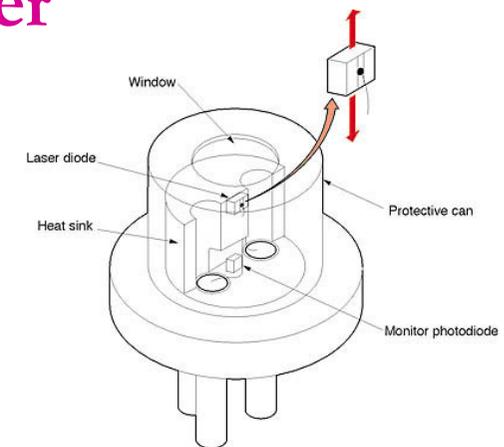


Figure 4

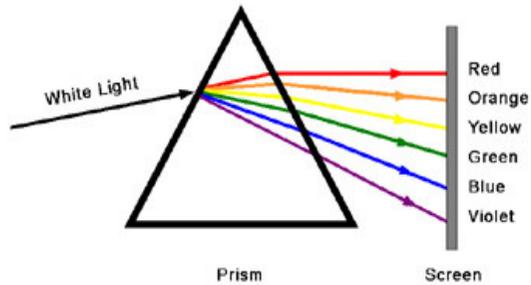
Díodo laser



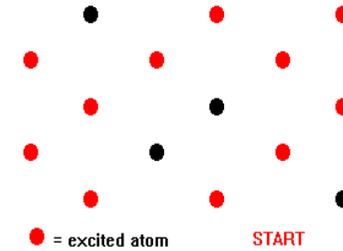
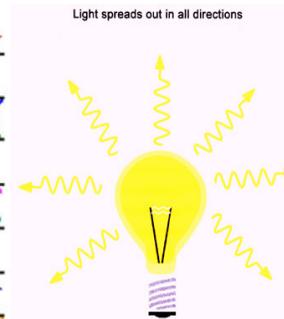
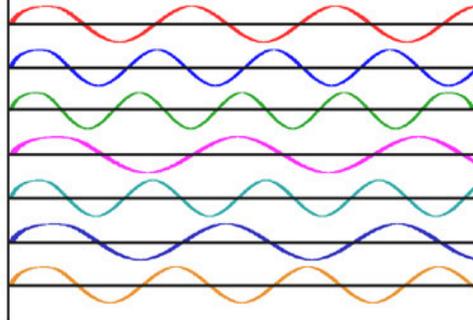
Luz «laser» versus luz «comum»

Luz “comum” Para mais detalhe ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht; F. C. Gulbenkian, pp. 619-622.

Policromática

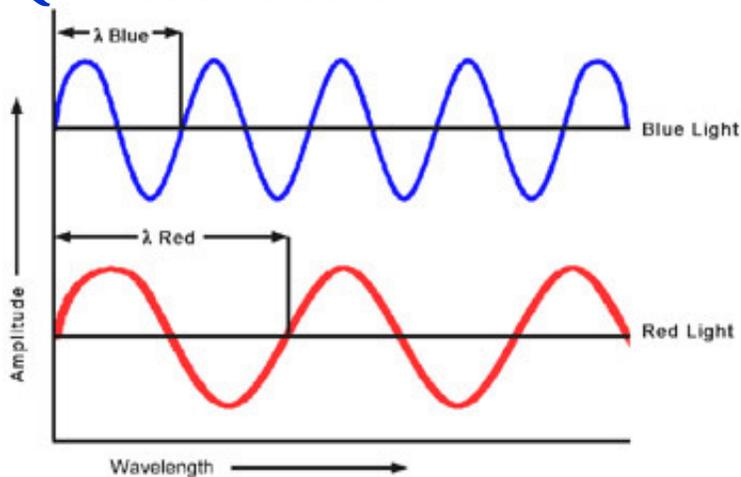


Incoerência temporal e é “pouco” direccional (“muito” divergente)

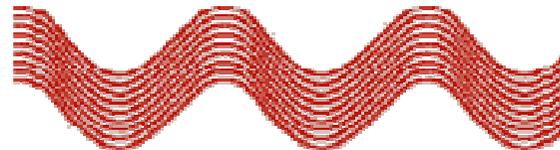


Luz laser

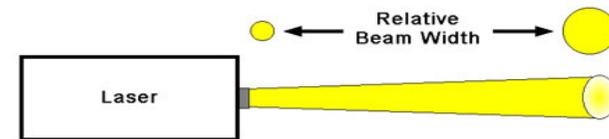
Quasi-monocromática



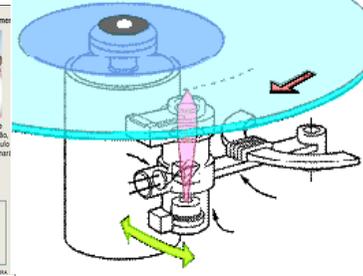
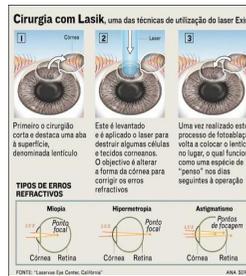
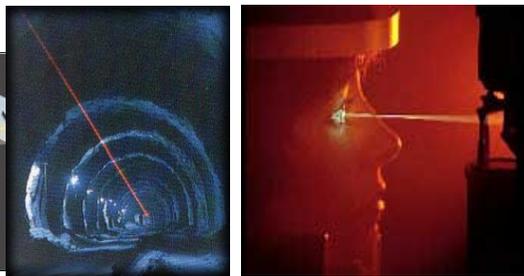
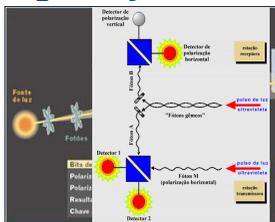
“Elevada” coerência temporal



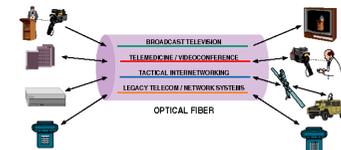
Em geral, é “altamente” direccional (pouco divergente; limitada pela difracção)



Aplicações:



WAVELENGTH DIVISION MULTIPLEXING

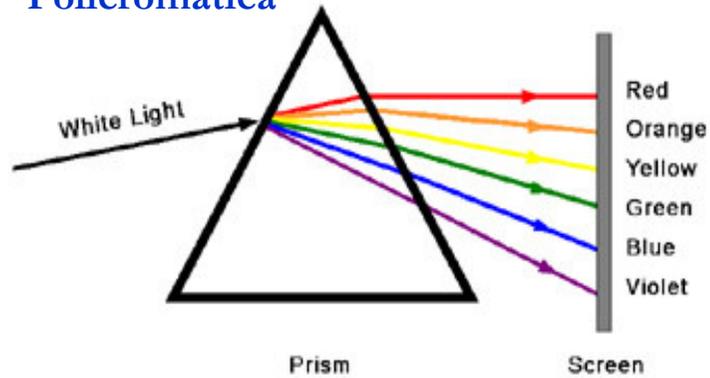


- BETTER USE OF EXISTING FIBER BANDWIDTH
- TRANSPARENT TO DATA FORMAT AND RATE
- CHANNELS ARE INDEPENDENT
- COMMERCIALLY MATURE FOR POINT-POINT LINKS

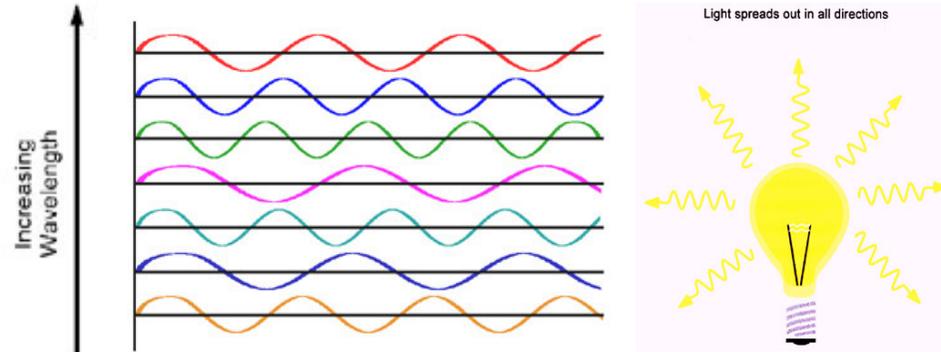
15-09-2009

Luz “comum”

Policromática

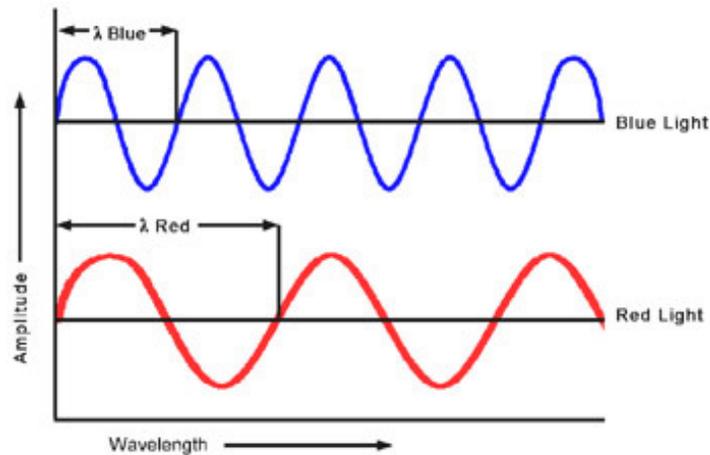


Incoerência temporal (fases diferentes) e é “pouco” direccional (“muito” divergente)

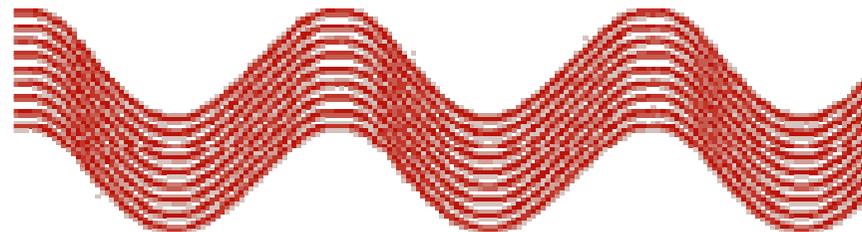


Luz laser

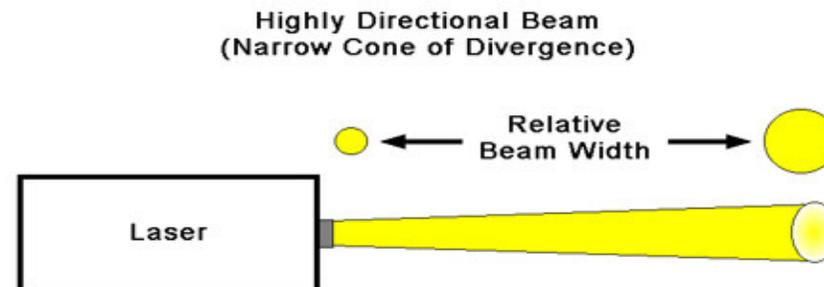
Quasi-monocromática



“Elevada” coerência temporal (mesma fase)



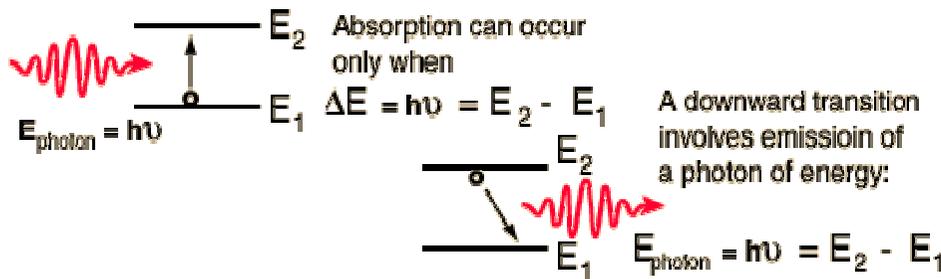
Em geral, é “altamente” direccional (pouco divergente; limitada pelo fenómeno da difracção)



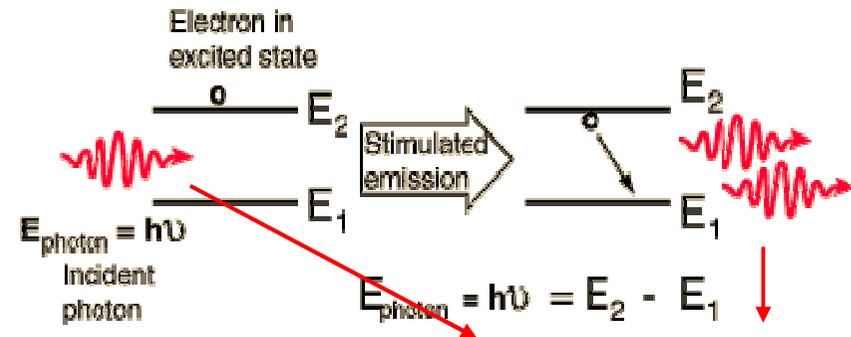
Processos quânticos *essenciais* à acção laser

Laser: acrónimo de L[ight] A[mplification] (by) S[timulated] E[mission] (of) R[adiation], amplificação de luz por meio de emissão estimulada de radiação; dispositivo gerador de um feixe de radiação electromagnética intensa, quase monocromática. **Maser:** amplificador de micro-ondas, baseado na emissão estimulada de radiação por um sólido (de *microwave amplification by stimulated emission of radiation*).

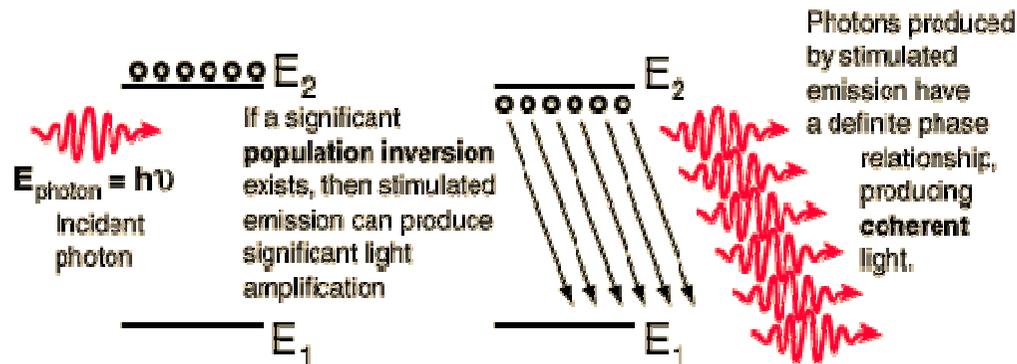
Absorção e emissão espontânea



Emissão estimulada



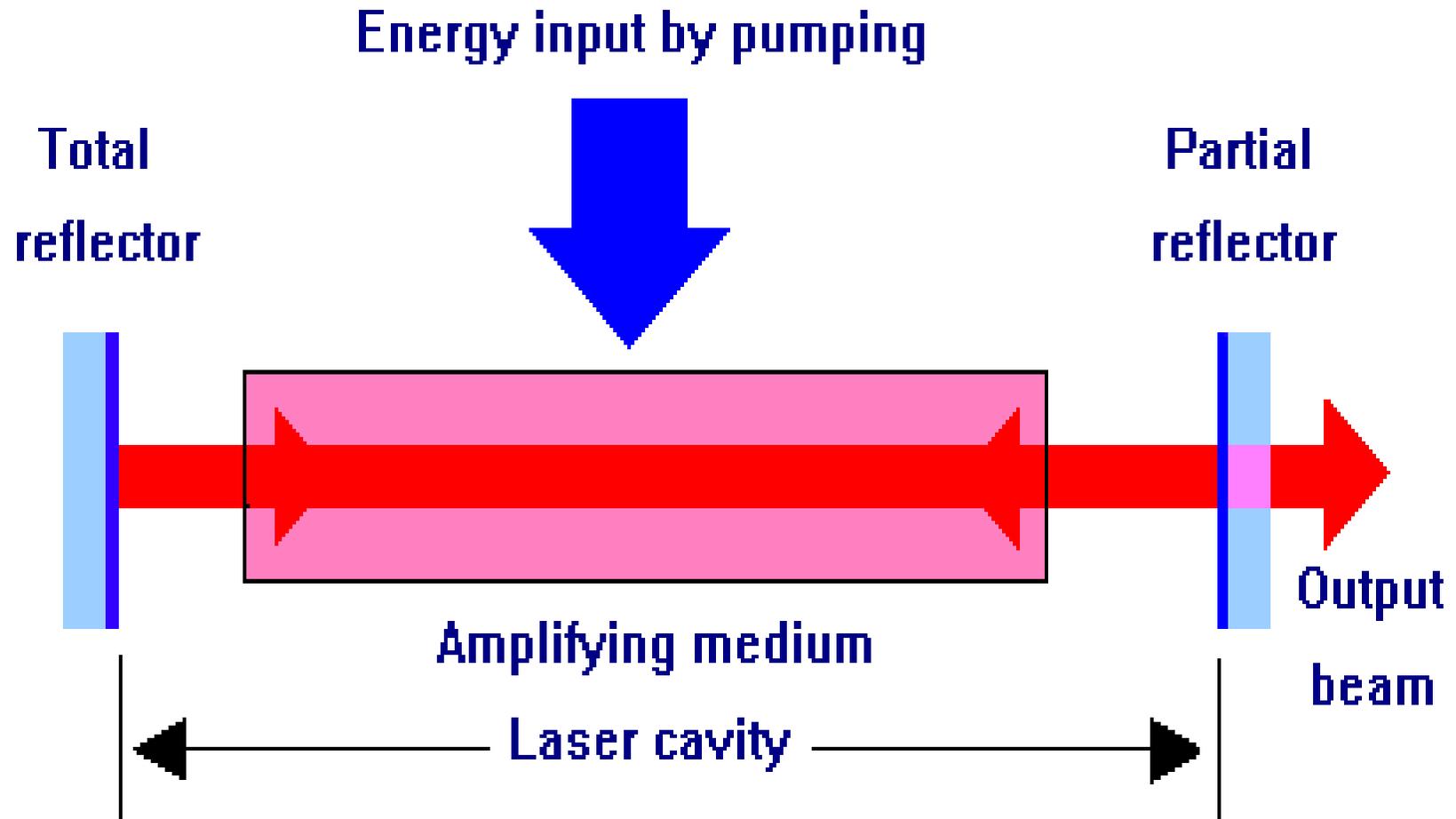
Inversão de população e amplificação de radiação



Um fóton dá origem a dois fótons “iguais”, com as mesmas características.

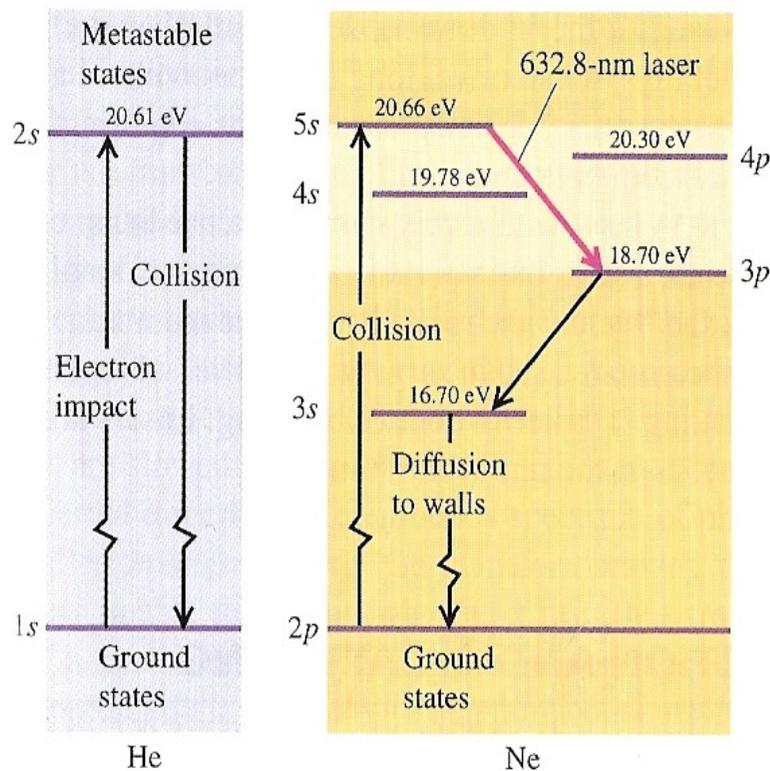
Em geral, a *acção* laser envolve pelo menos três níveis de energia (ver nas páginas seguintes os diagramas de energia dos lasers de He-Ne e de rubi).

“Constituintes” de um laser

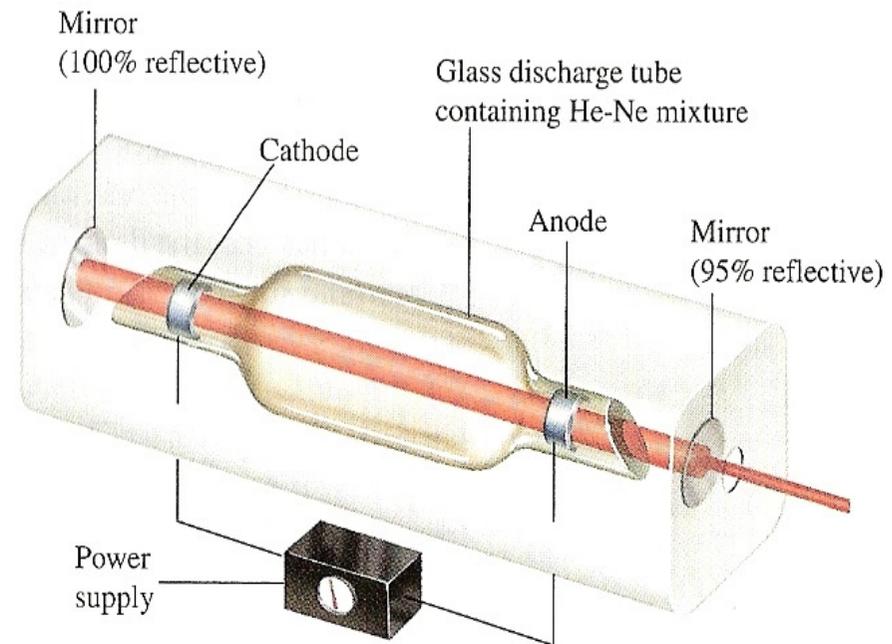


Laser de Hélio – Néon

O laser de hélio néon corresponde a um tubo contendo uma mistura destes dois gases, que são sujeitos a descargas eléctricas, produzindo radiação laser: radiação electromagnética intensa, coerente e *quasi-monocromática*. A descarga eléctrica excita os átomos de hélio que transferem por colisão o excesso de energia para os átomos de néon, que ao voltarem ao estado fundamental emitem radiação electromagnética na banda visível e na banda do infravermelho. Um filtro especial inserido entre os espelhos selecciona o comprimento de onda de emissão.



O bombeamento do laser é eléctrico (descarga eléctrica).

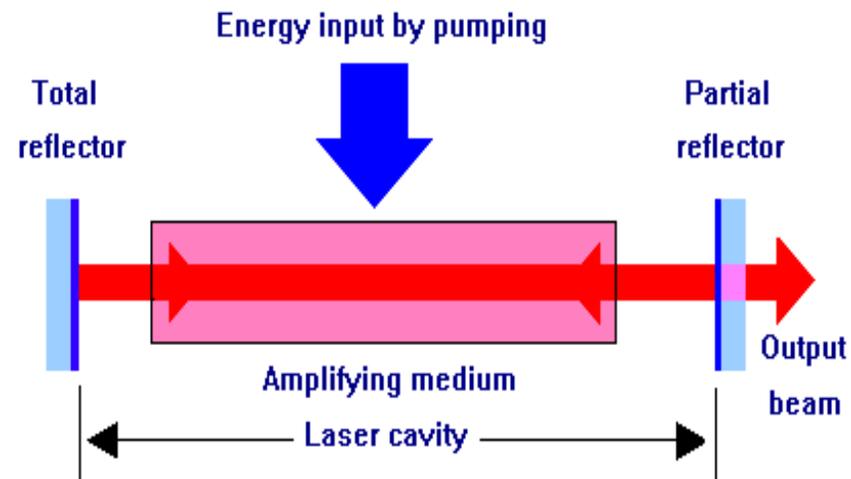
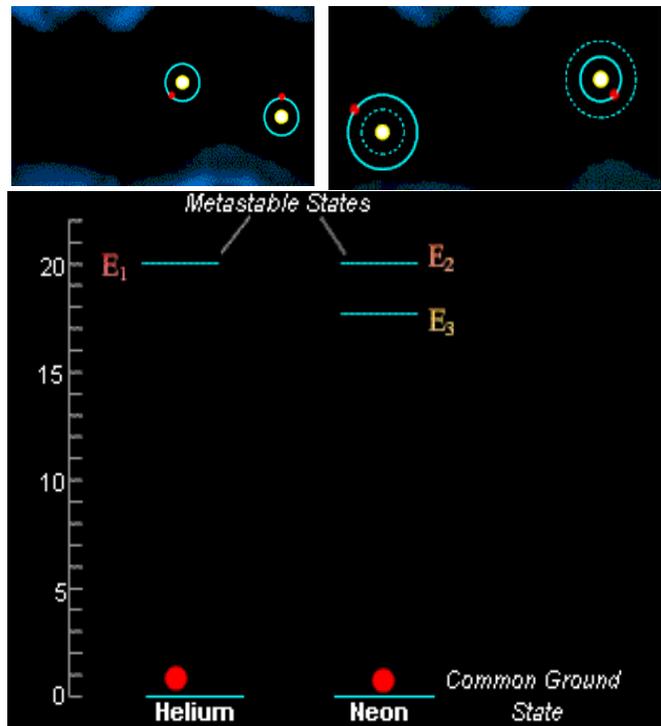


Laser de Hélio – Néon

O laser de hélio néon corresponde a um tubo contendo uma mistura destes dois gases, que são sujeitos a descargas eléctricas, produzindo radiação laser: radiação electromagnética intensa, coerente e *quasi*-monocromática. A descarga eléctrica excita os átomos de hélio que transferem por colisão o excesso de energia para os átomos de néon, que ao voltarem ao estado fundamental emitem radiação electromagnética na banda visível e na banda do infravermelho. Um filtro especial inserido entre os espelhos selecciona o comprimento de onda de emissão.

«**Bombeamento**» e mecanismo de re-alimentação

O bombeamento do laser de He-Ne é realizado através de uma descarga eléctrica.



A emissão laser (amplificação de luz) *estacionária* envolve pelo menos a participação de três níveis de energia. (ver, por exemplo, *Óptica*, E. Hecht; F.C. Gulbenkian, pp. 605-622).

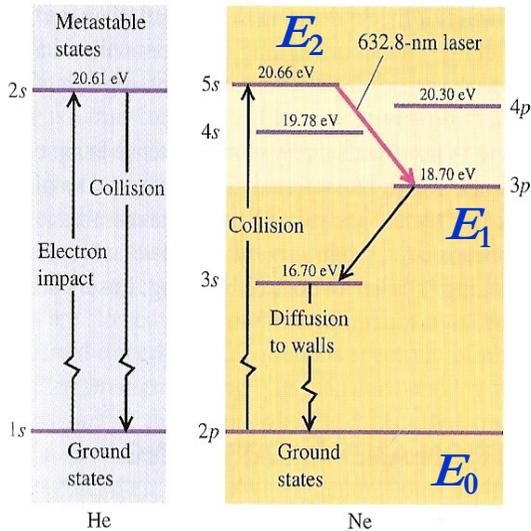
Outros sistemas laser.

Aplicações dos lasers

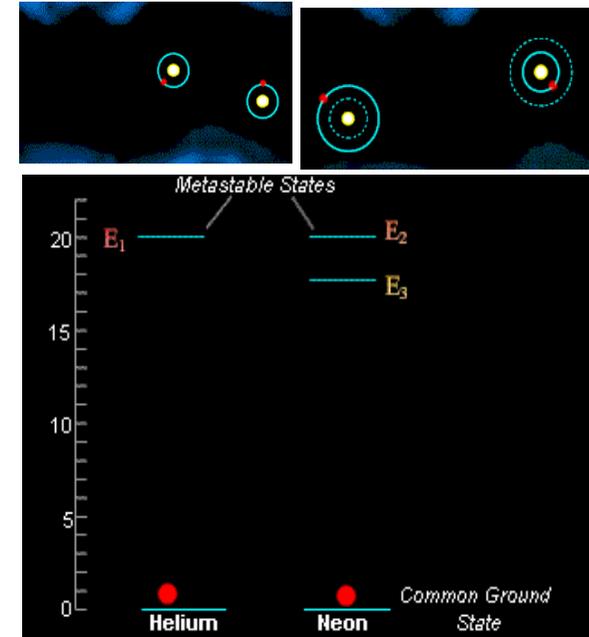
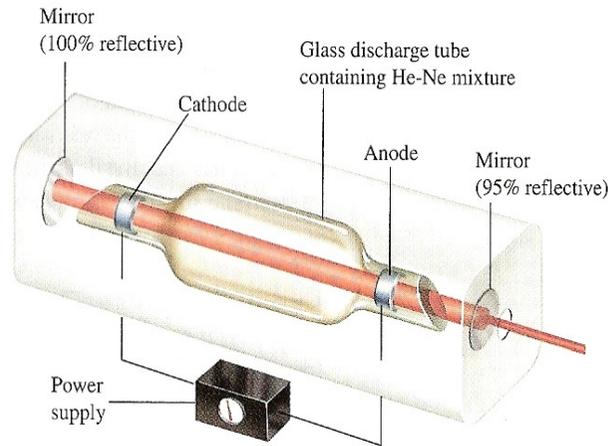
(Estes temas serão abordados mais tarde, em maior detalhe)

Lasers de Rubi e de Hélio – Néon

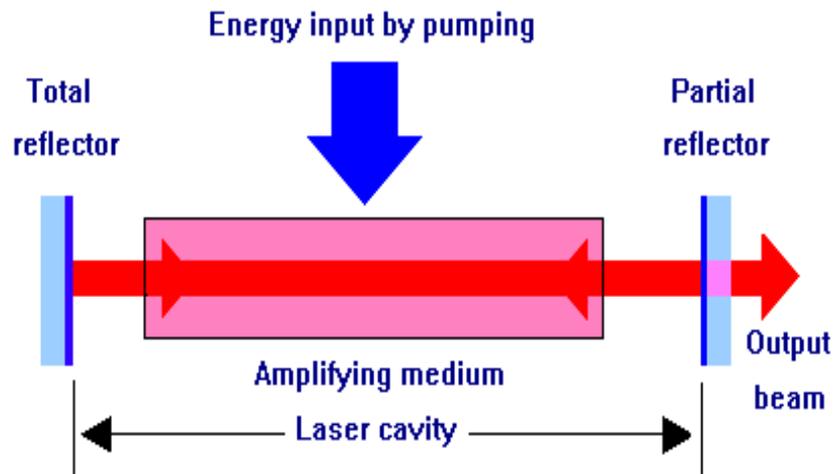
Laser de He – Ne



A ação laser envolve, em geral, pelo menos três níveis de energia.



«Bombeamento» e mecanismo de re-alimentação



Laser de Rubi

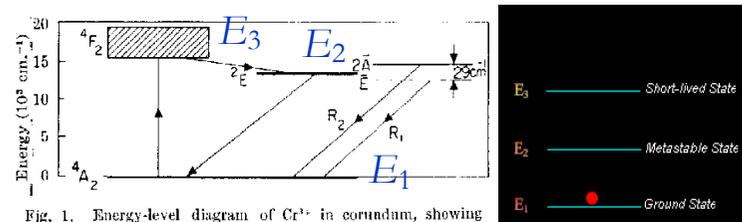
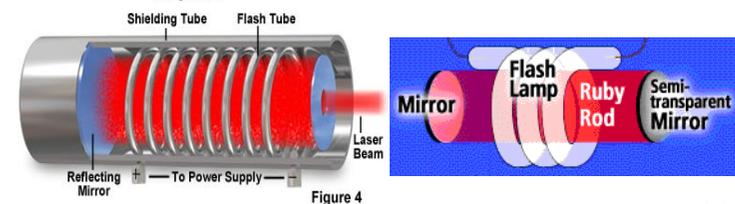


Fig. 1. Energy-level diagram of Cr^{3+} in corundum, showing pertinent processes
Ruby Laser



Lasers de Rubi

O **laser de rubi** foi o primeiro laser a ser demonstrado. Trata-se de um laser de estado sólido, isto é, o meio activo – meio laser – é um cristal de rubi.

Neste laser o bombeamento é óptico. Devido à baixa eficiência do processo laser, o laser de rubi é pulsado, isto é, emite pulsos de luz, em vez de um feixe contínuo.

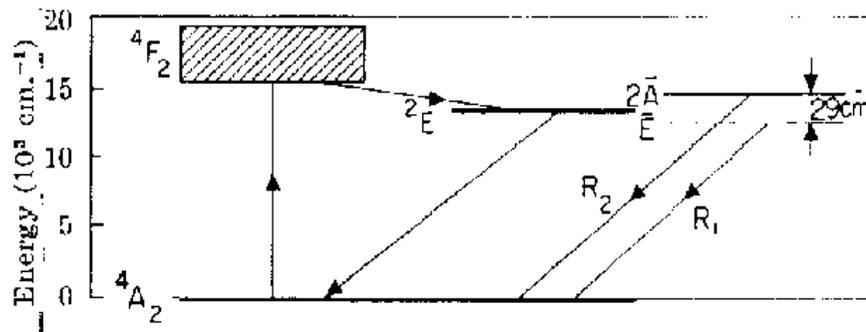
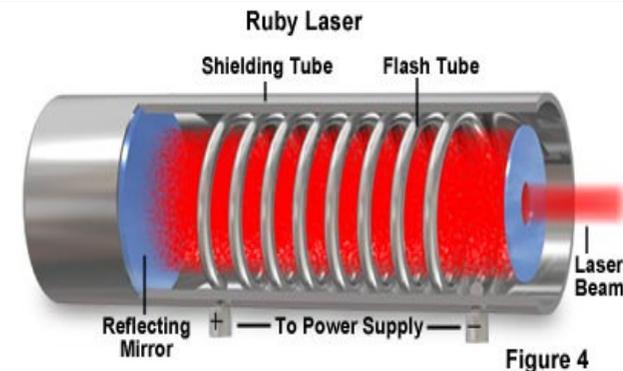
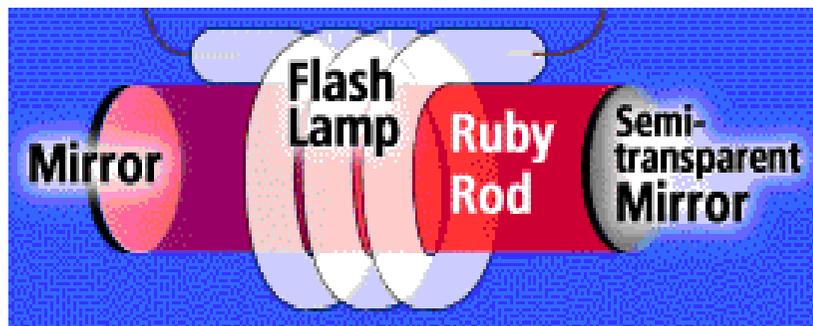
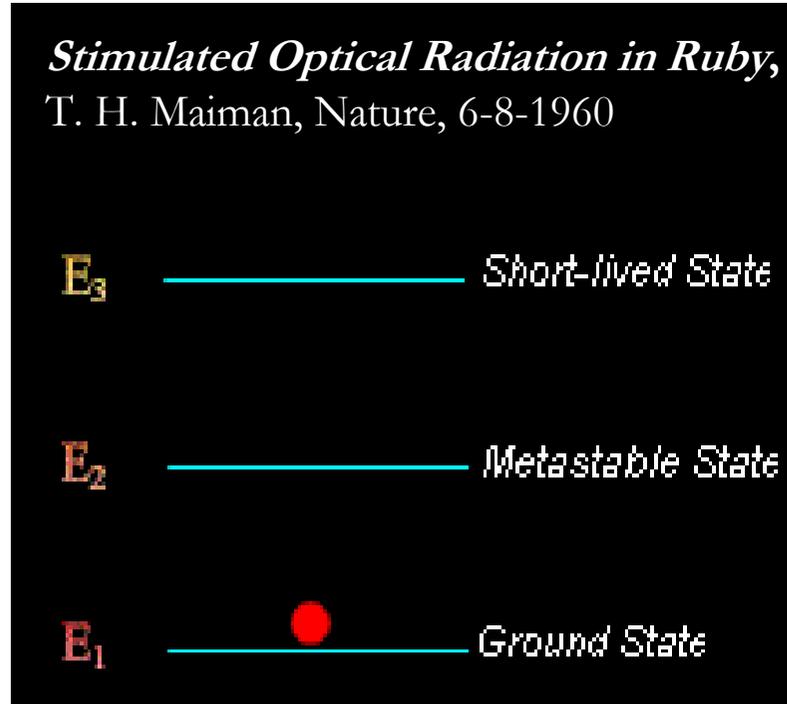
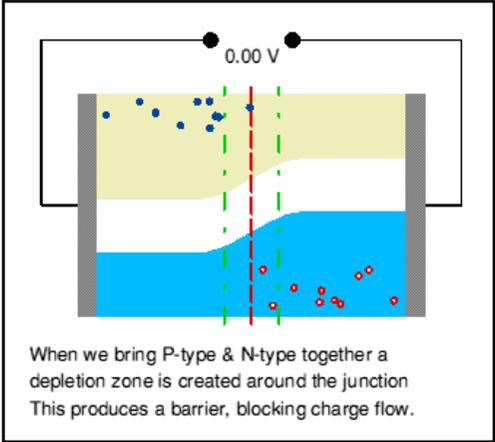


Fig. 1. Energy-level diagram of Cr^{3+} in corundum, showing pertinent processes

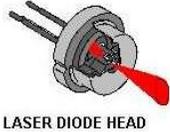
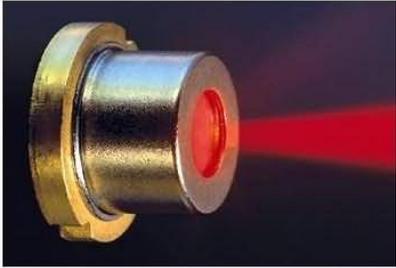


Pode ver algumas animações relacionadas com lasers em http://w3.ualg.pt/~jlongras/lope/Lasers_e_Optoelectronica.html.

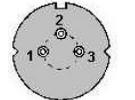
Laser de diodo (LD)



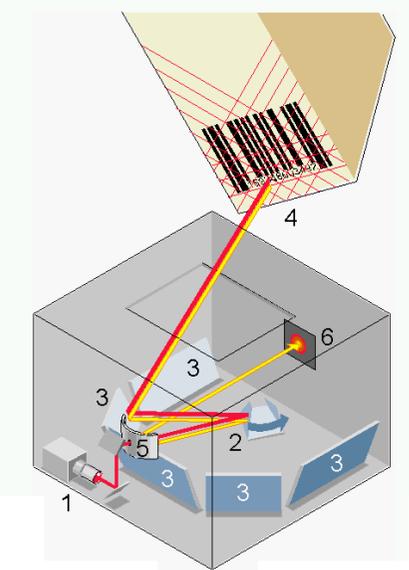
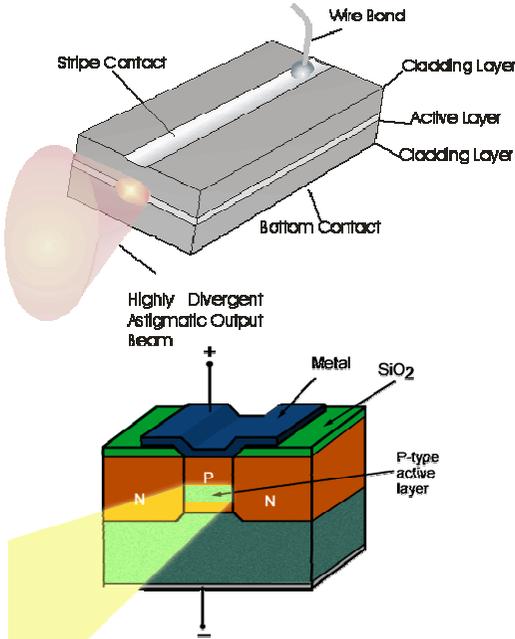
© J. C. G. Lesurf Univ. St. Andrews



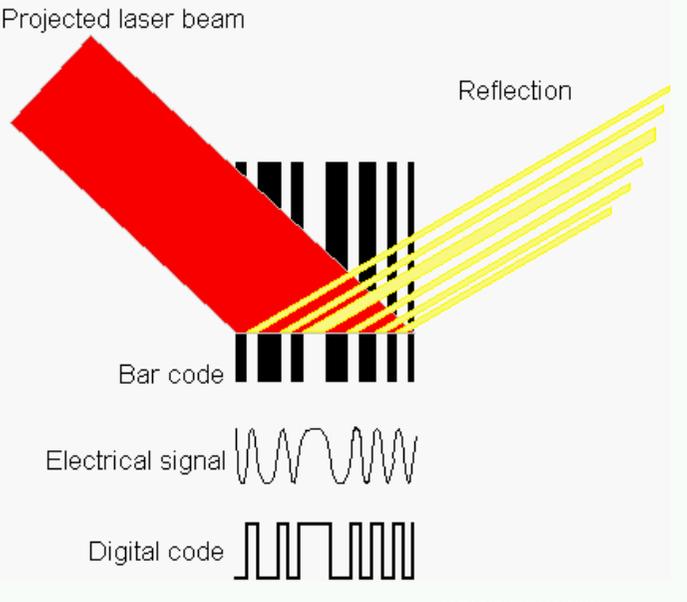
LASER DIODE HEAD



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



From Computer Desktop Encyclopedia © 1999 The Computer Language Co. Inc.

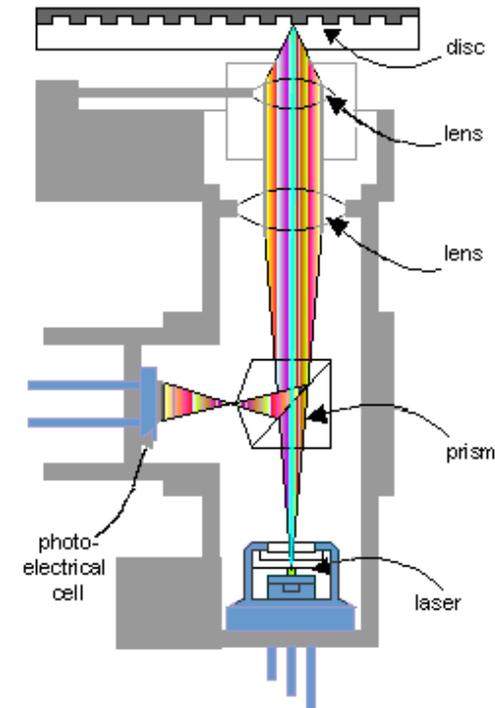
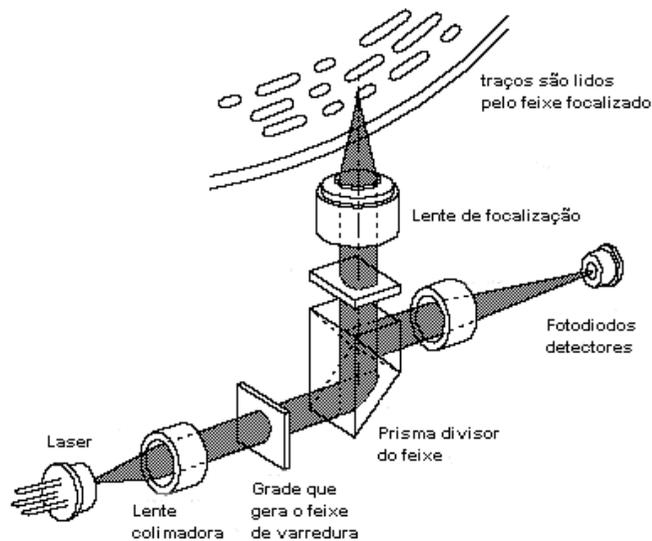
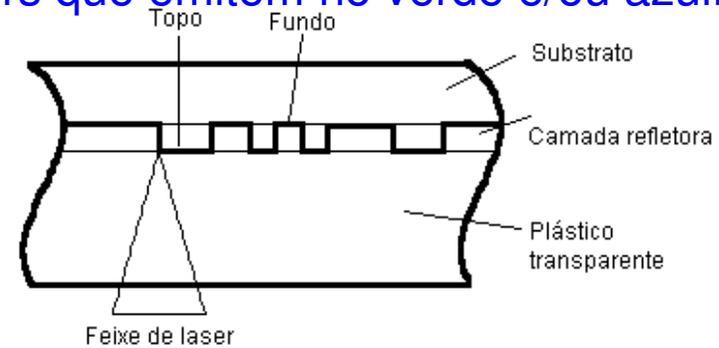
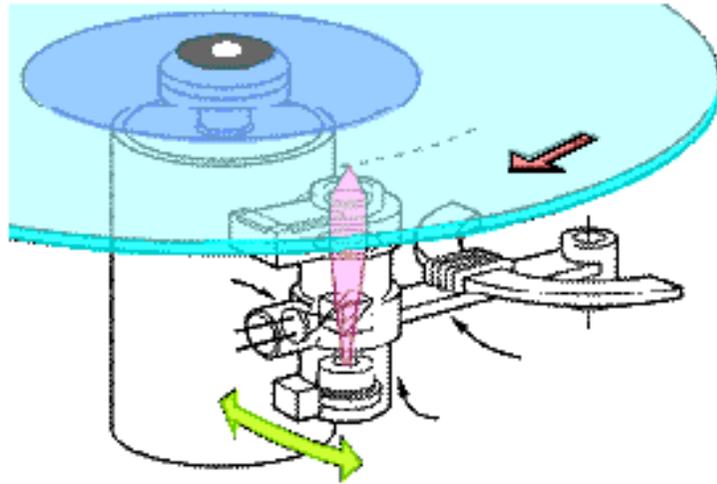


From Computer Desktop Encyclopedia © 1999 The Computer Language Co. Inc.

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

Leitores de CD e DVD

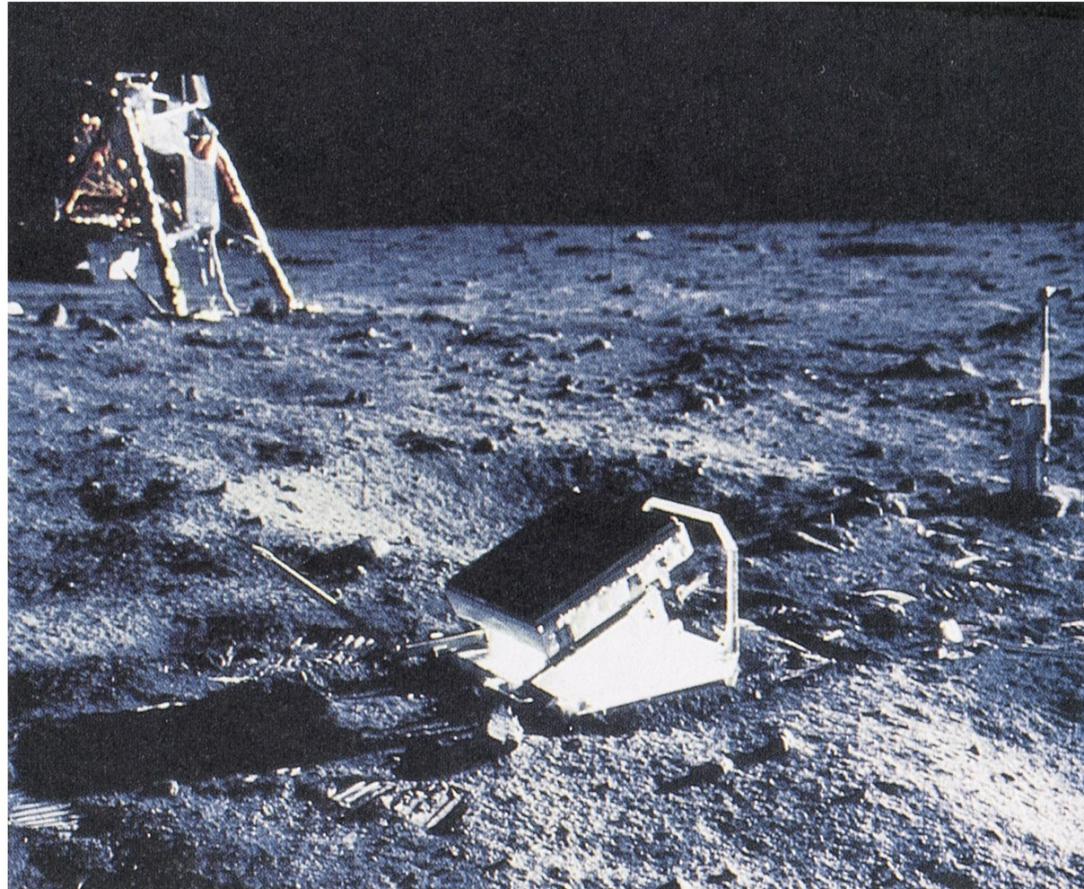
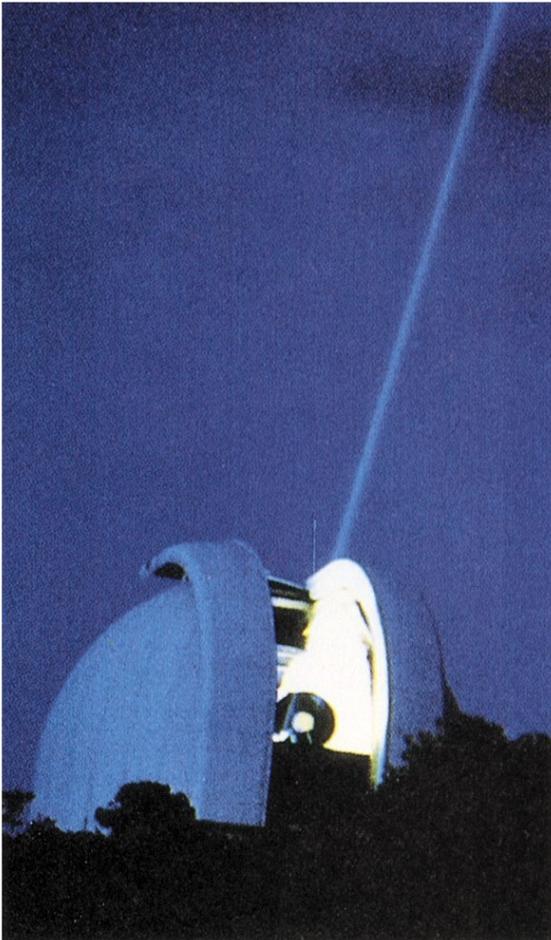
Os leitores tradicionais de CD/DVD usam lasers que emitem no infravermelho próximo ou no vermelho. O *blue ray* usa lasers que emitem no verde e/ou azul.



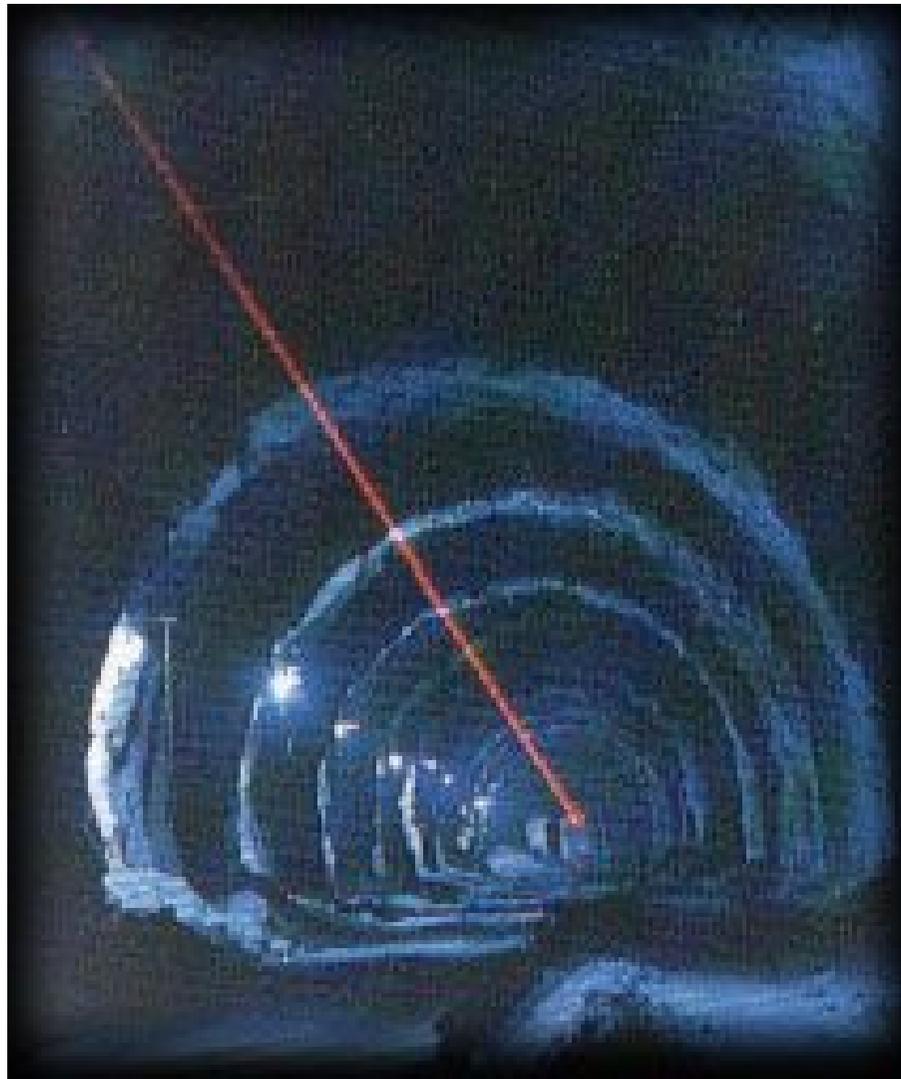
Medir a distância da Terra à Lua usando laser

Precisão de poucos centímetros.

A distância da Terra à Lua é de cerca de 380 000 km.



Exemplos de aplicações: metrologia e medicina



Cirurgia com Lasik, uma das técnicas de utilização do laser Eximer

1 Córnea
Primeiro o cirurgião corta e destaca uma aba à superfície, denominada lenticulo

2 Laser
Este é levantado e é aplicado o laser para destruir algumas células e tecidos corneanos. O objectivo é alterar a forma da córnea para corrigir os erros refractivos

3
Uma vez realizado este processo de fotoablação, volta a colocar o lenticulo no lugar, o qual funcionará como uma espécie de "penso" nos dias seguintes à operação

TIPOS DE ERROS REFRACTIVOS

Miopia
Ponto focal
Córnea Retina

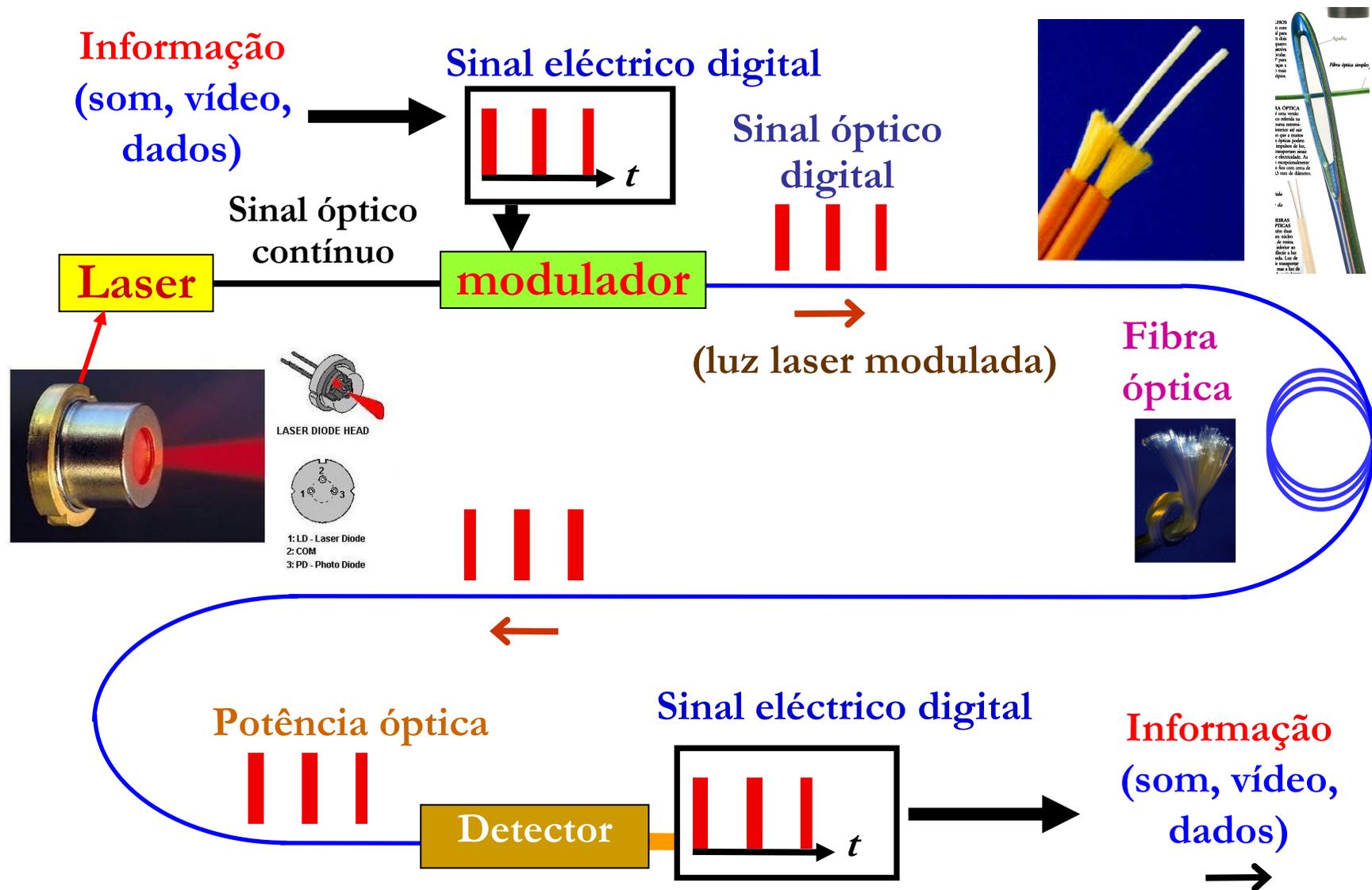
Hipermetropia
Ponto focal
Córnea Retina

Astigmatismo
Pontos de focagem
Córnea Retina

FONTE: "Laservue Eye Center, Califórnia" ANA SERRA

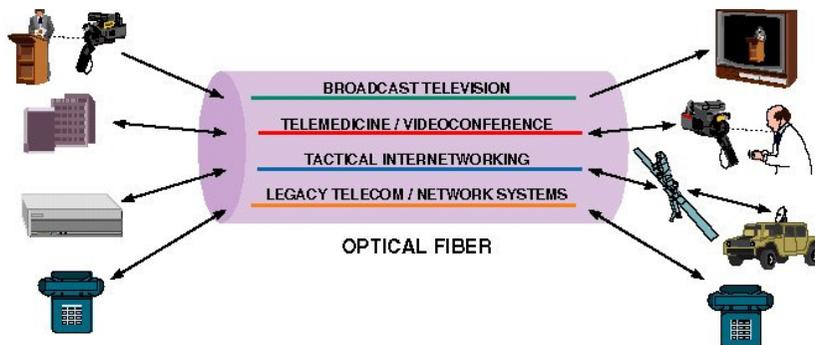
Aplicação dos lasers de díodo nas comunicações

Sistema de comunicação por fibra óptica de apenas um comprimento de onda.

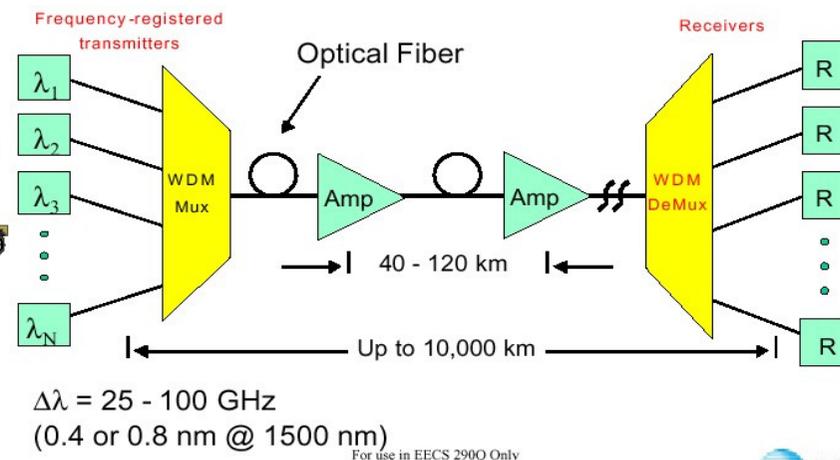


Redes avançadas de fibra óptica

Sistemas de comunicação por fibra óptica que usando muitos comprimentos de onda, que se propagam através de uma única fibra.



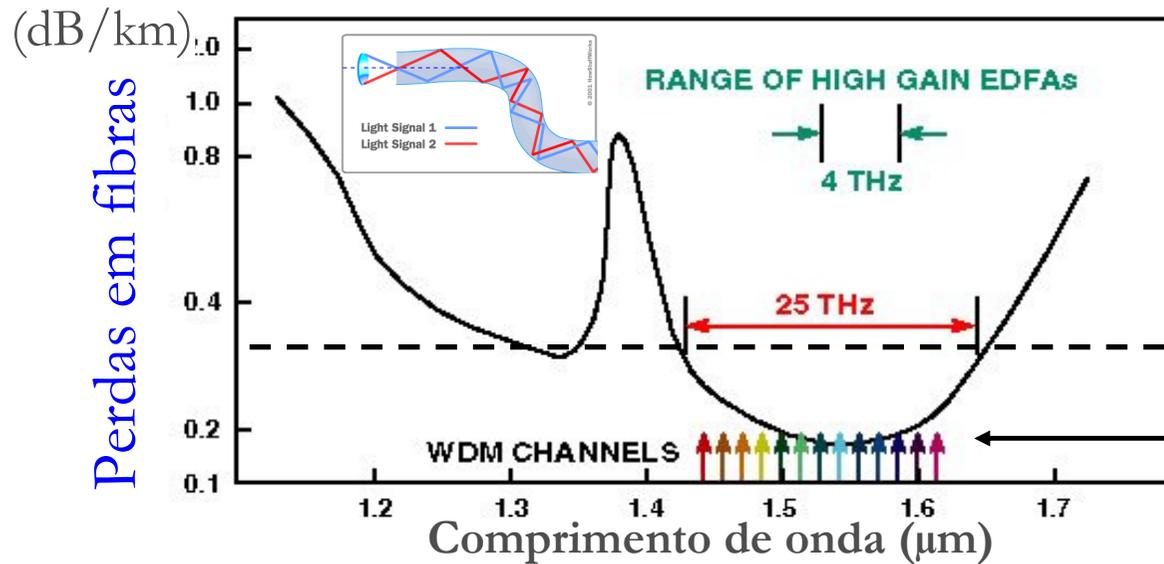
http://en.wikipedia.org/wiki/Wavelength-division_multiplexing



Multiplexador: a unidade funcional que torna possível que muitos sinais diferentes se propaguem pelo mesmo meio de transmissão.

A [Alcatel-Lucent](#) anunciou na conferência [OFC](#) (Optical Fiber Communication Conference), Fevereiro de 2008, que estabeleceu o [recorde mundial de transmissão óptica](#) em 25,6 terabits por segundo (Tbit/s) sobre uma única fibra, utilizando 160 canais WDM ([wavelength division multiplexing](#) - multiplexagem em comprimento de onda), o que corresponde a uma largura de Estes resultados ultrapassam de longe o recorde precedente de transmissão de 14 Tbit/s, estabelecido em Setembro de 2006.

Vantagens das redes de fibra óptica

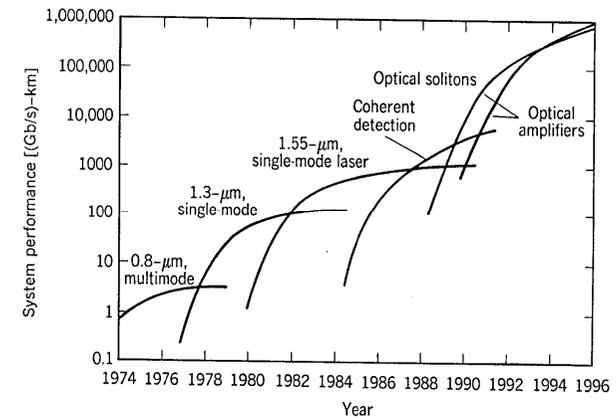
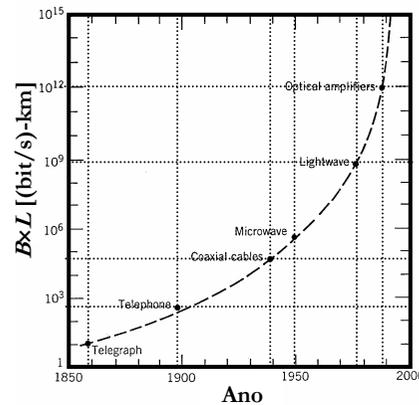
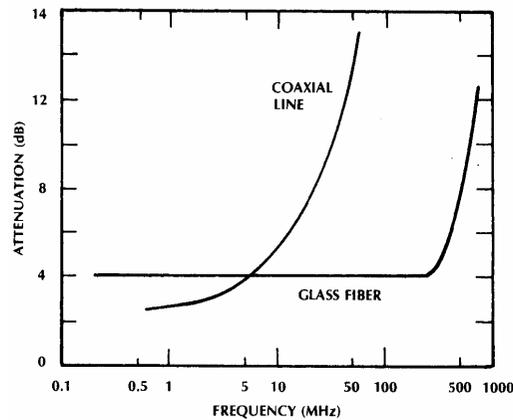


Elevada largura de banda:

25 THz!

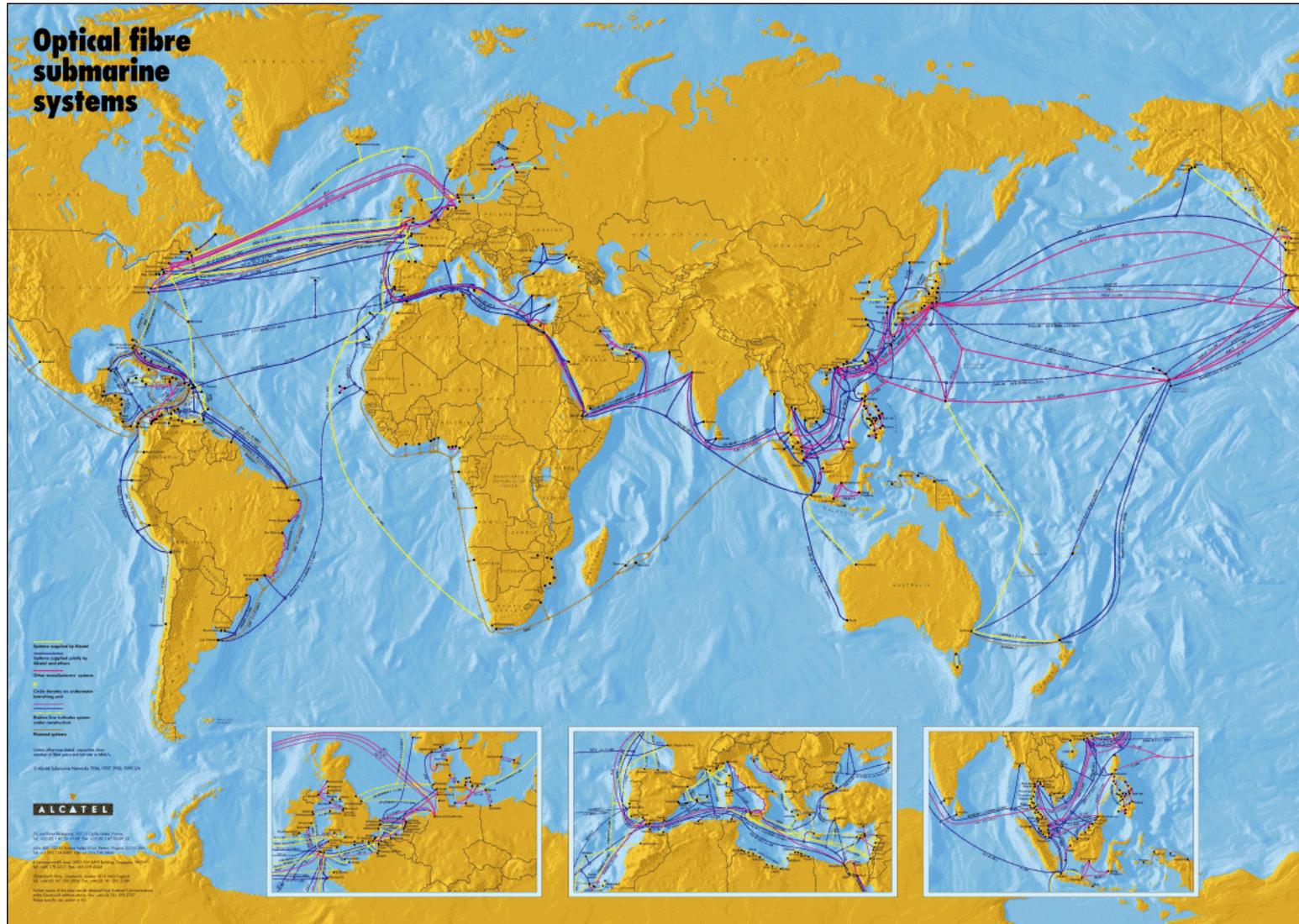
25 THz/50 GHz = 500 canais

(13 canais representados)

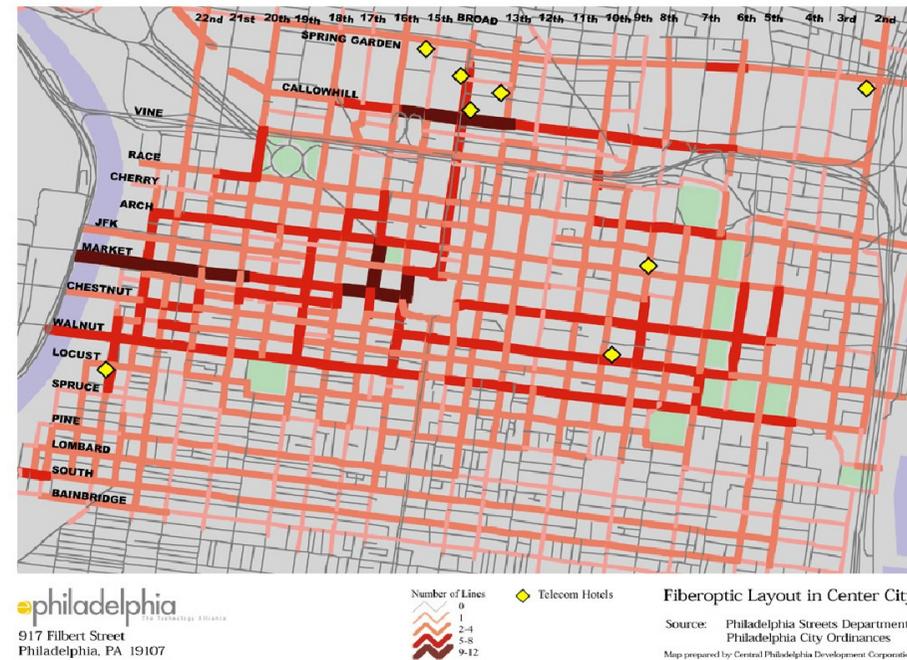
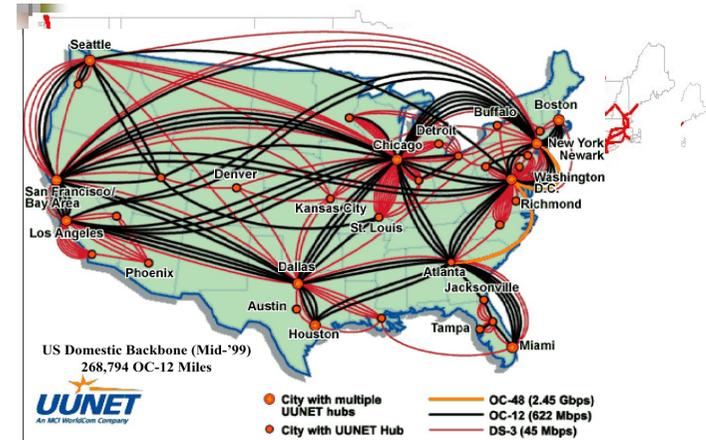


Bel é a unidade logarítmica usada em engenharia de telecomunicações, para comparar duas potências (modernamente usa-se mais o decibel, dB) (De A. G. Bell, antr., 1847-1922).

Cabos submarinos de fibra óptica

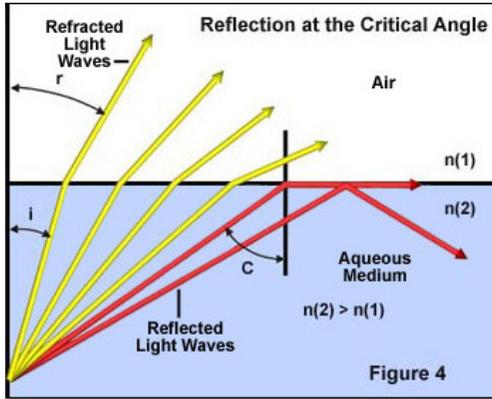


Redes de fibra óptica nos EUA

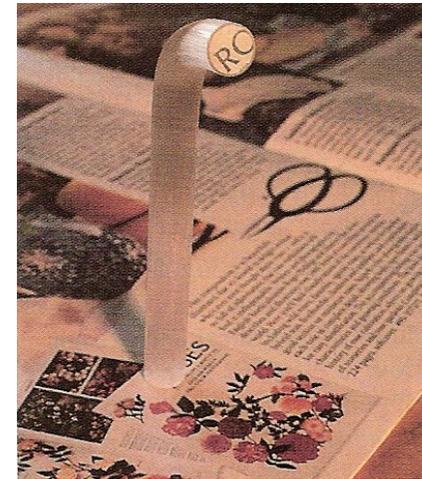
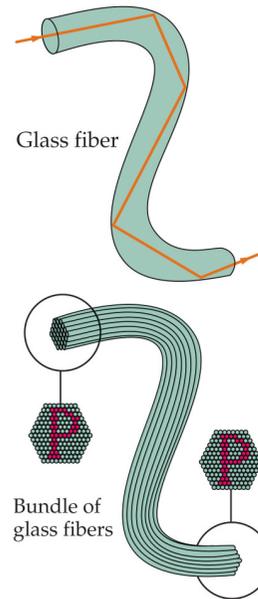
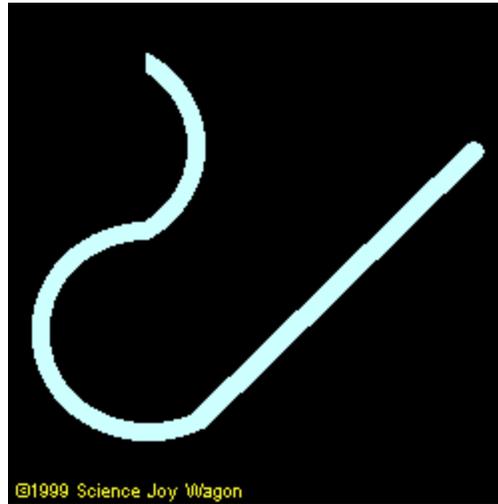
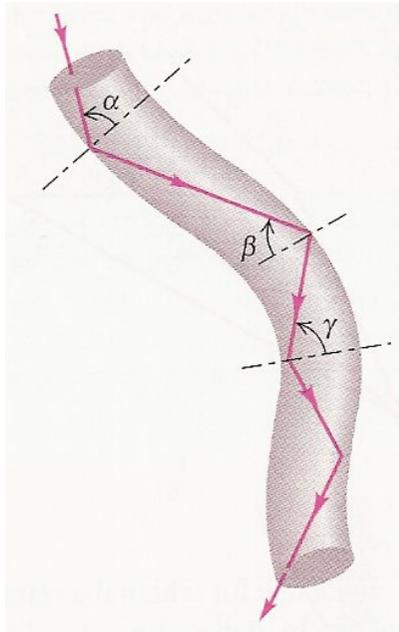
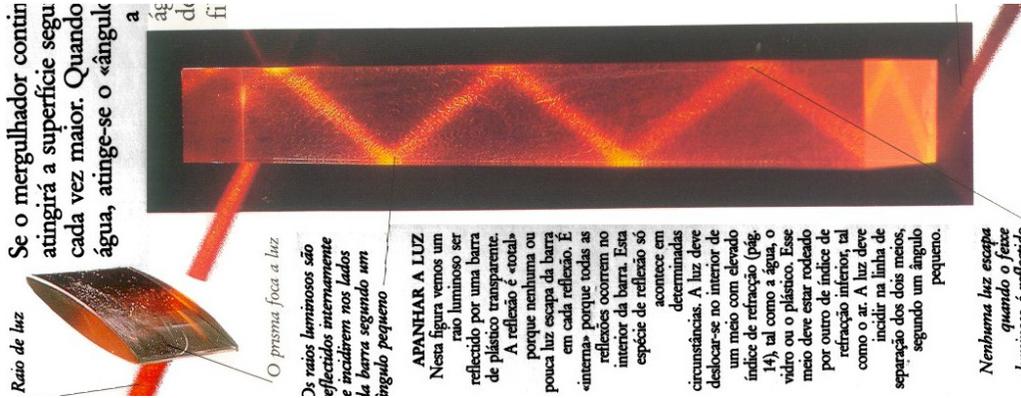


Reflexão interna total e fibras ópticas

Guiagem da luz



Se o mergulhador continuar a atingir a superfície de cada vez maior. Quando água, atinge-se o «ângulo



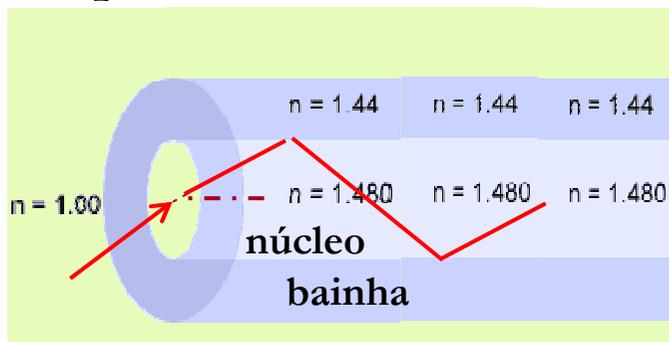
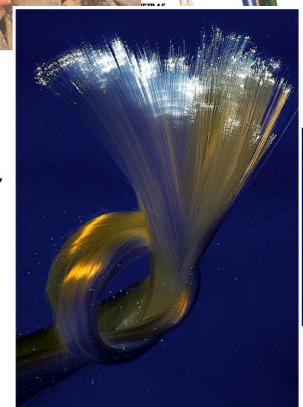
http://en.wikipedia.org/wiki/Optical_fiber

Fibras ópticas usadas em telecomunicações: fibra óptica monomodo

Fibras cujo diâmetro do núcleo é da ordem de $10 \mu\text{m}$.

Camada que reflecte a luz que viaja no núcleo (bainha, $\sim 125 \mu\text{m}$)

Cabo de fibra óptica para telecomunicações



O índice de refração do núcleo é ligeiramente superior ao da bainha. As fibras podem ser monomodo ou multimodo. Uma fibra é multimodo quando o diâmetro efectivo do núcleo é superior ao comprimento de onda.

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

A constelação de Órion (o caçador)

[http://pt.wikipedia.org/wiki/Orion_\(constela%C3%A7%C3%A3o\)](http://pt.wikipedia.org/wiki/Orion_(constela%C3%A7%C3%A3o))



A constelação de Órion (o caçador)

A constelação de Órion é bastante fácil de ser identificada, pois nela estão as Três Marias, formando o cinturão do gigantesco caçador.



Dualidade onda-partícula da luz

Teorias corpuscular e ondulatória da luz

De facto, a teoria da emissão, proposta por Newton em 1680, segundo a qual a luz é formada por um agregado de corpúsculos emitidos pela fonte luminosa, não sobreviria aos fenómenos associados às experiências de interferência e difracção, levadas a cabo no início do século XIX, essencialmente por Young e Fresnel, insusceptíveis de serem explicados pela teoria corpuscular da luz.

Estes fenómenos são facilmente explicados pela teoria ondulatória proposta por Huygens por volta de 1690. Os fenómenos de interferência são muito comuns na natureza (são facilmente observados, por exemplo, nas bolas de sabão, nas penas de pavão, nas asas de borboleta, etc.).

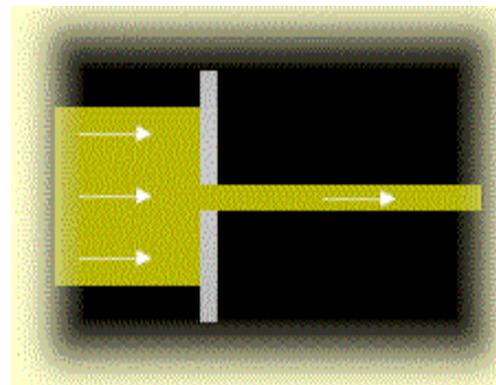
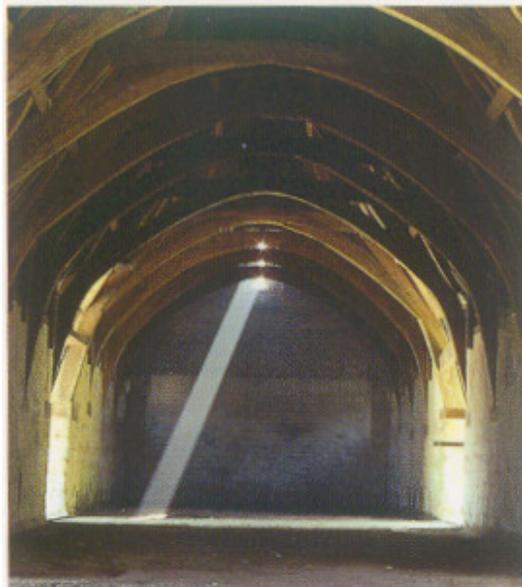
Para que se observe difracção é necessário que as *dimensões* dos «objectos» que a provocam sejam da ordem do comprimento de onda da luz. Por conseguinte, se quiser observar fenómenos de difracção com raios x é necessário empregar um objecto com *protuberâncias* da ordem de 0,1 nm. Von Laue demonstrou, em 1912, que os cristais tinham essas características – as distâncias entre átomos são dessa ordem de grandeza. Em 1913, os Bragg mostraram que as respectivas figuras de difracção podiam ser interpretadas como resultado da interferência de *raios reflectidos* em diferentes planos da rede cristalina.

Teoria corpuscular da luz (feixe de partículas)

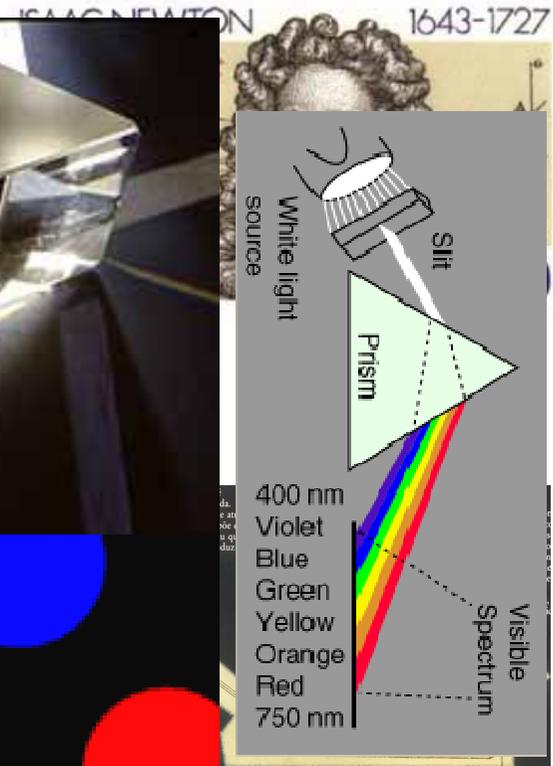
Newton, ~1660



Partículas de diferentes cores



Luz branca – feixe de partículas de *cores diferentes*



Com esta e outras experiências, Newton concluiu que a luz branca é uma mistura de muitas cores. O seu prisma desviava, ou refractava, as cores em diferentes quantidades, fazendo com que se espalhassem, ou dispersassem, de modo a poderem ser vistas.

O primeiro prisma decompõe a luz num espectro de cores.

O espectro projecta-se para um ecrã.

A luz vermelha não sofre alteração de cor ao atravessar o prisma.

Luz vermelha que não foi refractada.

A luz vermelha encontra um ecrã.

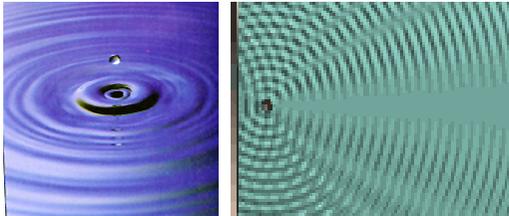
A luz vermelha encontra um ecrã.

Na Bíblia, o arco-íris é um sinal no céu que que o Dilúvio não se repetirá. Uma vez se que criando no pé de um arco-íris se se um pote de ouro. Mas por mais que se se, o pé nunca se alcança, porque os arco-íris são à frente do observador.

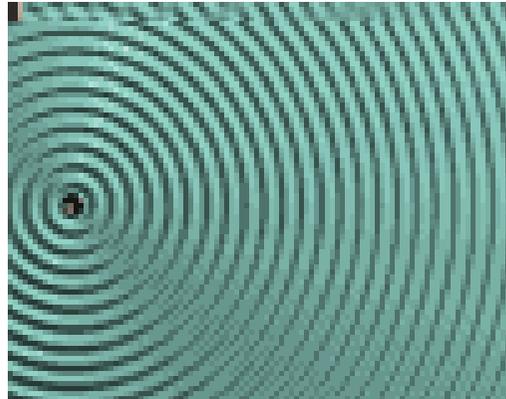
Teoria ondulatória da luz (Christiaan Huygens, 1670)

Ondas na água

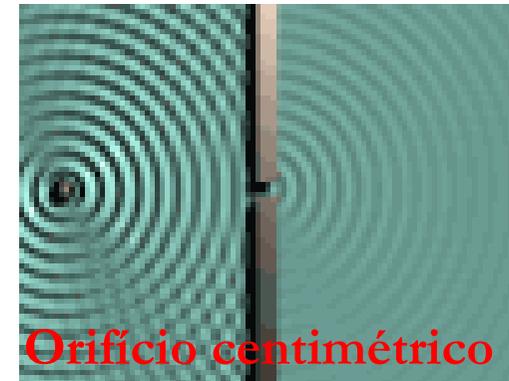
Comprimento de onda:
de alguns centímetros a
vários metros



Ondas na água

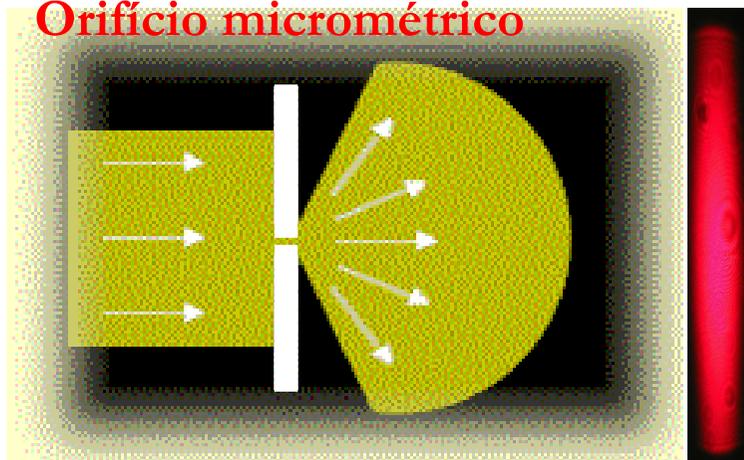


Difracção (água)



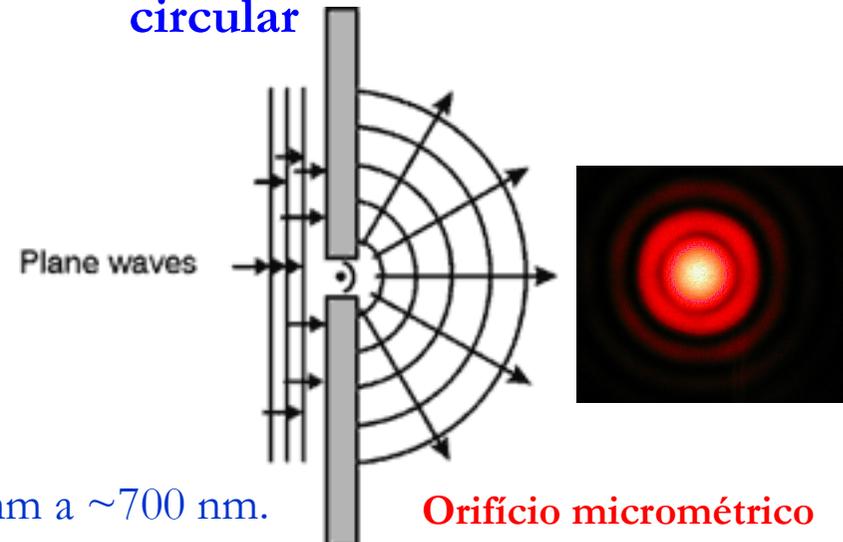
Difracção da luz numa fenda

Orifício micrométrico



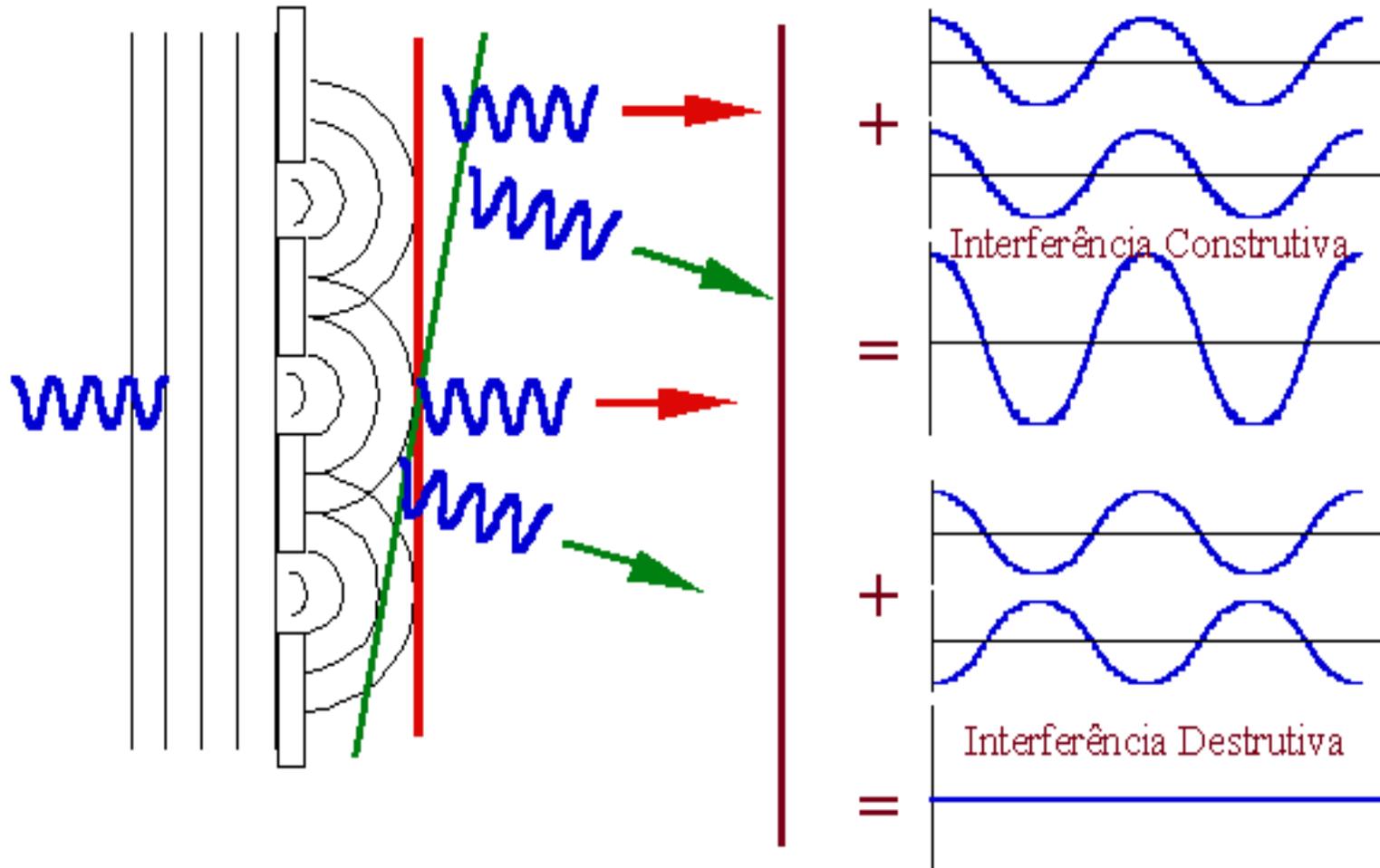
Comprimento de onda da luz visível: de ~ 400 nm a ~ 700 nm.

Difracção da luz num orifício circular



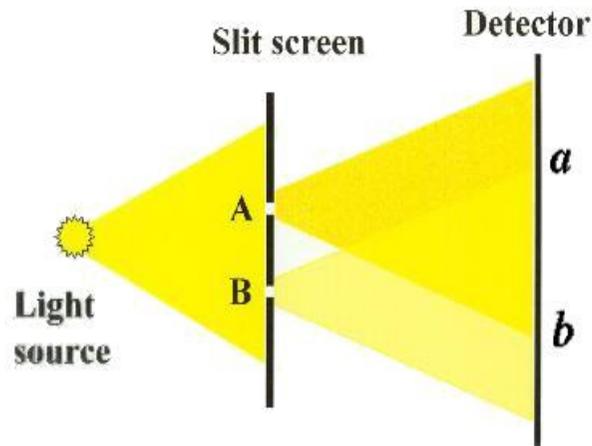
Ver: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/Difracção%20da%20Luz%20-%201%20fenda.wmv>

Revisão: Interferência construtiva e destrutiva

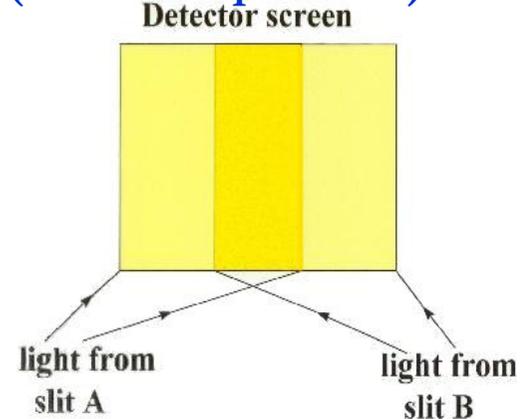


Experiência da dupla fenda e interferência

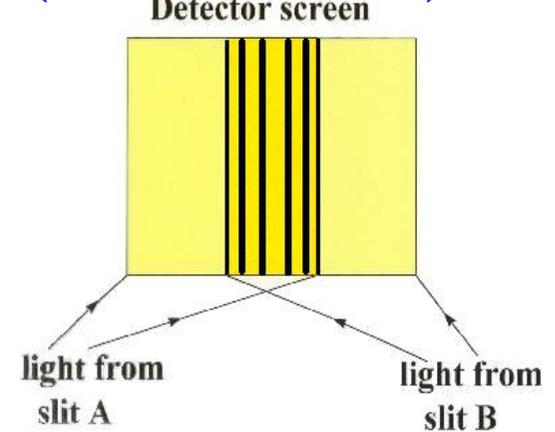
(Young, ~1800)



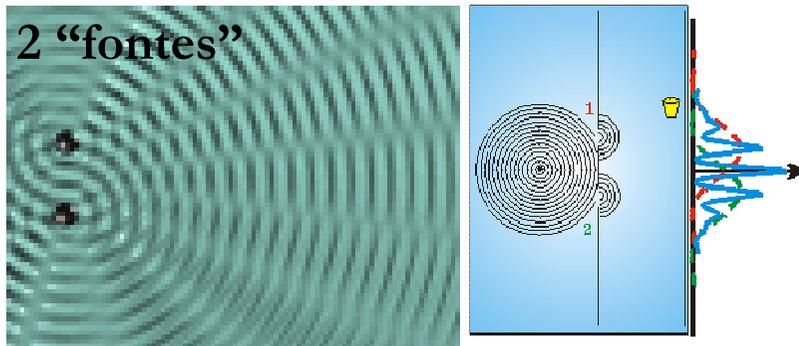
(Teoria corpuscular).



(Teoria ondulatória)



Interferência (água)



Interferência da luz

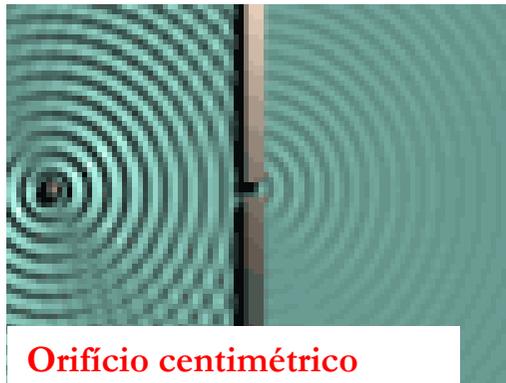


Ver interferência: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/DoubleSlit.swf>

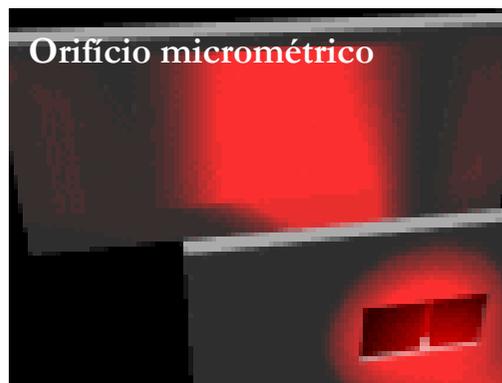
A reflexão e a refração da luz podem ser explicadas quer pela teoria ondulatória quer pela teoria corpuscular, mas os fenómenos de interferência, difração e polarização não são explicados pela teoria corpuscular. Por outro lado, o efeito fotoelétrico não tem explicação ondulatória.

De facto, quando se propaga a luz comporta-se como uma onda electromagnética ...

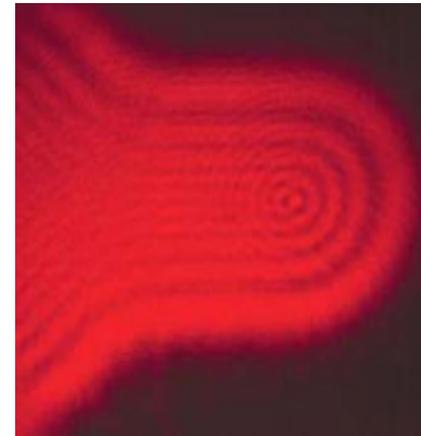
Difracção (água)



Difracção da luz

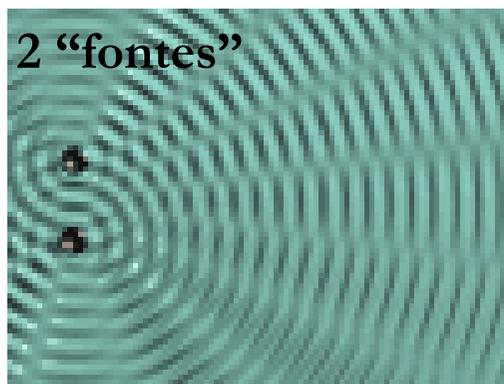


Difracção



Ver : <http://w3.ualg.pt/~jlongras/Difracção%20da%20Luz%20-%201%20fenda.wmv>

Interferência (água)



Interferência da luz



Padrão de cores devido à interferência



Ver interferência: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/DoubleSlit.swf>

Difracção de raios x

Por ser fácil a produção, a detecção e a manipulação (focagem, deflexão, etc.) de feixes de radiação electromagnética, este tipo de radiação é o mais frequentemente usado nas experiências de difracção em cristais.

A radiação interage principalmente com as nuvens electrónicas dos sólidos, e portanto a sua utilização permite a determinação da distribuição electrónica e, a partir daí, da estrutura cristalográfica e de outras propriedades relevantes dos sólidos.

Nas experiências de difracção em cristais usa-se radiação electromagnética da região do espectro correspondente aos raios - X, por ser a que apresenta os comprimentos de onda na gama apropriada. A energia de um fóton de raio X relaciona-se com o respectivo comprimento de onda λ por $E=h\nu=hc/\lambda$. Em unidades correntemente usadas no laboratório, obtém-se $\lambda(\text{nm})=1.24/E(\text{keV})$.

No estudo dos cristais, os fótons devem possuir energia compreendida entre 10 keV e 50 keV. Os raios X podem ser gerados tanto pela desaceleração de electrões num alvo metálico, quanto pela excitação dos electrões dos átomos do alvo. O primeiro processo produz um espectro contínuo largo; do segundo obtêm-se linhas acentuadas.

Um alvo de cobre bombardeado por electrões produz uma linha forte $\text{CuK}\alpha$ centrada a 0.15418 nm: *são os electrões do cobre que espalham os raios X; os núcleos de cobre não espalham os raios X devido à sua elevada massa.*

Difracção dos raios x em cristais

Quando um feixe de raios-X incide num cristal é espalhado (i.e., é absorvido e re-emitido) pelos átomos do cristal. As ondas espalhadas podem interferir da mesma forma que as ondas difractadas numa rede de difracção. Em 1912, Friederich Knipping e Max von Laue verificaram que os feixes de raios-X espalhados pelos cristais formavam um padrão de interferência, que registaram num filme fotográfico.

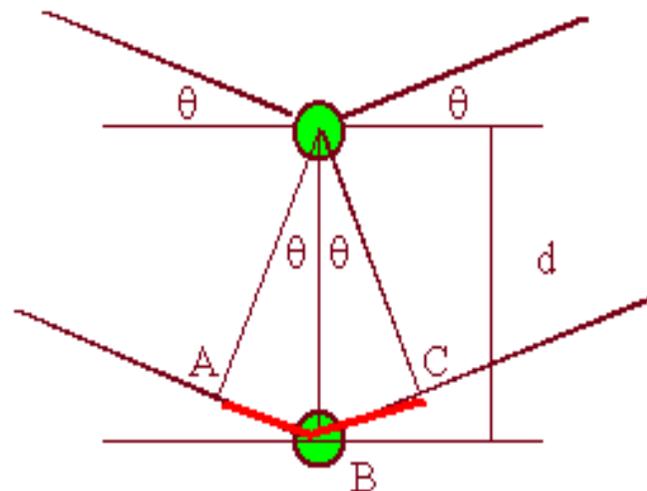
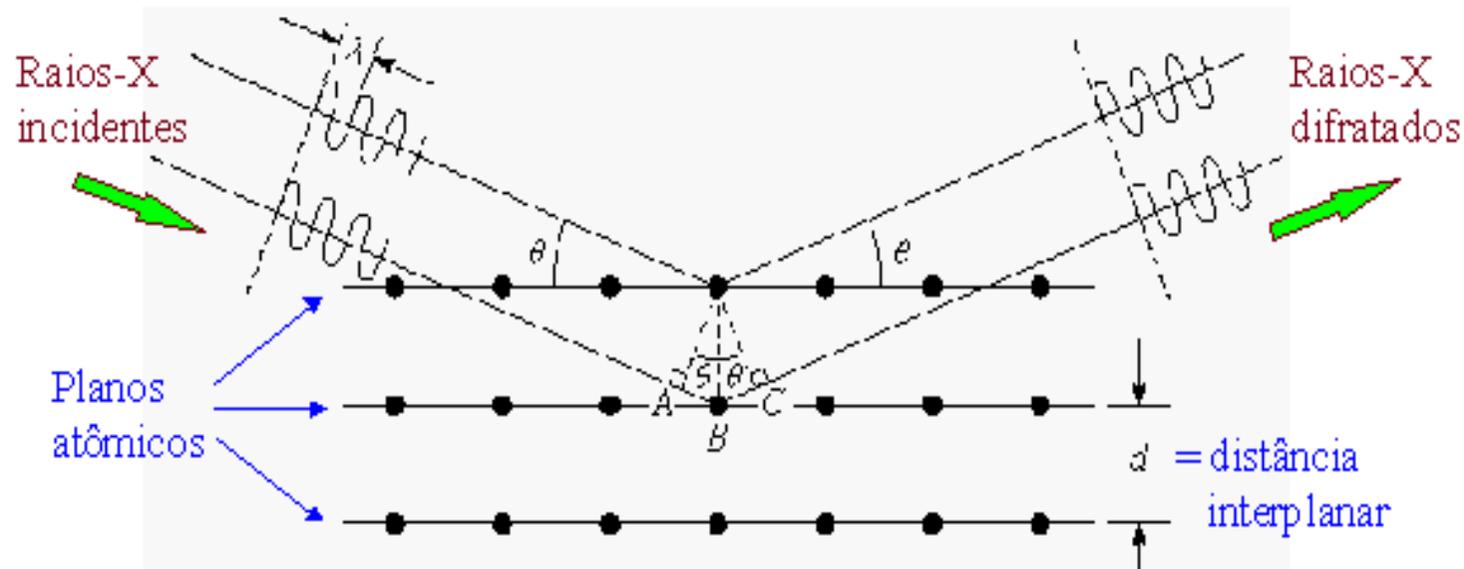
No caso de ondas electromagnéticas, as ondas incidentes induzem um momento dipolar eléctrico oscilante em cada centro de espalhamento (átomo). Estes dipolos actuam como antenas, re-emitindo a energia na forma de ondas esféricas. A distribuição de intensidade num dado plano resulta da sobreposição de todas as ondas re-emitidas. Este fenómeno é fisicamente diferente do que ocorre numa rede de difracção, onde as ondas “emitidas” pelas fendas da rede estão em fase no plano da rede de difracção (assumindo que a onda incidente é plana e normal ao plano da rede). No caso da “difracção” num cristal, as ondas re-emitidas não estão todas em fase porque as distâncias dos centros de espalhamento à fonte são, em geral, diferentes. O padrão de interferência num determinado plano é o resultado da sobreposição de todas as ondas espalhadas, que depende das diferenças de caminho das várias ondas espalhadas, incluindo as distâncias entre a fonte e os centros de espalhamento e destes ao plano de observação.

As condições para que a radiação espalhada atinja o plano observador em fase são:

- i) O ângulo de incidência deve ser igual ao ângulo de espalhamento;**
- ii) A diferença de fase para planos cristalinos adjacentes corresponder a um múltiplo do comprimento de onda da radiação (lei de Bragg).**

Nas direcções para as quais $2d\sin\theta = m\lambda$ é satisfeita, observa-se um máximo local na intensidade no padrão de interferência.

A lei de Bragg



Diferença de caminho dos dois raios:

$$AB + BC = 2AB = 2d \sin \theta$$

Condição para interferência construtiva

$$2d \sin \theta = n \lambda$$

onde n é um número inteiro e

λ é o comprimento de onda do raio-x

A lei de Bragg (cont.)

- A lei de Bragg relaciona quatro variáveis:

☞ $2d\sin\theta = n\lambda$

↳ λ - o comprimento de onda dos raios-X

- pode assumir apenas um valor (monocromático)
- pode assumir muitos valores - raios-X “brancos” (policromáticos)

↳ d - o espaçamento entre os planos

- pode assumir diferentes valores, em função do conjunto de planos que difrata o feixe de raios-X

↳ θ - o ângulo de incidência dos raios-X

- pode variar continuamente dentro de uma faixa
- pode variar aleatoriamente em função da posição relativa dos diversos mono-cristais que formam uma amostra poli-cristalina

↳ n - a ordem da difração

Difracção dos raios x

A padrão de interferência pode ser descrito em termos de reflexões pelos diferentes planos. Fortes reflexões (interferência construtiva) ocorrem para as direcções em que o ângulo de incidência é igual ao ângulo de espalhamento e $2d\sin\theta=m\lambda$ é satisfeita. Este fenómeno é conhecido como a **reflexão de Bragg**. A relação $2d\sin\theta=m\lambda$ é também designada como condição de Bragg.

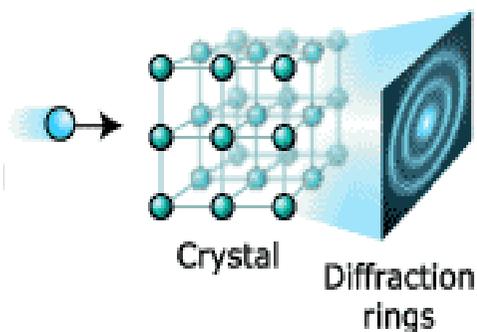
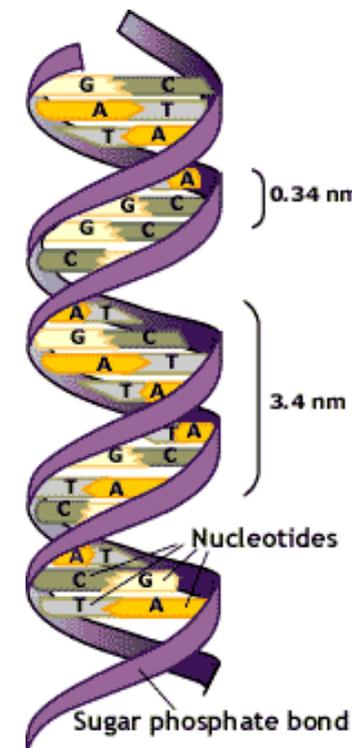
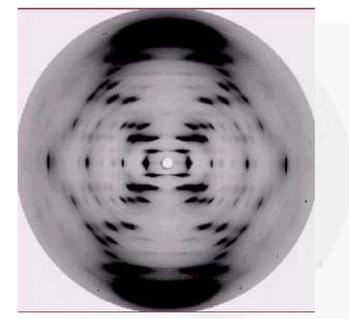
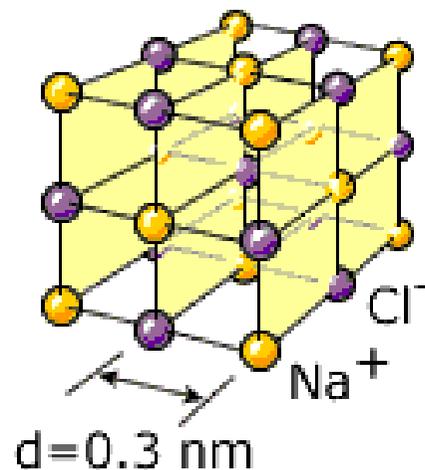
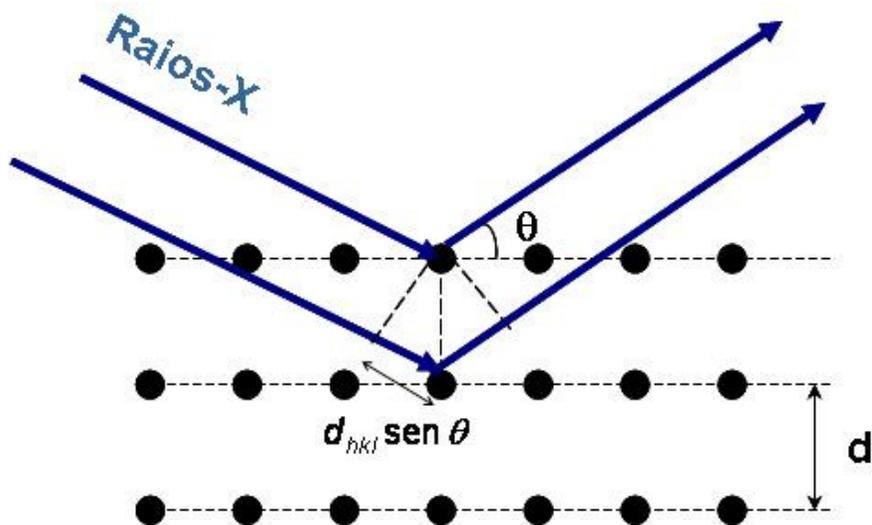
Convém referir que o fenómeno resulta de efeitos de interferência. De facto, as reflexões nos vários planos são análogas aos efeitos de interferência em filmes finos. Em resumo, na difracção de raios-X só ocorre interferência construtiva em certas regiões correspondentes a direcções específicas, havendo interferência destrutiva nas regiões correspondentes a todas as outras direcções. A distribuição de intensidade é, usualmente, conhecida como **padrão de difracção**, embora **padrão de interferência** seja a designação mais apropriada.

Pode-se determinar o comprimento de onda dos raios x examinando o padrão de difracção de um cristal com estrutura e espaçamento entre átomos conhecidos, da mesma forma que se pode determinar o comprimento de onda da radiação visível analisando o padrão de difracção de uma rede de difracção. Uma vez conhecido o comprimento de onda dos raios x, estes podem ser usados para estudar a estrutura, e determinar o espaçamento entre átomos num cristal com estrutura desconhecida.

A difracção de raios x é de longe a ferramenta experimental mais importante na investigação de estruturas cristalinas. Tem também um papel importante no estudo da estrutura dos líquidos e de moléculas orgânicas. Foi a técnica que mais contribuiu para a descoberta da estrutura em dupla-hélice do ADN, que permitiu muitos dos avanços na área da genética molecular.

Difracção dos Raios X

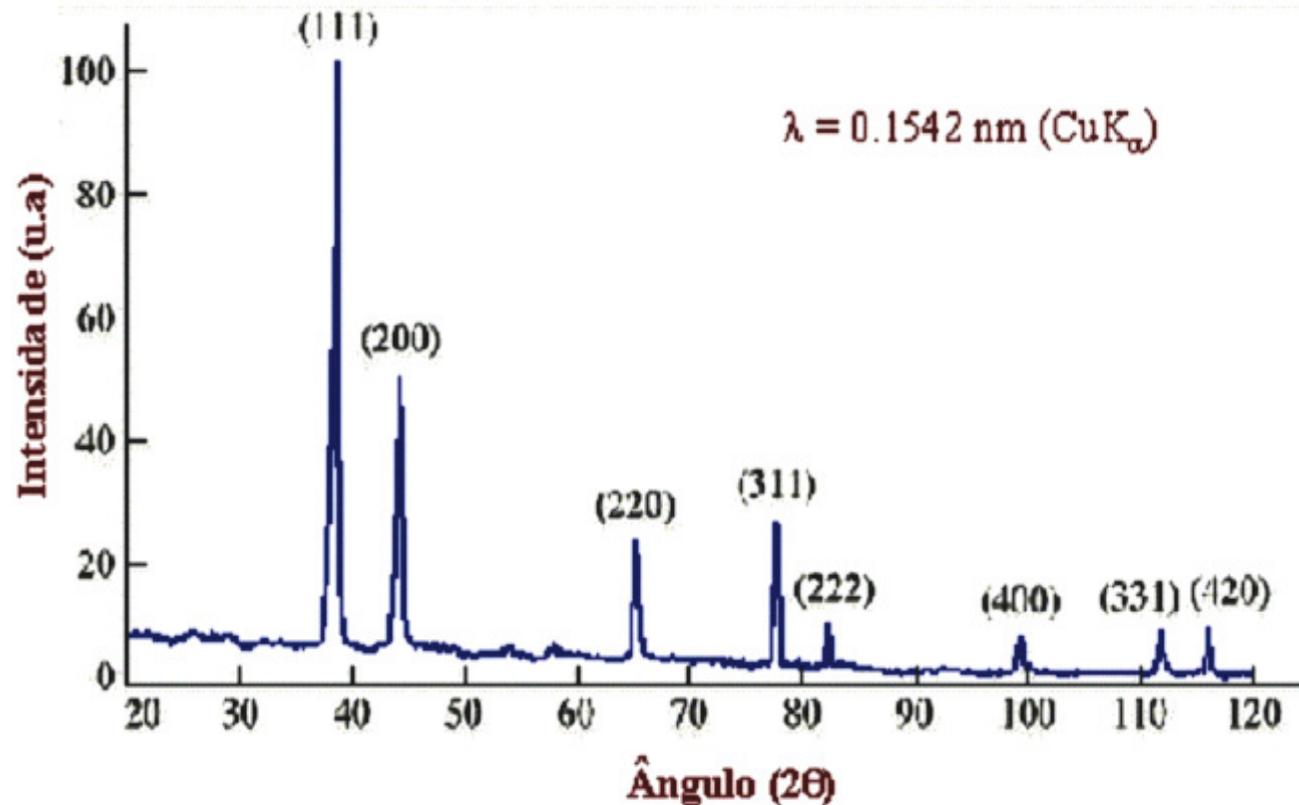
Ver http://w3.ualg.pt/~jlongras/sim01_raiox.swf



Ver http://w3.ualg.pt/~jlongras/cristal_proteina.swf

Relação de Bragg para a difracção dos raios x: $2d\sin\theta = m\lambda$, onde θ representa o ângulo entre o feixe espalhado e a perpendicular aos planos de atómicos.

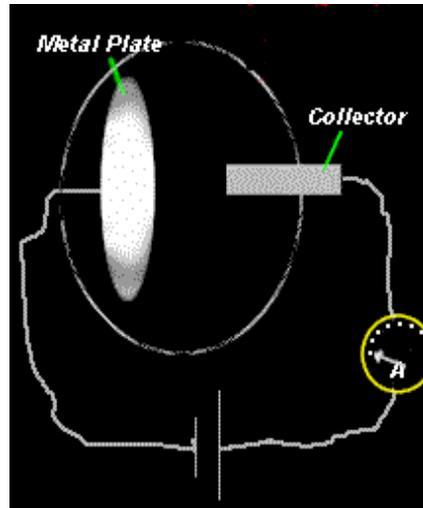
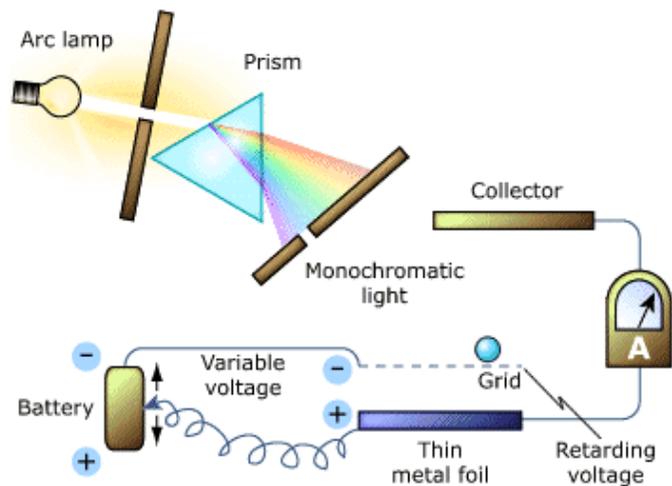
Exemplo: Espectro de difracção para o alumínio



Uma amostra desconhecida é estudada por um dos métodos de análise atrás referidos. Os seus espectros são comparados com os de materiais conhecidos, que estão tabelados, permitindo a identificação do material.

Mas quando interage com a matéria, a luz comporta-se como sendo um feixe de partícula ... os fótons

Efeito fotoelétrico: os fótons “arrancam” electrões de alguns materiais



Quando a luz incide na placa metálica, alguns electrões dos átomos da superfície são arrancados, sendo atraídos para o colector que está a um potencial positivo relativamente à placa metálica, criando-se uma corrente eléctrica no circuito (ver ponteiro do amperímetro).

Este efeito é usado nas lojas e elevadores



O fóton é o «quantum» de radiação electromagnética (luz) cuja energia é igual ao produto da frequência da radiação pela constante de Planck $h\nu$, onde ν é a frequência da radiação e h é a constante de Planck, uma constante universal (do gr. phōs, «luz» + -ão).

Dualidade onda – corpúsculos da luz

Contudo, a teoria ondulatória era incapaz de esclarecer os processos de emissão e absorção da radiação pela matéria. Recordar que todos os átomos de um gás de hidrogénio, por exemplo, emitem a mesma série de linhas espectrais bem nítidas.

Planck considerou em 1900 que as leis da radiação exigiam que a emissão e a absorção de energia pela matéria não tivessem lugar continuamente, mas por «quanta de energia» finitos hf , onde f representa a frequência do quantum.

Na hipótese inicial de Planck, cada risca corresponde a um oscilador harmónico de frequência definida f , que não pode absorver ou emitir uma quantidade arbitrária de energia, mas só múltiplos inteiros de hf . Einstein foi mais longe, em 1905, afirmando que tais propriedades são inerentes à própria natureza da radiação.

Na hipótese dos quanta de luz (mais tarde designados fotões), a luz é constituída por quanta (corpúsculos) de energia hf que se propagam no espaço como uma *saraivada de projecteis*, com a velocidade da luz no vazio.

O efeito fotoelétrico, uma transformação *directa* da luz em energia mecânica, é facilmente explicado se se admitir que a luz é constituída por quanta. Estas evidências foram reforçadas com as experiências de E. Meyer e W. Gerlach sobre o efeito fotoelétrico em partículas de pó metálico.

Generalização da dualidade onda – corpúsculo

Os fenómenos até aqui referidos apenas indiciam que a *troca* de energia entre a luz e os átomos se realiza por quanta de energia. A natureza corpuscular da luz é demonstrada claramente pelas leis da variação da frequência na experiência da dispersão dos raios x estudada por Compton, ininteligível pela teoria ondulatória.

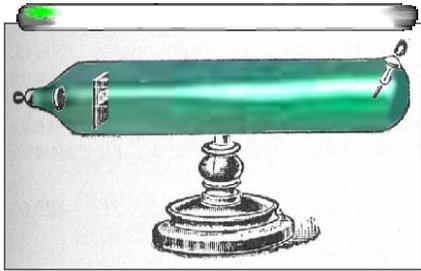
A dispersão de Compton corresponde a um processo em que a radiação se comporta como um corpúsculo de energia e momento linear bem definidos. Estes fenómenos não podem ser explicados pela teoria ondulatória, da mesma forma que os fenómenos de interferência não são reconciliáveis com a concepção corpuscular da radiação.

As ideias a que chegámos até agora, no que respeita à estrutura da matéria, são confirmadas por experiências directas e indirectas, que revelam a existência de partículas cujas trajectórias podem ser «observadas», por exemplo, na câmara de Wilson. Estas experiências estabelecem, sem qualquer espécie de dúvida, que a matéria é formada por corpúsculos.

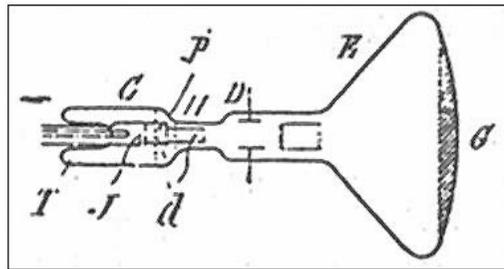
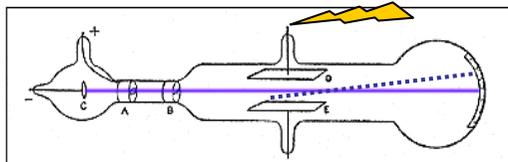
Contudo, há também, como veremos, um conjunto de experiências que, de maneira igualmente definida, apenas parecem conciliáveis com a ideia de que um feixe molecular ou electrónico é um **trem de ondas** (do inglês, “wave train”).

Natureza Ondulatória da Matéria

Revisão: Descoberta do electrão



Em geral, um gás a baixa pressão é mau condutor de electricidade. Porém, encerrando o gás num vaso com dois eléctrodos nas extremidades, precursor do tubo de Geisser, e aplicando uma tensão suficientemente elevada entre os eléctrodos, ocorre transporte de electricidade e ao mesmo tempo o gás torna-se luminoso. Se a pressão for inferior a 10^{-3} mmHg, a luminescência desaparece mas observa-se a presença de raios procedentes do cátodo que provocam o aparecimento de uma fluorescência no vidro da parede oposta do tubo. Em certas circunstâncias estes raios são visíveis directamente sob a forma de um traço azulado que atravessa o tubo a partir do cátodo. Estes raios chamam-se raios catódicos.



Early television tube.

Estes raios podem ser deflectidos da sua trajectória rectilínea por campos externos, eléctricos ou magnéticos, de tal modo que permitem deduzir que os raios são formados por partículas carregadas negativamente que se movem rapidamente (Jean Perrin, 1895): estas partículas foram designadas **electrões**.

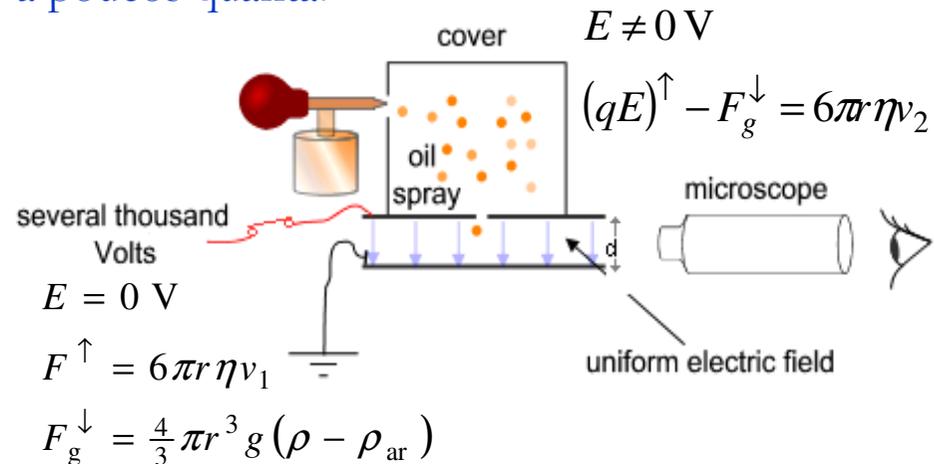
A velocidade e a carga específica (a razão entre a carga e a massa, e/m) destas partículas podem ser determinada, obtendo-se $e/m_0 \approx 1,76 \times 10^{11}$ C/kg (J. J. Thomson, 1897).

Experiência da gota de óleo de Millikan

Quantização da carga eléctrica, 1909

Esta experiência permite determinar o valor da carga eléctrica elementar e . Se conhecermos e , podemos determinar o número de Avogadro N_A . Já se sabia, desde a descoberta de Faraday da unidade electrolítica – o faraday – que $eN_A = F = 96520$ C. Millikan considerou que se a electricidade for realmente constituída por quanta elementares, a carga total de um corpo deve ser um múltiplo inteiro da carga e . Para se poder verificar facilmente isto é necessário usar corpos com carga total correspondente a poucos quanta.

A experiência idealizada por Millikan permite esta determinação: a carga de uma gotícula de óleo pode ser determinada com suficiente precisão se se fizer actuar sobre ela o campo criado entre os eléctrodos de um condensador, cujas linhas de força têm o mesmo sentido da aceleração devida à gravidade. Escolhendo devidamente o valor deste campo, pode-se balancear as forças eléctrica e gravítica que actuam nas gotículas, permitindo determinar a carga do electrão uma vez que a razão e/m já havia sido determinada.



Millikan verificou que a carga eléctrica das gotas era sempre um múltiplo inteiro de uma unidade fundamental $e = 1,601 \times 10^{-19}$ C.

Ver *On the elementary electrical charge and the Avogadro constant*, R. A. Millikan, *The Physical Review*, Vol. II (2), pp. 109-143.

Revisão: Níveis de energia do átomo

Como veremos, os resultados da experiência de Rutherford, demonstram que o átomo é constituído por um núcleo maciço carregado positivamente em torno do qual *orbitam* os electrões (partículas de carga eléctrica negativa).

Segundo Bohr, o átomo só pode existir em determinados estados *estacionários* discretos, com energias E_0, E_1, E_2, \dots

Deste modo só podem ser absorvidas as riscas do espectro para as quais hf tenha exactamente um valor tal que possa *fazer passar* o átomo de um estado estacionário para outro de energia mais elevada: as riscas de absorção possíveis são pois definidas pelas igualdades $E_1 - E_0 = hf_1, E_2 - E_0 = hf_2, \dots$, onde E_0 representa a energia **do estado fundamental** (estado do átomo na ausência de qualquer perturbação exterior).

Um átomo excitado pode apenas radiar quanta de energia cuja energia seja igual à diferença das energias de dois estados estacionários, sendo as riscas de emissão dadas pela relação $E_n - E_m = hf_{nm}$.

Natureza ondulatória da matéria: proposta de de Broglie

O *dilema* onda – corpúsculos estendeu-se à matéria quando, em 1924, de Broglie propôs a hipótese segundo a qual o dualismo onda e corpúsculo que se observa na luz poderá também ocorrer na matéria.

Assim, a uma partícula material corresponderá uma *onda de matéria*, como a um quantum de luz corresponde uma onda luminosa, sendo a conexão entre os dois aspectos «opostos» dada pela relação $E=hf$.

Como, sob o ponto de vista da teoria da relatividade, energia e momento linear são entidades da mesma espécie (o momento linear é a parte espacial de um *quadrivector relativístico*, cuja componente temporal é a energia), parece óbvia a sugestão de de Broglie de escrever, por coerência,

$$p=h\kappa=h/\lambda,$$

onde $\kappa=1/\lambda$ representa o número de ondas por unidade de comprimento (assim como $f=1/T$ corresponde ao número de vibrações por unidade de tempo). Ter presente que aqui, E e p referem-se a uma massa pontual; f e κ , pelo contrário, reportam-se a uma onda infinitamente extensa no espaço e no tempo.

Natureza ondulatória da matéria: ondas de de Broglie

De acordo com a hipótese de de Broglie, a uma partícula pontual com momento p na direcção do eixo dos xx e energia E , deve associar-se uma onda infinitamente extensa da forma

$$u(x,t) = A \cos(\omega t - kx)$$

por meio das duas relações

$$E = \hbar\omega = hf$$

e

$$p = \hbar k = h/\lambda,$$

onde $\omega = 2\pi f$, $k = 2\pi/\lambda$, e $\hbar = h/2\pi$ (\hbar designa-se h traçado).

Esta onda propaga-se no espaço velocidade de fase $V_f = \omega/k$. (a velocidade de fase de uma onda não se pode determinar experimentalmente - é uma concepção artificial). Fisicamente apenas faz sentido falar na velocidade de grupo V_g da onda, dada por $V_g = (d\omega/dk)_{\phi=\text{const}}$, que corresponde à velocidade com que se pode transmitir informação: $V_g = V$, que é sempre inferior à velocidade da luz no vácuo para partículas com massa de repouso não nula.

«Demonstrações» da natureza ondulatória da matéria

Assim, uma partícula material pode ser interpretada como um feixe de ondas resultante da sobreposição de um certo número de trens de ondas. Esta interpretação tentadora esbarra, todavia, com dificuldades *insuperáveis*, visto que um feixe de ondas desta natureza dissipar-se-ia rapidamente.

Considere-se o caso das ondas na água: o aparecimento de uma crista de onda em qualquer ponto da superfície da água provoca a formação de cristas em todos os outros pontos, em resultado do espalhamento da onda, acabando esta por desaparecer rapidamente.

Elsasser propôs, em 1925, a hipótese de que um feixe de electrões sofreria difracção por uma rede metálica, à semelhança do que ocorre na interferência de raios x em cristais;

Davisson e Germer, 1927, quando investigavam a *reflexão* de feixes de electrões por metais, observaram desvios em relação ao resultado previsto pelos princípios clássicos, pois umas direcções espalhavam mais electrões do que outras, como se tivesse lugar uma espécie de *reflexão* selectiva sob certos ângulos.

Difracção de electrões em cristais

Louis De Broglie colocou a hipótese que os electrões e outras “partículas” exibiriam também propriedades ondulatórias: a aplicação da relatividade e das ideias ondulatórias apontavam para uma possibilidade interessante, ao electrão está associado um comprimento de onda.

Tendo em conta que $E_C = p^2/2m_n$ e que $\lambda = h/p$, a energia cinética de um electrão está relacionada com o comprimento de onda de de Broglie λ por:

$$E_C = h^2/2m_0\lambda^2.$$

Em unidades correntes no laboratório, $\lambda(\text{nm}) = 1,2/\sqrt{E_C(\text{eV})}$.

Os electrões devem estar animados de uma energia cinética de cerca de 150 eV para que o comprimento de onda da sua função de onda seja comparável com as distâncias inter-atómicas vulgares nos cristais.

Por serem partículas carregadas e extremamente leves, os electrões interagem fortemente com a matéria. Em consequência, os feixes de electrões não têm um grande poder de penetração nos sólidos e, por esta razão, são usados quase exclusivamente no estudo das suas superfícies.

Experiência de Davisson-Germer

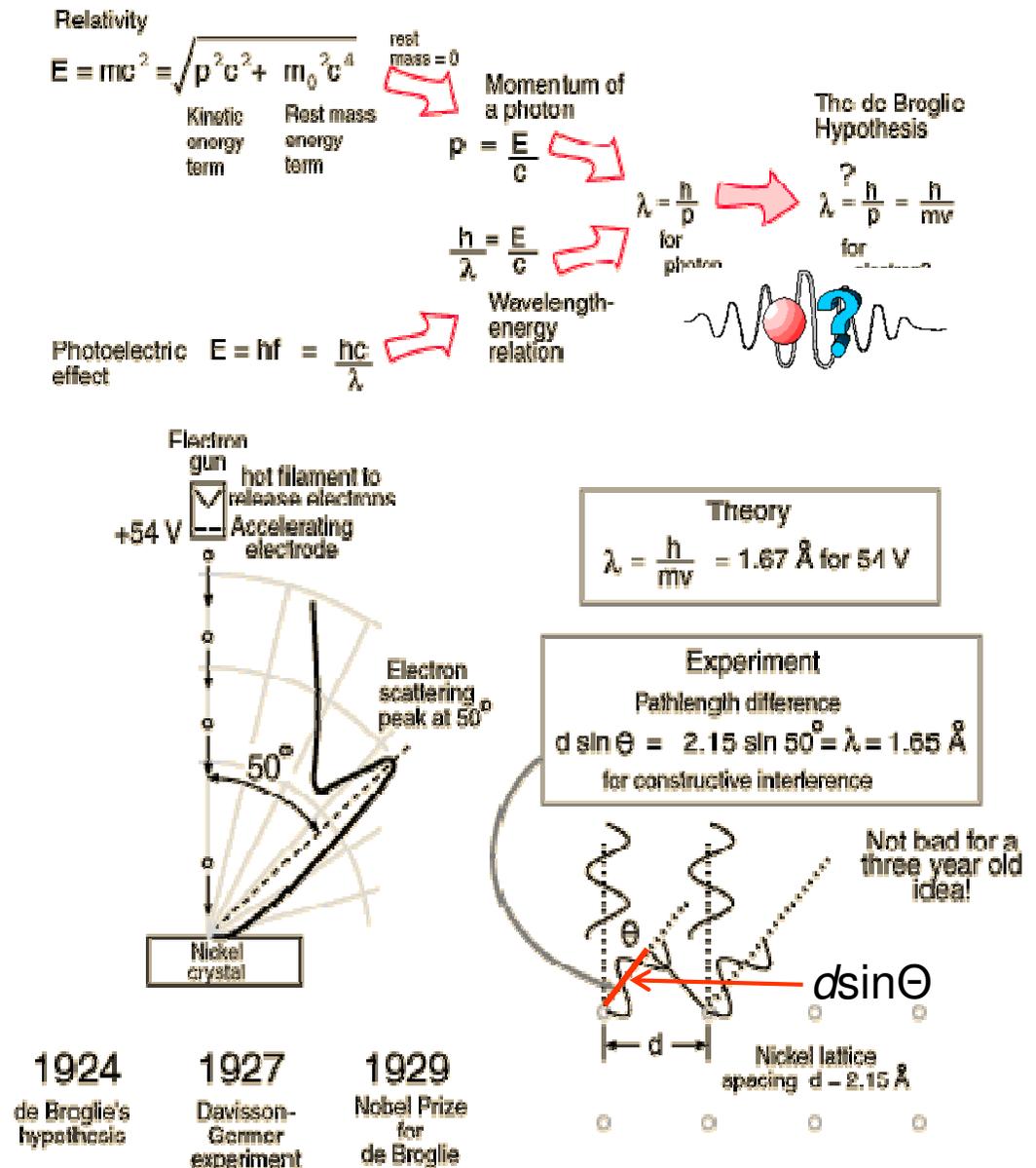
A experiência de Davisson-Germer demonstra a natureza ondulatória dos electrões, colocando a dualidade onda-partícula em «terreno seguro», representou um passo em frente no desenvolvimento da mecânica quântica.

A relação de Bragg já havia sido aplicada à difracção dos raios x, aplicando-se também na descrição da difracção de ondas associadas a partículas materiais.

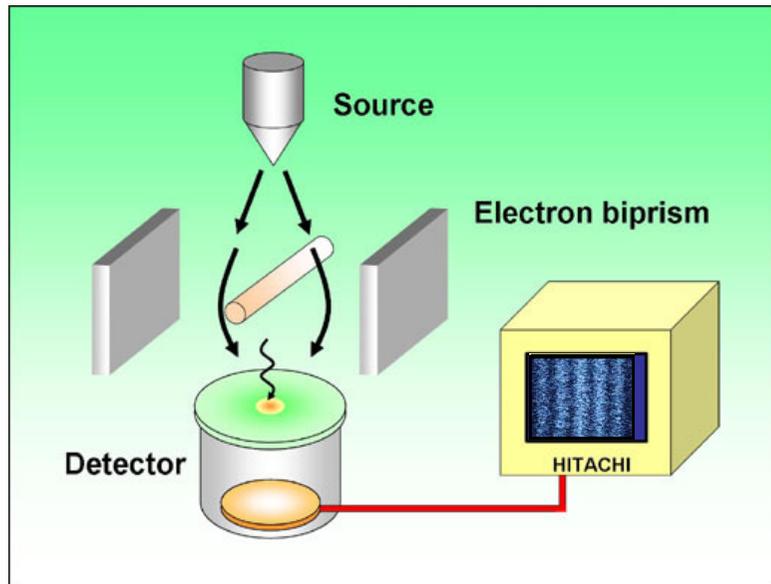
Relação de Bragg para a difracção de electrões: $d \sin \theta = m \lambda$, onde θ representa o ângulo entre o feixe espalhado e a perpendicular aos planos de atômicos.

http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1937/davisson-lecture.pdf

15-09-2009



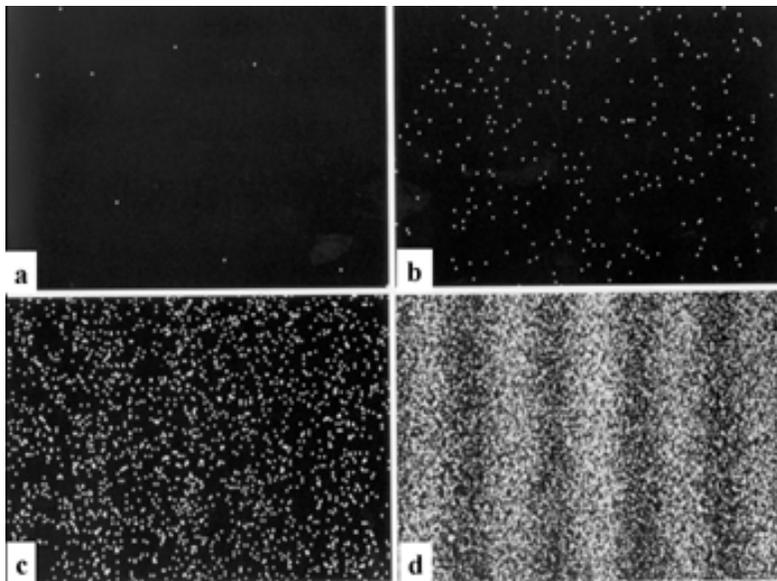
Esperimento di interferenza con elettroni (Akira Tonomura, 1973)



Filmato (richiede QuickTime) 2

<http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/doubleslit.cfm>

- Gli elettroni emessi da una sorgente sono inviati a un “bi-prisma”. Gli elettroni possono passare ai due lati del filamento centrale che li focalizza sul piano del rivelatore in basso.
- Anche quando arrivano solo 10 elettroni/sec, l'accumulazione di singoli elettroni forma una figura di interferenza.



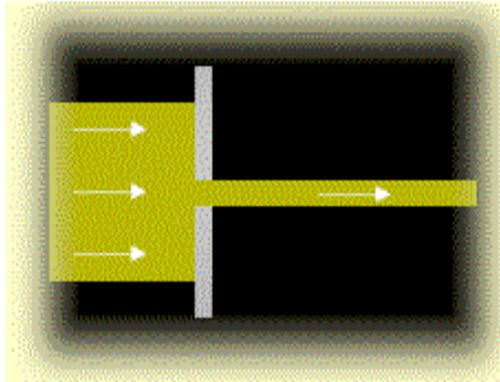
Elettroni accumulati sullo schermo:

- (a) 8 electrons,
- (b) 270 electrons,
- (c) 2000 electrons,
- (d) 6000.

Il tempo di esposizione dall'inizio alla fase (d) è di 20 minuti.

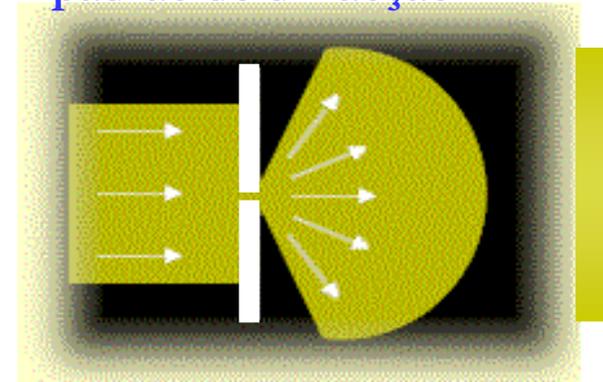
Afinal, o electrão, os átomos, ..., também se comportam como ondas

Se o orifício não for muito estreito, temos **um feixe bem definido**



Se a dimensão do orifício for da ordem do comprimento de onda característicos das ondas associadas às partículas materiais, que é muito menor que o comprimento de onda da luz visível, observa-se difracção.

Se o orifício for muito estreito observa-se o padrão de difracção



Orifício nanométrico

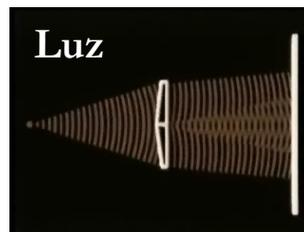
Interferência quântica de electrões isolados



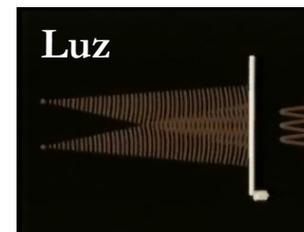
Água



Água



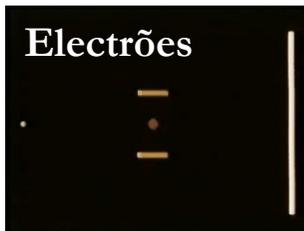
Luz



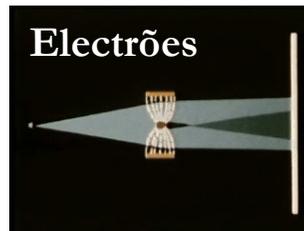
Luz



Franjas



Electrões



Electrões



Microscópio electrónico



Franjas

Ver: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/Electron%20Double%20Slite%20Experiments.wmv>

15-09-2009

Princípio da complementaridade

Qualquer processo pode ser interpretado seja em termos de corpúsculos seja em termos de ondas. Contudo, está para além das nossas possibilidades *provar* que estamos realmente lidando com corpúsculos ou com ondas, pois não podemos determinar simultaneamente todos as outras propriedades que caracterizam um corpúsculo ou uma onda, conforme o caso.

As descrições ondulatória e corpuscular devem ser apenas encaradas como maneiras complementares de conceber o mesmo e único processo objectivo, o qual só em casos limites definidos admite uma interpretação intuitiva completa.

A descrição corpuscular significa ao fim e ao cabo que realizamos medições com o objectivo de obtermos informação *exacta* acerca das relações do momento linear e da energia (como, por exemplo, no efeito de Compton), enquanto as experiências que implicam determinação de posição e tempo podem ser intuídas em termos da representação ondulatória (por exemplo, a observação do padrão de difracção de electrões).

Princípio da complementaridade

Para Bohr, os aspectos corpuscular e ondulatório são complementares: se demonstrarmos o carácter corpuscular de uma experiência, não será possível verificar ao mesmo tempo o seu carácter ondulatório, e inversamente.

Ter presente que falar de uma partícula só tem significado se pudermos especificar experimentalmente pelo menos dois pontos da sua trajectória e, do mesmo modo, para uma onda, só quando forem observados pelo menos dois máximos de interferência.

O dualismo onda-corpúsculo e a indeterminação a ele associada «coage-nos» a abandonar qualquer tentativa de instituir uma teoria determinista.

A lei da causalidade, segundo a qual o curso dos eventos num sistema isolado é completamente determinado pelo estado do sistema num instante anterior, perde a sua validade, pelo menos no sentido da Física Clássica.

Princípio da complementaridade

Para Bohr, os aspectos corpuscular e ondulatório são complementares: se demonstrarmos o carácter corpuscular de uma experiência, não será possível verificar ao mesmo tempo o seu carácter ondulatório, e inversamente.

O **princípio da complementaridade** foi enunciado por Niels Bohr em 1928 e assevera que a natureza da matéria e energia é dual e os aspectos ondulatório e corpuscular não são contraditórios, mas complementares. Daí vem o nome do princípio.

Isto significa que a natureza corpuscular e ondulatória são ambas detectáveis *separadamente* e surgem de acordo com o tipo de experiência. Assim, na experiência da dupla fenda a natureza evidenciada da luz é ondulatória, ao passo que na experiência do efeito fotoeléctrico, a natureza que ressalta é a corpuscular, como demonstrou Einstein. Argumentos similares valem também para a matéria. Assim, o princípio da complementaridade atesta a ambiguidade e natureza dual da matéria e energia. http://pt.wikipedia.org/wiki/Princ%C3%ADpio_da_complementaridade

Difracção usando feixes corpusculares

Partículas como feixes de ondas

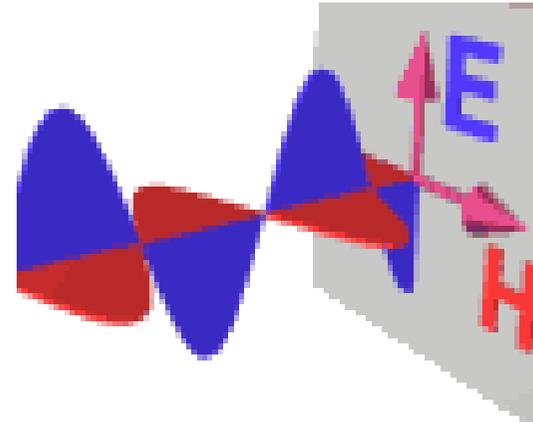
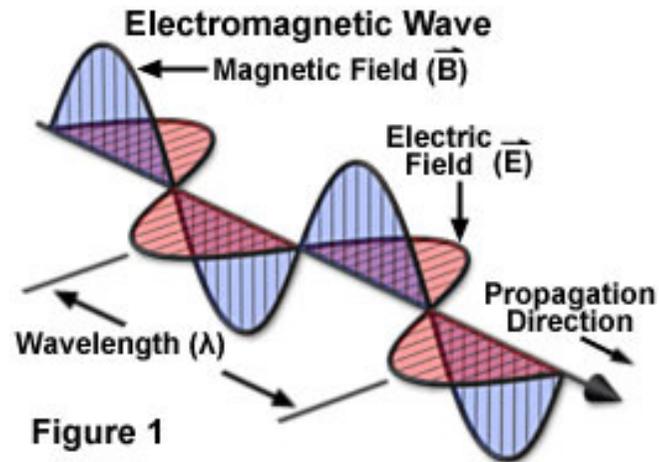
Uma das vantagens do uso de ondas electrónicas, quando comparado com o raios x, é a facilidade de construção de lentes, permitindo a construção, por exemplo, de microscópios electrónicos. A natureza ondulatória da matéria foi também demonstrada usando neutrões lentos. Stern e colaboradores observaram, em 1932, a natureza ondulatória de feixes *moleculares* de H₂ e He.

Estas experiências de difracção com partículas materiais demonstram que a estrutura ondulatória da matéria é uma propriedade geral: a Mecânica Clássica deve ser substituída, a nível nanoscópico, por uma *nova Mecânica Ondulatória*.

Os factos experimentais parecem indicar inequivocamente que não só a luz, mas também as partículas materiais se comportam, em algumas situações, como um processo ondulatório e, em outros casos, como corpúsculos. Parece, pois, haver uma contradição entre estes dois comportamentos.

Schrödinger procurou interpretar os corpúsculos materiais, em particular os electrões, como um feixe de ondas (“wave packets”).

O campo electromagnético e a função de onda



A grandeza física envolvida nos processos de difracção e de interferência é, no caso dos raios - x, o campo electromagnético, ao passo que, no caso de feixes corpusculares, é **a função de onda associada às partículas** que os constituem. No entanto, a intensidade medida pelos detectores é proporcional ao quadrado do módulo do campo electromagnético (no caso dos raios x), ou da função de onda (no caso dos feixes de electrões ou de neutrões).

Trem de ondas (do inglês, “wave train”) associado a feixe molecular ou electrónico



Electrões

Tendo em conta que $E_C = p^2/2m_n$ e que $\lambda = h/p$, a energia cinética de um electrão está relacionada com o comprimento de onda de de Broglie λ por:

$$E_C = h^2/2m_0\lambda^2.$$

Em unidades correntes no laboratório, $\lambda(\text{nm}) = 1,2/\sqrt{E_C(\text{eV})}$

Os electrões devem estar animados de uma energia cinética de cerca de 150 eV para que o comprimento de onda da sua função de onda seja comparável com as distâncias inter-atómicas vulgares nos cristais.

Por serem partículas carregadas e extremamente leves, os electrões interagem fortemente com a matéria. Em consequência, os feixes de electrões não têm um grande poder de penetração nos sólidos e, por esta razão, são usados quase exclusivamente no estudo das suas superfícies.

Neutrões

Ao contrário dos electrões, os neutrões têm um grande poder de penetração nos sólidos, por terem massa elevada e por serem electricamente neutros. Tendo em conta que $E_C = p^2/2m_n$ e que $\lambda = h/p$, a energia cinética de um neutrão está relacionada com o seu comprimento de onda de de Broglie λ por $E_C = h^2/2m_n \lambda^2$. Em unidades correntes no laboratório, $\lambda(\text{nm}) \approx 0,9/\sqrt{E_C(\text{meV})}$. A energia do feixe correspondente a um comprimento de onda de 0.1 nm é de 80 meV.

Apesar da sua neutralidade eléctrica, os neutrões apresentam momento magnético diferente de zero e, por isso, interagem electromagneticamente, principalmente, com os electrões, que são responsáveis pelas propriedades magnéticas do meio a que pertencem.

Estas interacções não são “mascaradas” pelas forças *coulombianas*, que seriam dominantes se se tratassem de feixes de partículas carregadas, como os protões. Por esta razão, os feixes de neutrões são particularmente usados para o estudo da distribuição do momento magnético no interior dos sólidos. Em materiais não magnéticos os neutrões interagem unicamente com os núcleos dos átomos constituintes.

Probabilidade e incerteza

Segundo Bohr, “todo o curso dos acontecimentos é determinado pelas leis de **probabilidade**”: a um estado no espaço corresponde uma probabilidade definida que é dada pela onda de de Broglie associada ao referido estado. Se, por exemplo, a amplitude da onda piloto associada a uma partícula material for zero num dado ponto do espaço, corresponde ao facto de que a probabilidade de encontrar essa partícula material nesse ponto é infinitamente pequena.

Para Heisenberg, os conceitos de corpúsculo e onda devem sujeitar-se a um minucioso exame crítico. Por exemplo, ao conceito de corpúsculo está necessariamente associada a ideia de que *a coisa em questão* possui um momento linear bem definido e ocupa uma posição definida no instante considerado. Contudo, podemos realmente determinar exactamente a posição e a velocidade da «coisa» num dado momento? De facto, como veremos, é incompatível com as leis da mecânica quântica, **firmemente alicerçadas na experiência**, determinar simultaneamente a posição e a velocidade de uma partícula nanoscópica.

Princípio de incerteza de Heisenberg

Na Física Clássica está implícita a ideia de que qualquer grandeza associada ao movimento de uma partícula pode ser medida e descrita de modo exacto. Por exemplo, pode-se medir simultaneamente a posição e a velocidade de uma partícula sem perturbar o seu movimento. De acordo com a teoria quântica, o acto de medir perturba a partícula, alterando o seu movimento.

Para compreender este facto, considere-se, como exemplo, a tarefa de *fotografar* um electrão do átomo de hidrogénio. Da Óptica sabe-se que, devido ao fenómeno de difracção, dois pontos separados por uma distância D podem ser resolvidos, ou seja, observados como distintos, se a observação for realizada usando radiação electromagnética de comprimento de onda λ menor ou da ordem da distância D entre os pontos. Tendo em conta que o raio de Bohr para o electrão no átomo de hidrogénio é $\sim 0,05$ nm, para *fotografá-lo* é necessário, portanto, usar radiação electromagnética com comprimento de onda $\lambda \sim 0,05$ nm. Tomando $v \sim 300$ Mm/s e $h \sim 4,14 \times 10^{-15}$ eVs e levando em conta as expressões $v = c/\lambda$ e $E = hv$, segue-se que a radiação electromagnética em questão deve ter uma energia $E \sim 2,5 \times 10^4$ eV.

Como a energia de *ligação* do electrão no átomo de hidrogénio é $\sim 13,6$ eV, *bombardear* esse electrão com radiação electromagnética de energia 10^4 eV, para *medir* a sua posição altera completamente a sua velocidade.

Princípio de incerteza de Heisenberg

Como, quanto maior for a precisão com que se pretende determinar a posição do electrão, menor deve ser o comprimento de onda da radiação a ser empregar (maior a sua energia), maior será a perturbação na velocidade do electrão e, portanto, maior será a incerteza na velocidade determinada. Este facto é consequência do **princípio de incerteza de Heisenberg**.

Considere-se que se pretende determinar a coordenada x dos electrões que se movem ao longo do eixo y (ver figura), observando se eles passam ou não através de uma fenda de largura b . A incerteza Δx na medida da coordenada x é dada pela largura da fenda: $\Delta x = b$. Se assumirmos que os electrões, ao passarem pela fenda, se comportam como uma onda produzem um padrão de máximos e mínimos associado à difracção.



O movimento dos electrões é, portanto, perturbado ao passar pela fenda, de modo que esta introduz uma incerteza Δp_x na componente x do momento linear dos electrões. Esta componente pode ser estimada pelo ângulo θ , correspondente ao primeiro mínimo do padrão de difracção, pois mais de 90% das trajetória mais prováveis estão contidas no ângulo 2θ .

Princípio de incerteza de Heisenberg

Usando a relação $\sin\theta = \lambda/b$, da teoria ondulatória, e a relação de de Broglie $p = h/\lambda$, resulta:

$$\Delta p_x \sim p_x \sim p \sin\theta = (h/\lambda)(\lambda/b) \sim h/\Delta x \text{ ou } \Delta p_x \Delta x \sim h \text{ (mostra-se que } \Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2).$$

Da expressão verifica-se que o produto das incertezas Δx e Δp_x é da ordem de grandeza da constante de Planck. Como consequência, diminuindo-se uma das *incertezas*, a outra aumenta na mesma proporção: o estreitamento da fenda (diminuição de b) para reduzir a incerteza na medida da coordenada x , acarreta um alargamento da região central do padrão de difracção, ou seja, um aumento na incerteza da componente p_x .

Classicamente, a perturbação introduzida num sistema qualquer para medir a posição e o momento de cada partícula que o constitui pode ser tão pequena quanto se queira, podendo-se determinar exactamente o movimento subsequente das partículas.

Na teoria Quântica, uma tal descrição exacta de sistemas nanoscópicos que envolvam nano-distâncias e *pequenos* momentos lineares não é possível, já que, pelo princípio de incerteza, não se pode determinar simultaneamente, e com precisão arbitrária, a posição e o momento de cada partícula que constitui tais sistemas.

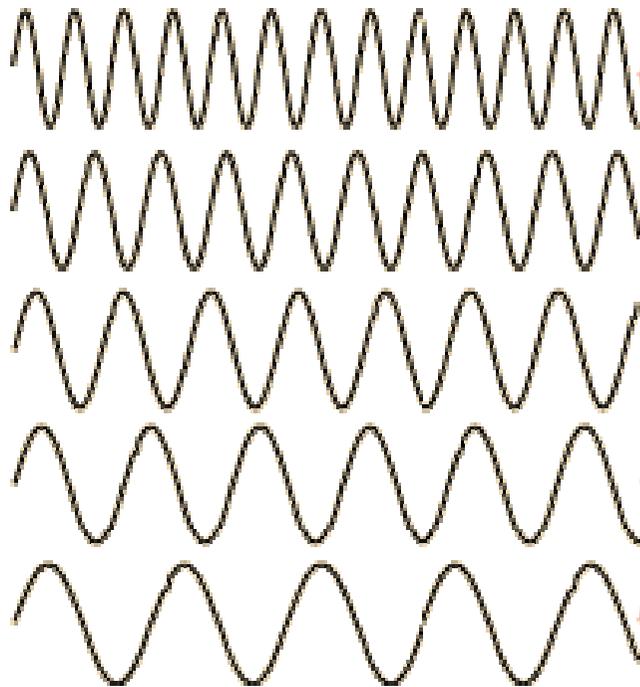
Relações de incerteza de Heisenberg

Precisely determined momentum

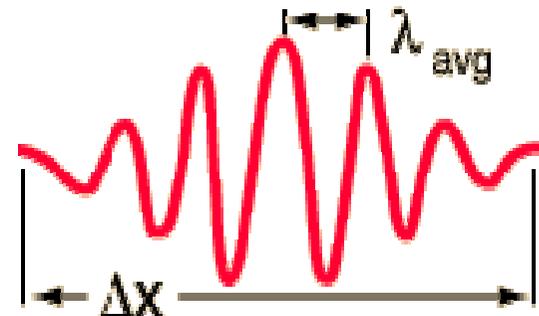


A sine wave of wavelength λ implies that the momentum p is precisely known: $p = \frac{h}{\lambda}$
 But the wavefunction and the probability of finding the particle $\psi^*\psi$ is spread over all of space.

$p = \frac{h}{\lambda}$
 p precise
 x unknown



Adding several waves of different wavelength together will produce an interference pattern which begins to localize the wave.



but that process spreads the momentum values and makes it more uncertain. This is an inherent and inescapable increase in the uncertainty Δp when Δx is decreases.

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



Relações de incerteza de Heisenberg para a energia

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

$\Delta E \Delta t > \frac{\hbar}{2}$

A continuous distribution of wavelengths can produce a localized "wave packet".

Each different wavelength represents a different value of momentum according to the DeBroglie relationship.

Superposition of different wave lengths is necessary to localize the position. A wider spread of wavelengths contributes to a smaller Δx .

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

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

Imagine-se, a título de exemplo, que se pretende medir a energia E de um estado possível de um átomo. Se o intervalo de tempo disponível para medir a energia é Δt , então a incerteza na medida da energia do estado E satisfaz a seguinte relação: $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$.

Considere-se agora um átomo num estado excitado. Se identificarmos Δt com o tempo de vida médio τ do átomo nesse estado, verifica-se que a energia do estado está, grosso modo, compreendida entre os seguintes valores: $E - \Delta E/2$ e $E + \Delta E/2$. [Um estado de energia perfeitamente definido ($\Delta E = 0$) tem um tempo médio de vida τ infinito (estado ligado), como é, por exemplo, o estado fundamental de um átomo.] **Ter presente o princípio da incerteza não resulta de uma incerteza devida aos instrumentos ou à qualidade dos métodos experimentais usados. Mas resulta das propriedades inerentes à descrição quântica da natureza. Mesmo com instrumentos *perfeitos* a incerteza é intrínseca à natureza das coisas.**

Verificação experimental do princípio de incerteza

A complementaridade é um dos paradigmas essenciais da mecânica quântica. A ideia consiste no seguinte: duas grandezas são mutuamente complementares quando o conhecimento completo (ou parcial) de uma implica o desconhecimento completo (ou parcial) da outra, e vice-versa. O caso mais conhecido é a complementaridade entre o momento e a posição, expressa pela relação de incerteza de Heisenberg: $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar/2$.

O princípio de incerteza de Heisenberg para objectos materiais é uma pedra angular da mecânica quântica e «demonstra» a natureza ondulatória da matéria.

O que se segue é uma adaptação do artigo “*Experimental verification of the Heisenberg uncertainty principle for hot fullerene molecules,*” Olaf Nairz, Markus Arndt, Anton Zeilinger (ver http://arxiv.org/PS_cache/quant-ph/pdf/0105/0105061.pdf ou <http://prola.aps.org/abstract/PRA/v65/i3/e032109>).

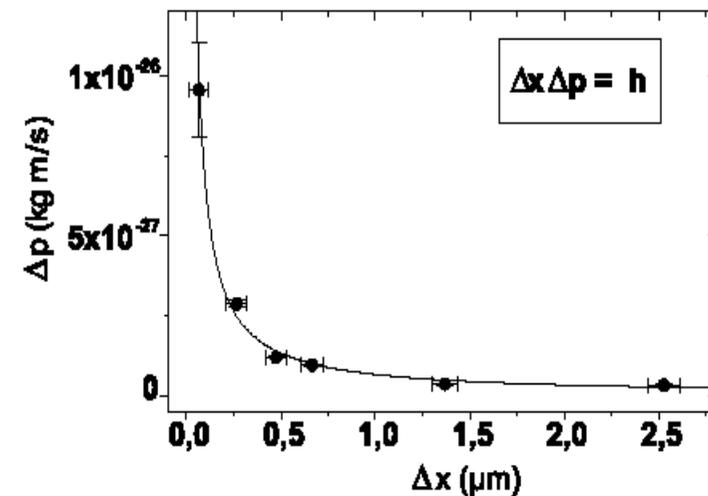
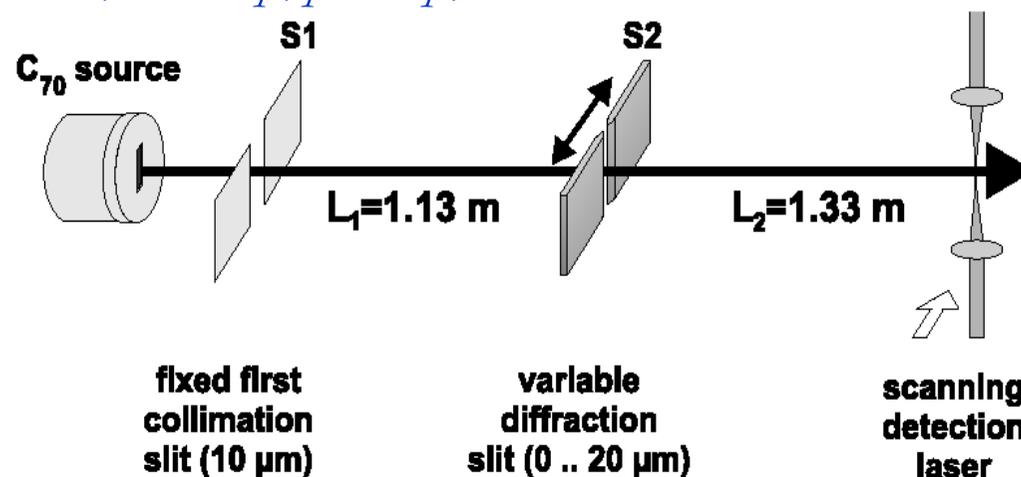
Neste artigo reporta-se a verificação experimental do princípio de incerteza de Heisenberg para a molécula de fulereno C₇₀, usando a montagem experimental indicada abaixo. Chama-se a atenção que a massa desta molécula é da ordem de 840 u.

Verificação experimental do princípio de incerteza

Um feixe térmico efusivo de C_{70} é produzido por sublimação de pó de fulereno a 900 K. O feixe é «estreitado» usando a fenda S1 (10 μm) e difractado pela fenda S2. A largura da fenda S2 pode ser variada, com exactidão entre ± 30 nm para larguras inferiores a 1 μm (usando um sistema da Piezosysteme Jena).

Considere-se um feixe de moléculas passando pela fenda S2. Pode-se considerar a largura da fenda como uma medida da incerteza posicional Δx . A incerteza no momento Δp pode ser relacionada com a expansão do feixe devido à difracção na fenda. Quantitativamente pode-se definir Δp_x como o momento necessário para atingir o primeiro mínimo de interferência. Para pequenos ângulos tem-se:

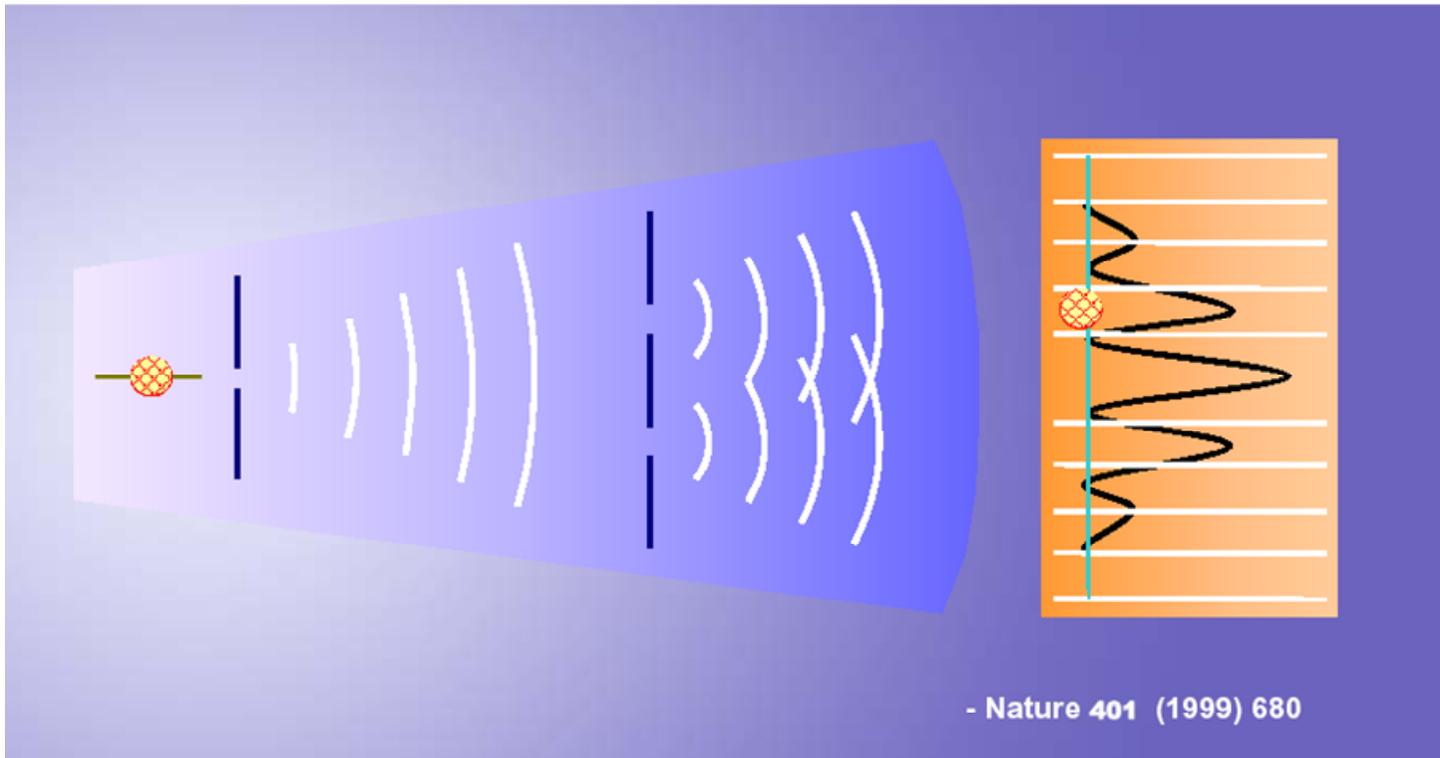
$$\theta \approx \lambda / \Delta x = \Delta p / p = \lambda \Delta p / h.$$



Dualidade onda partícula observada com a molécula de futebuleno (C_{60})

Wave-particle Duality of C_{60} Molecules

Markus Arndt, Olaf Nairz, Julian Vos-Andreae,
Claudia Keller, Gerbrand van der Zouw & Anton Zeilinger



Dualidade onda-partícula: aspectos a reter

Qualquer processo pode ser interpretado seja em termos de corpúsculos (partículas) seja em termos de ondas.

Contudo, está para além das nossas possibilidades *provar* que estamos realmente lidando com corpúsculos ou com ondas, pois não podemos determinar simultaneamente todas as outras propriedades que caracterizam um corpúsculo ou uma onda, conforme o caso.

Segundo Niels (Bohr), os aspectos corpuscular e ondulatório são complementares: se demonstrarmos o carácter corpuscular de uma experiência, não será possível verificar, ao mesmo tempo o seu carácter ondulatório, e vice-versa. Ambos são necessários para descrever *complementarmente* a natureza.

Conclusão: tanto a matéria como a radiação (energia) podem apresentar os dois comportamentos, embora nunca os possamos “ver” ao mesmo tempo.

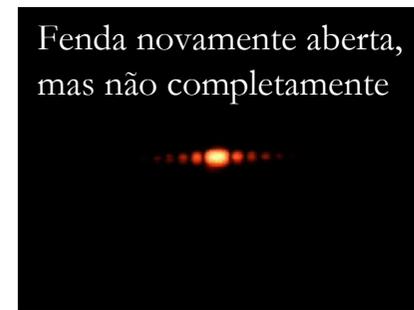
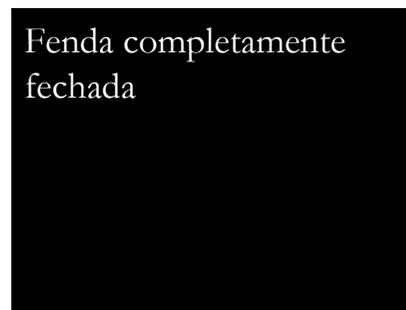
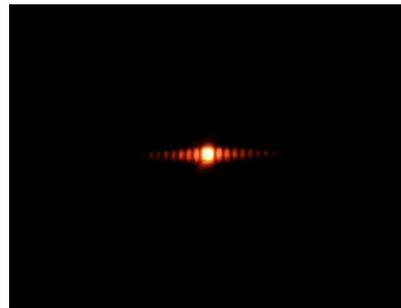
Ver dualidade onda-partícula: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/ParticleWave.swf>

Demonstrações

Montagem; arco-íris, guiagem da luz, efeito fotoelétrico, difracção, ...



Difracção da luz através de uma fenda



Ver: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/Difracção%20da%20Luz%20-%201%20fenda.wmv>

15-09-2009

Mecânica Quântica

Mecânica Quântica

Funções de onda

Estados estacionários

Equação de Schrödinger

Partícula livre

Partícula numa caixa

Partícula ligada numa caixa

Níveis de energia

Probabilidade e normalização

Dependência temporal

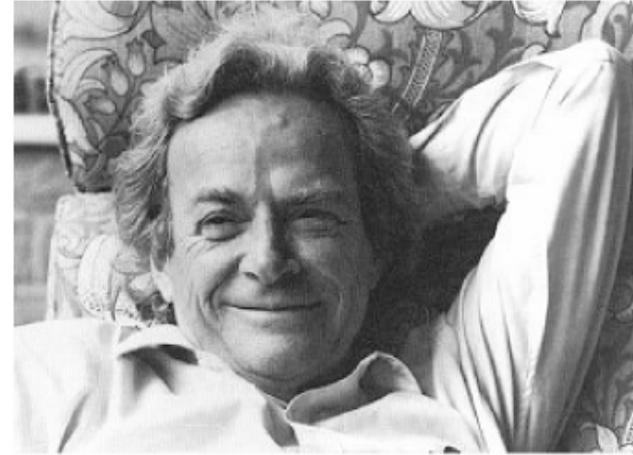
Poços de potencial finitos

Pontos quânticos

Barreiras de potencial e efeito de túnel

Oscilador harmónico quântico

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.



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

"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."



Significado das ondas de de Broglie

Após a proposta de de Broglie, Schrödinger procurou interpretar os corpúsculos materiais, em particular os electrões, como um feixe de ondas (“wave packets”) materiais. Contudo, estes feixes de onda deviam dissipar-se rapidamente com o decorrer do tempo. Acresce ainda que, segundo Bohr, “todo o curso dos acontecimentos é determinado pelas leis de probabilidade”: a um estado (ou partícula) no espaço corresponde uma probabilidade definida que é dada pela onda de de Broglie associada ao referido estado. Mas qual é a relação entre a onda associada a um sistema (partícula) e as grandezas físicas que o caracterizam como, por exemplo, a energia, a posição e o momento linear? Como podem ser reconciliadas as descrições corpuscular e ondulatória?

Max Born desmaterializou as ondas de de Broglie e de Schrödinger. Para ele, qualquer fenómeno mecânico não relativista é «acompanhado» por um *processo ondulatório* descrito, como veremos, pela equação de Schrödinger, e cujo significado é o de *fornecer* a densidade de probabilidade de um dado comportamento do *fenómeno* ocorrer. Se, por exemplo, a amplitude da *onda* representativa de uma partícula material for zero, num dado ponto do espaço e instante de tempo, a probabilidade de encontrar essa partícula material numa *região infinitesimal* em torno desse ponto, nesse instante, é infinitamente pequena.

Função de onda: a interpretação de Copenhague,

A **Interpretação de Copenhague**, 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. (Há interpretações menos *populares*, ex., a de Bohm.)

De facto, o procedimento aceite consiste em descrever o estado instantâneo de um sistema (ou partícula) através de uma função complexa contínua $\Psi(\mathbf{r}, t)$, a função de onda, que satisfaz a uma equação diferencial - a equação de Schrödinger - e, portanto, varia no tempo de maneira completamente determinada pela sua forma no instante anterior, de modo que o seu comportamento é rigorosamente causal. Isto é, cada estado de um sistema é representado por uma função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, que contém toda a informação «observável» ou «medível» acerca do sistema. Todavia, a função de onda não tem «significado» físico.

Função de onda: densidade de probabilidade

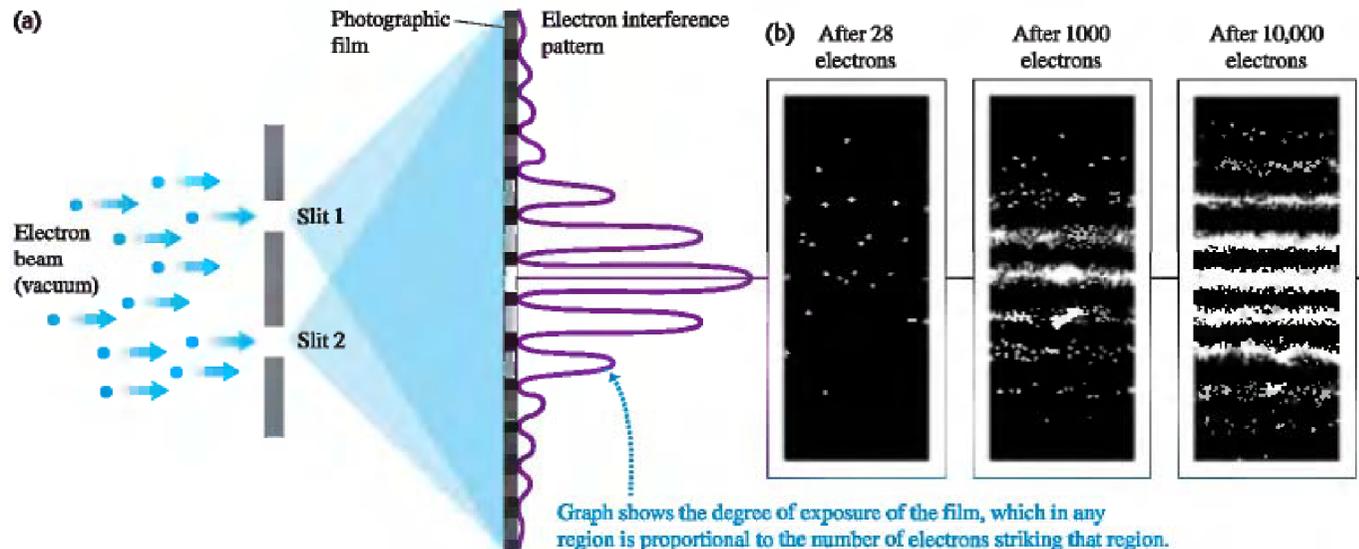
O significado físico está associado ao quadrado do módulo da função de onda $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t)$, onde $\Psi(\mathbf{r},t)^*$ é o complexo conjugado de $\Psi(\mathbf{r},t)$: $\Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t)$, representa a densidade de probabilidade 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 estado possíveis é igual a 1, isto é, $\int \Psi(\mathbf{r},t)^* \Psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 1$. A função de onda que satisfaz a relação anterior diz-se normalizada. Se a função não for normalizada, isto é, 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} . Para os estados estacionários, estado em que energia não depende do tempo, a probabilidade também não é função do tempo.

De forma a poder representar um sistema físico observável, a função $\Psi(\mathbf{r},t)$ deve ser: i) uma função contínua, com primeiras derivadas contínuas; ii) deve ser uma solução da equação de Schrödinger (ver adiante); iii) ser normalizável, o que implica que o *valor* da função deve tender para zero à medida que a posição \mathbf{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.

Interferência de electrões

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



If the Electron Is a Wave, What is Waving?

DeBroglie Wavelength
 $\lambda = \frac{h}{p}$

Ψ
 Precise momentum p makes the position totally uncertain.
 $\Psi^* \Psi$
 Is the probability of finding the particle at a location at a particular time.

Shrodinger 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
 Smaller box implies larger energy

$\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$
 To confine in a smaller volume requires more available energy and a stronger force.

$H\Psi = E\Psi$

$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ *particle* $\leftarrow E \rightarrow$ *wave* $h\nu = \hbar\omega$

$\Psi = \text{wavefunction for electron}$

Using the deBroglie relationship
 $\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = k$ $p = \text{electron momentum}$

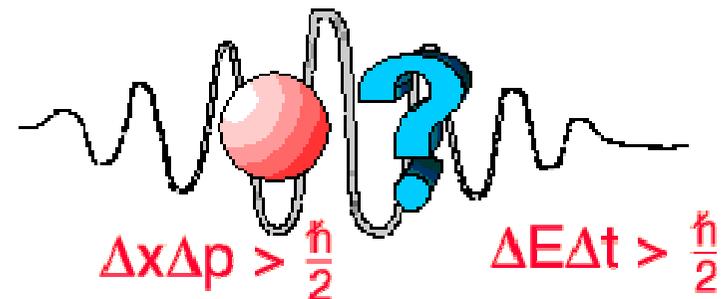
Using the Planck relationship
 $\omega = \frac{\hbar\omega}{\hbar} = \frac{E}{\hbar}$ $E = \text{electron energy}$

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

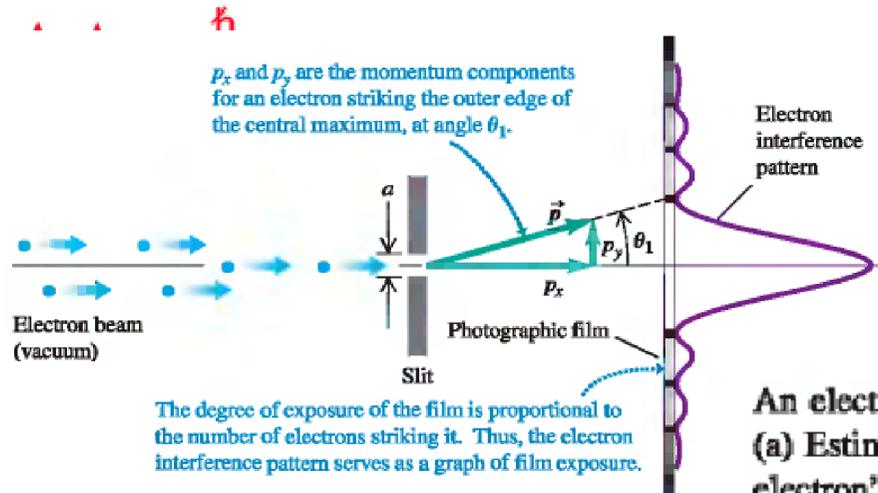
Princípio da incerteza

- Na Física Clássica está implícita a ideia que qualquer grandeza associada ao movimento de uma partícula pode ser medida e descrita de modo exacto. Pode-se medir simultaneamente a posição e a velocidade de uma partícula com infinita precisão, e, portanto, saber o seu passado e o seu futuro.
- De acordo com o **princípio de incerteza** da Física Quântica, proposto por Werner (Heisenberg), não podemos **conhecer** com exacta precisão e simultaneamente a velocidade e a posição de uma partícula.
- **Importante:** A restrição “imposta” pelo princípio da incerteza não resulta de uma *imperfeição* devida aos instrumentos ou à qualidade dos métodos experimentais usados. É uma das propriedades inerentes à descrição quântica da natureza. Mesmo com instrumentos *perfeitos* a *incerteza* é intrínseca à natureza das coisas.

Se conhecermos a velocidade com infinita precisão não podemos saber a posição; se soubermos a posição com infinita precisão não conheceremos a velocidade.

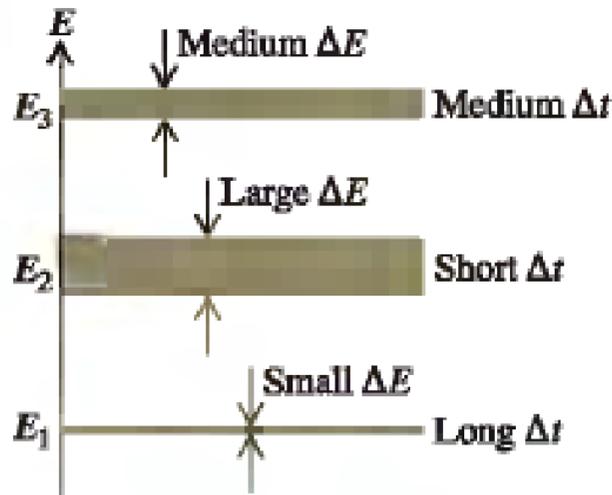


Relações de incerteza de Heisenberg



$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{e} \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

An electron is confined within a region of width 1.0×10^{-10} m. (a) Estimate the minimum uncertainty in the x-component of the electron's momentum. (b) If the electron has momentum with magnitude equal to the uncertainty found in part (a), what is its kinetic energy? Express the result in joules and in electron volts.



Um sistema com um estado excitado metaestável permanece muito mais tempo nesse que nos outros estados excitados (ver funcionamento dos lasers) e, portanto, a dispersão de energia desse estado é muito menor que nos outros estados.

A sodium atom is in one of the states labeled "Lowest excited levels" in Fig. 38.10 (Section 38.3). It remains in that state for an average time of 1.6×10^{-8} s before it makes a transition back to a ground state, emitting a photon with wavelength 589.0 nm and energy 2.105 eV. What is the uncertainty in energy of that excited state? What is the wavelength spread of the corresponding spectrum line?

Equação de Schrödinger

O estado instantâneo de um sistema é completamente descrito por uma grandeza complexa (**função de onda**), que satisfaz a uma equação diferencial – a equação de Schrödinger - e, portanto, varia com o tempo de maneira completamente determinada pela sua forma no instante anterior, de modo que o seu comportamento é rigorosamente causal. Todavia, o significado físico não está contido na **função de onda**. De acordo com Max Born, o significado físico – a *informação* - está contido no quadrado do módulo da função de onda (**quadrado da amplitude**). A probabilidade de encontrar o sistema num dos estados possíveis do é proporcional ao quadrado da função de onda. Resulta, portanto, que apenas podemos conhecer os valores das grandezas físicas em termos os valores probabilísticos e nunca de maneira completa.

Funções de onda e níveis de energia numa caixa

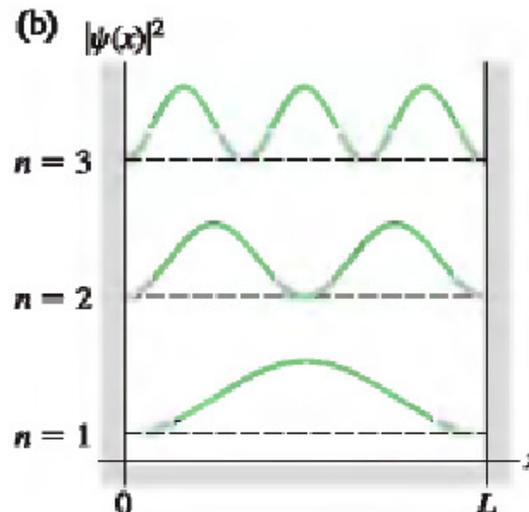
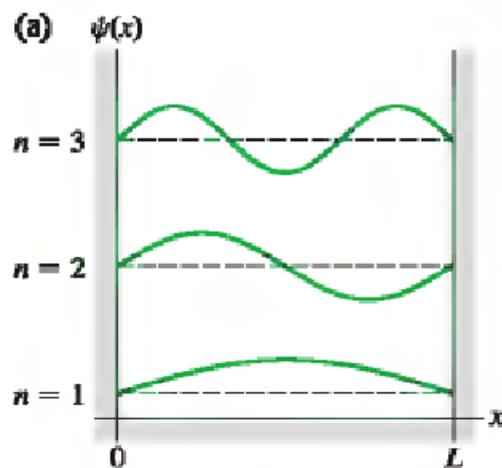
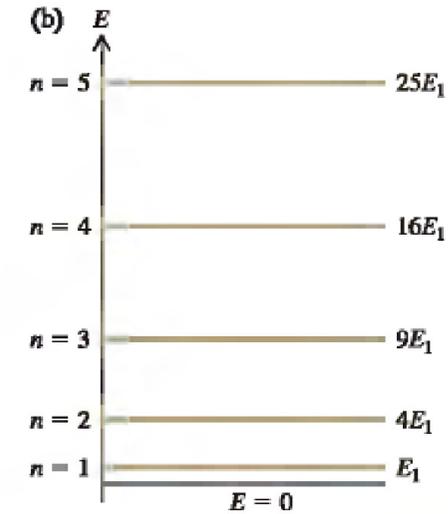
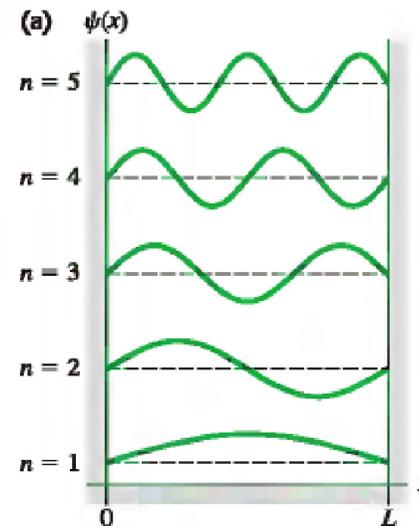
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Schrodinger equation for free particle
in one dimension.

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

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

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

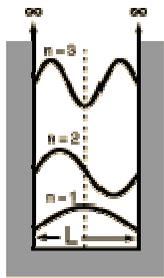


Shrodinger Equation for Particle in Box

Lowest state:
 $\lambda = 2L$
 $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L}$
 $E_{\min} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}$
 for 1D
 Smaller box implies larger energy
 $E_{\min} = \frac{3h^2}{8mL^2}$
 3D Box

Níveis de energia 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

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

Show

3D Box



First ionization energy 11.3 eV

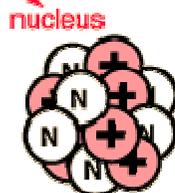
1 nm = 10^{-9} m
 1 fm = 10^{-15} m
 1 MeV = 10^6 eV
 1 GeV = 10^9 eV
 Units

Using the uncertainty principle expression for minimum confinement energy:

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

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

atom



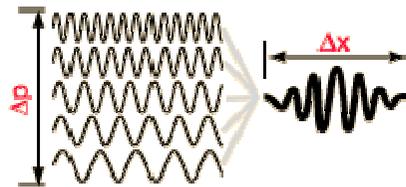
5.8 fm

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

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

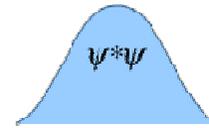
Uncertainty Principle

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



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

Show



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

Ψ = wavefunction



0.4 nm

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

Assume atomic size = 0.4 nm

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

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.

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

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

Energy to:

Confine electron in atom: 9.4 eV

Confine proton in nucleus: 2.05 MeV

Confine electron in nucleus: 3.77 GeV

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!

Confinement in atom

Assume atomic size = $0.4 \text{ nm} = \Delta x$

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

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

For electron:

$$E = \frac{(1.66 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} / \text{s})^2}{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ J} / \text{eV})}$$

$$E = 9.4 \text{ eV}$$

Confinement in nucleus

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

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

For electron:

$$E = \frac{(3.31 \times 10^{-20} \text{ kg} \cdot \text{m} / \text{s})^2}{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ J} / \text{eV})}$$

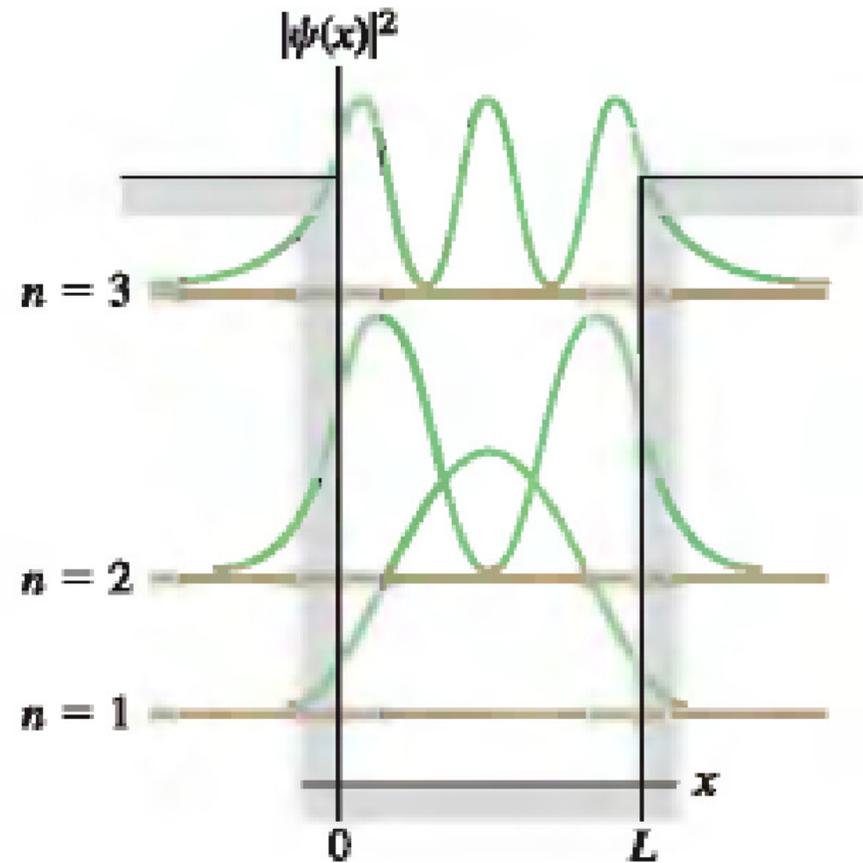
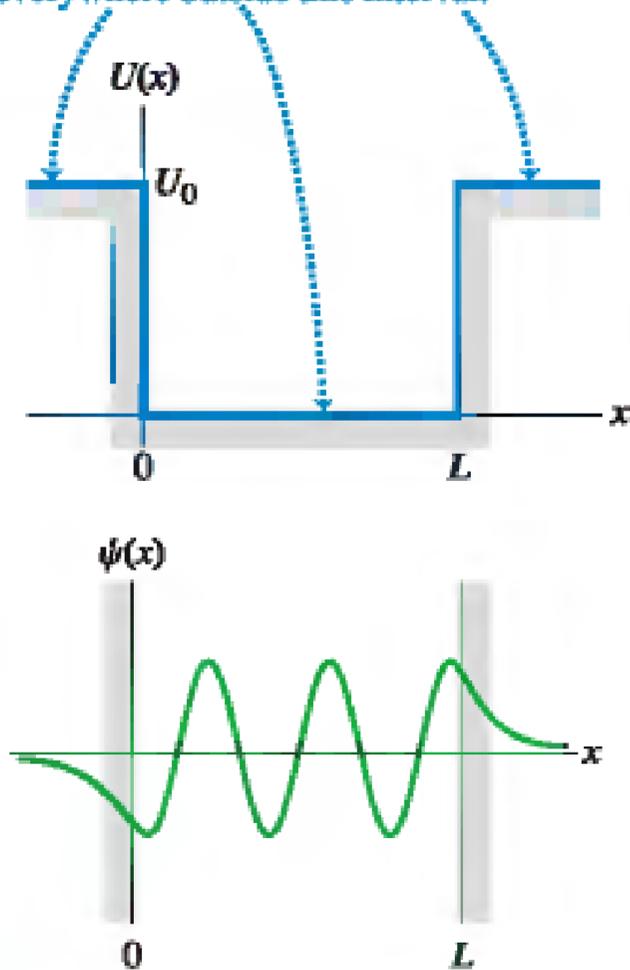
$$E = 3.77 \times 10^9 \text{ eV} = 3.77 \text{ GeV}$$

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

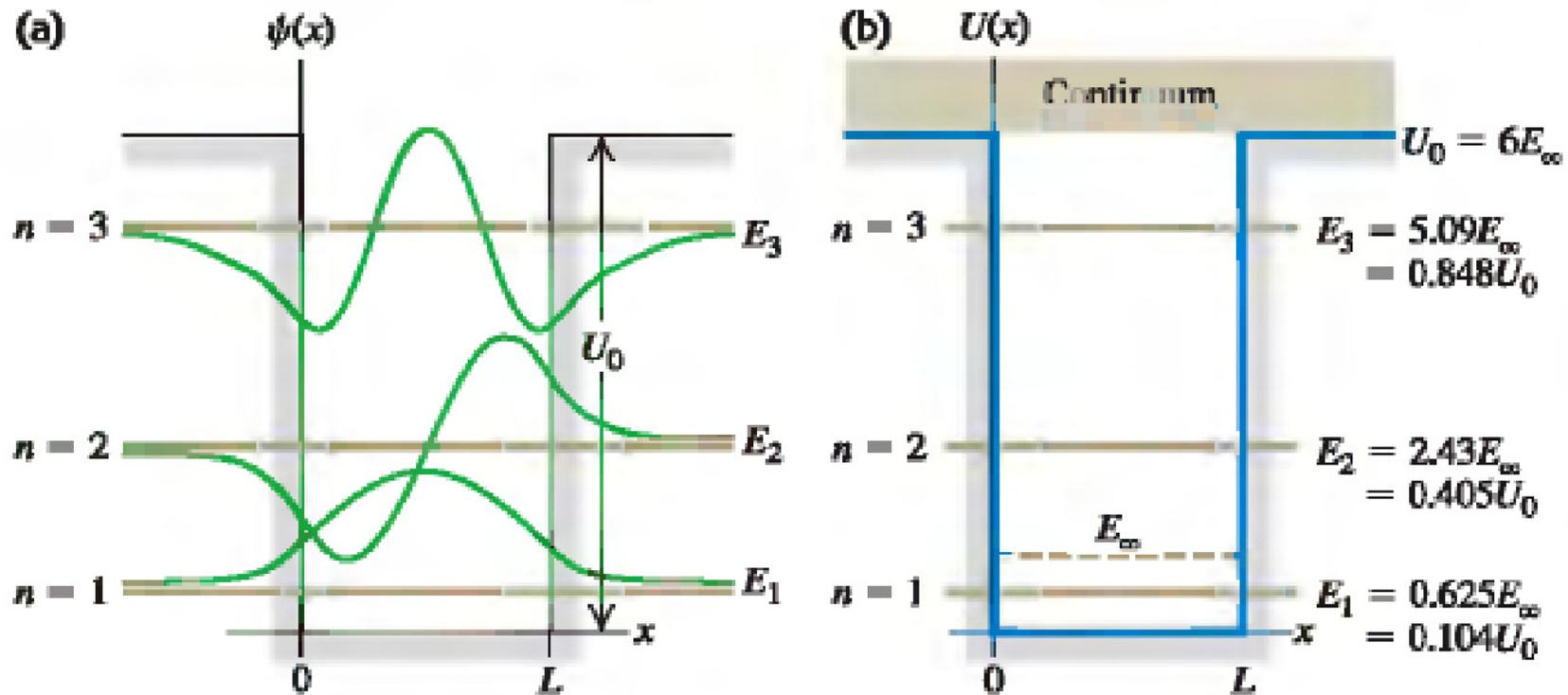
$$E = 2.05 \times 10^6 \text{ eV} = 2.05 \text{ MeV}$$

Funções de onda num poço finito

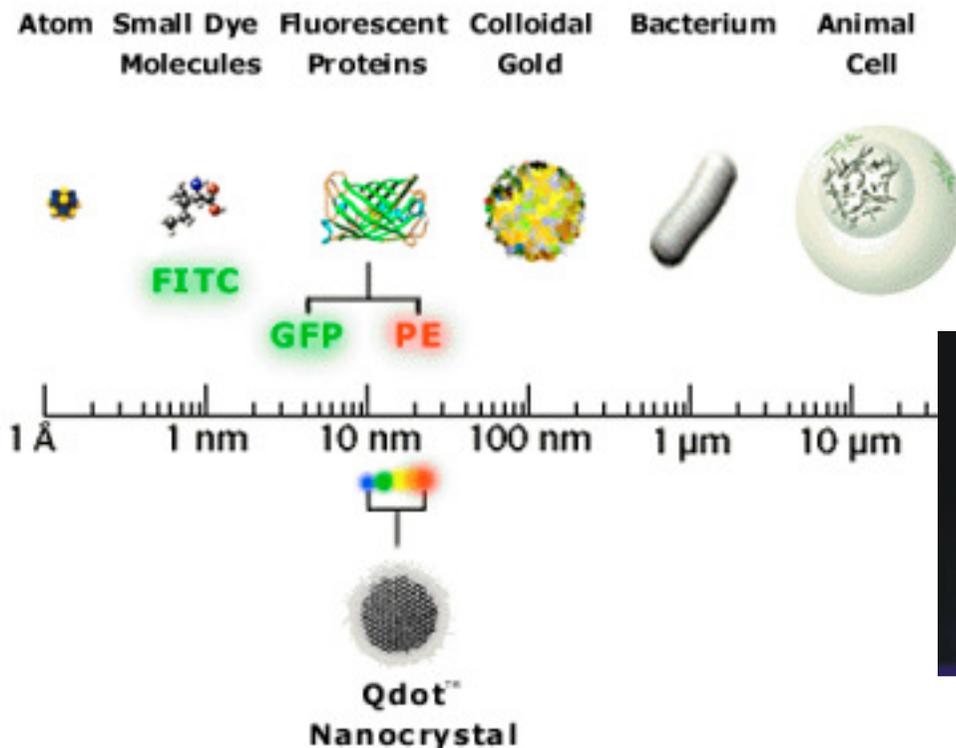
The potential energy U is zero in the interval $0 \leq x \leq L$ and has the constant value U_0 everywhere outside this interval.



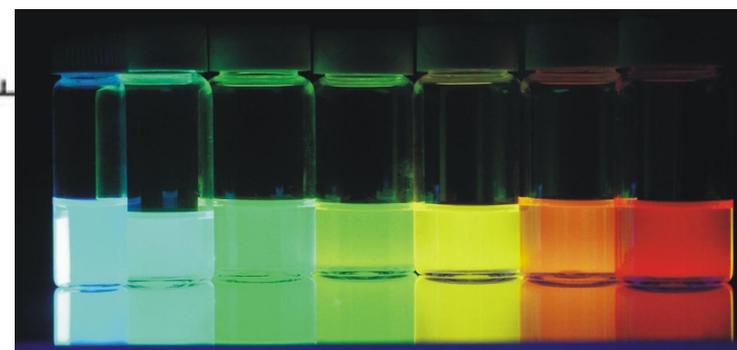
Funções de onda e níveis de energia num poço finito



Caixa a 3 dimensões (3D): pontos quânticos



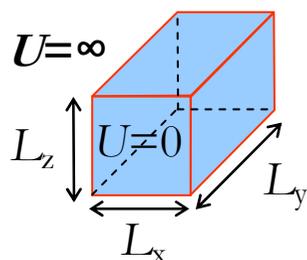
LEDs com Quantum dot (QD)



2.3 → 5.5
Size (nanometers)

© Copyright 2004, Benoit Dubertret

Ponto quântico: *confinamento infinito*
($U(x)=0$ no interior e infinito no exterior)

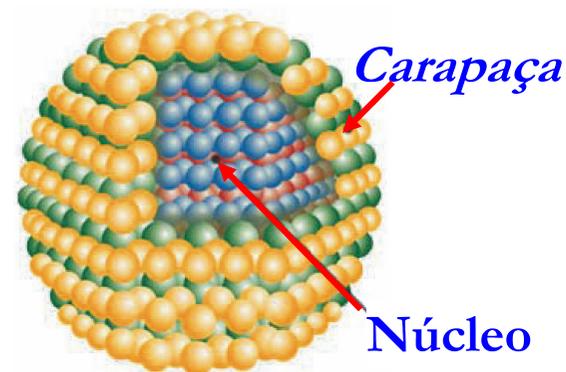


$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

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

15-09-2009

Cadmium sulfide (CdS) “QD”



179

Pontos quânticos e nanopartículas

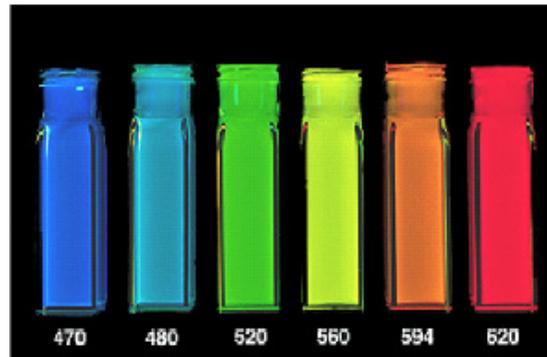
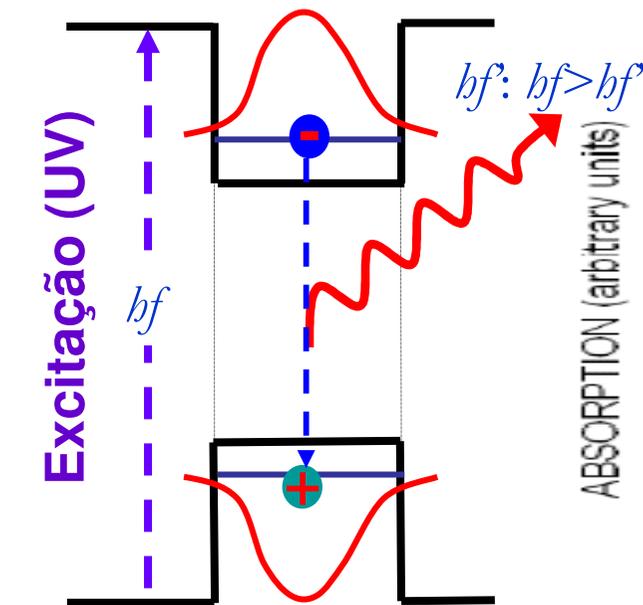
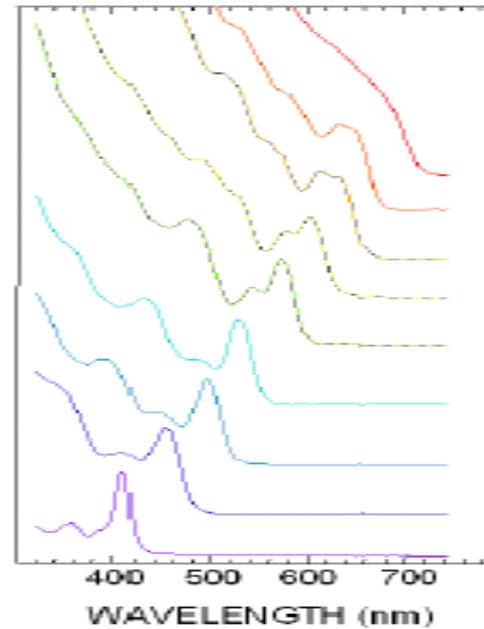


Foto: F. Fraenkel, MIT Grupo de M. Bawendi, MIT



A cor de emissão depende do tamanho do QD

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

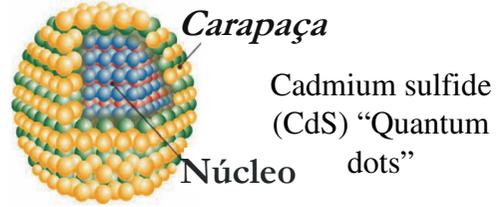
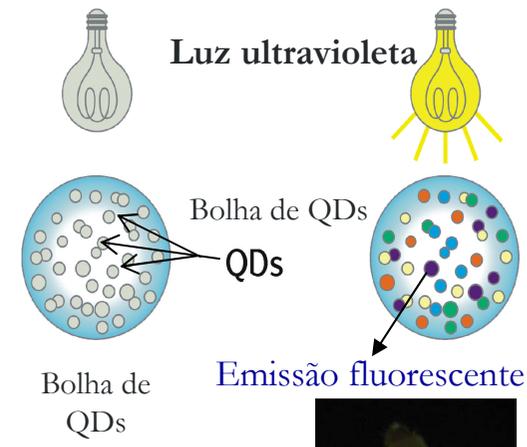
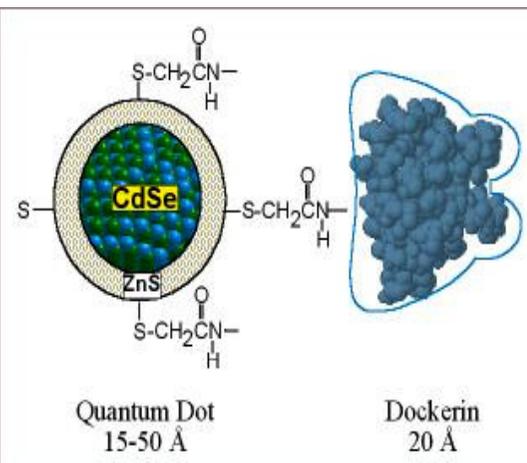
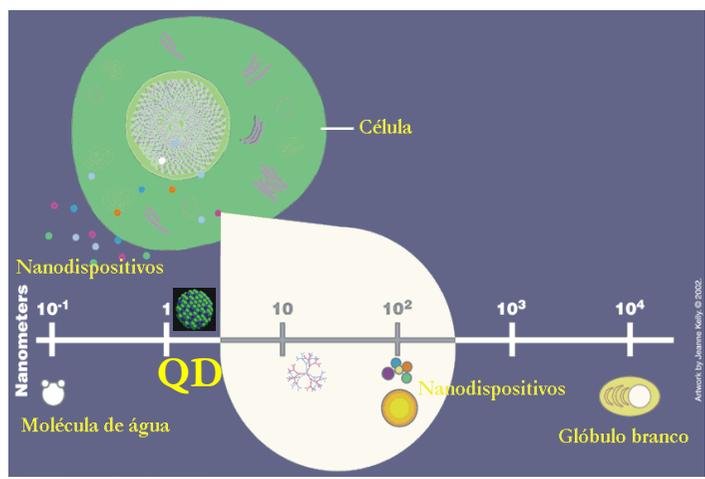
Bulk gold film



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

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

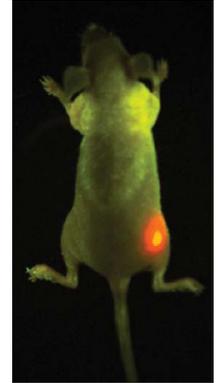
Aplicações de pontos quânticos (“quantum dots”, QD)



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

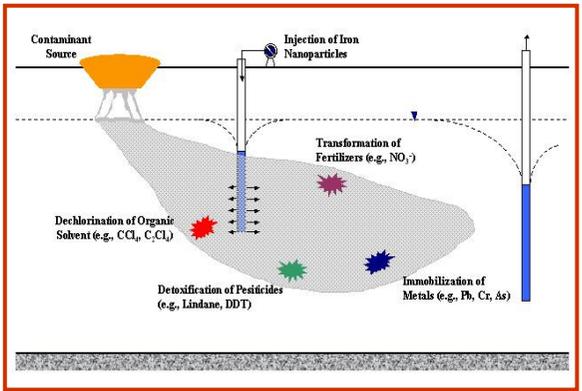
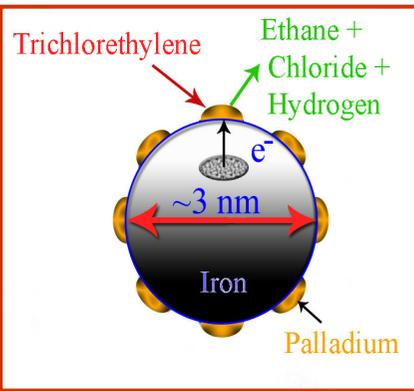


Ver aplicações em medicina em:



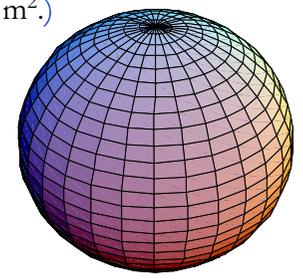
Bull's-eye. Red quantum dots injected into a live mouse mark the location of a tumor.

Nanopartícula de ferro como *despoluente de água* <http://www.cancer.gov/cancertopics/understandingcancer/nanodevices>



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.)



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

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

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

The Scale of Things – Nanometers and More

Things Natural

Ant
 ~ 5 mm

Dust mite
 200 μm

Human hair
 ~ 60-120 μm wide

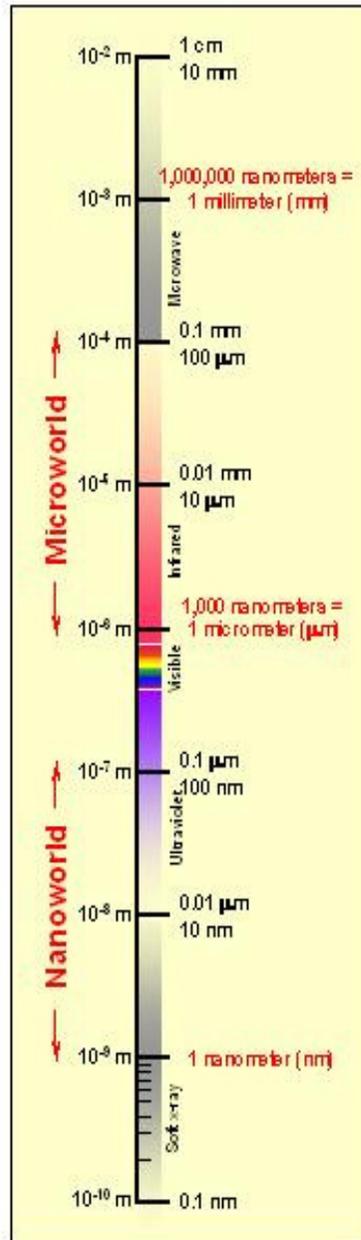
Fly ash
 ~ 10-20 μm

Red blood cells with white cell
 ~ 2-5 μm

ATP synthase
 ~ 10 nm diameter

DNA
 ~ 2-12 nm diameter

Atoms of silicon
 spacing ~ tenths of nm



Things Manmade

Head of a pin
 1-2 mm

Micro Electro Mechanical (MEMS) devices
 10 - 100 μm wide

Pollen grain
Red blood cells

Zone plate x-ray "bars"
 Outer ring spacing ~35 nm

Self-assembled, Nature-inspired structure
 Many 10s of nm

Nanotube electrode

Quantum corral of 48 iron atoms on copper surface
 positioned one at a time with an STM tip
 Conical diameter 14nm

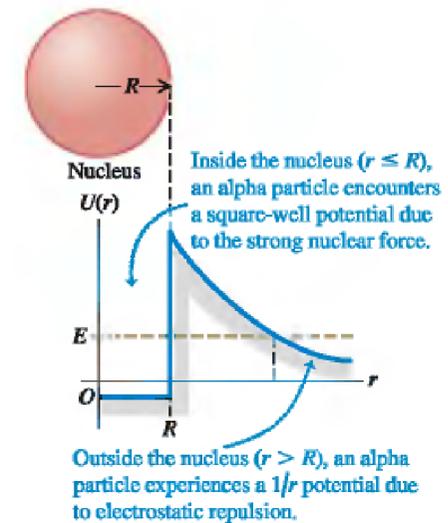
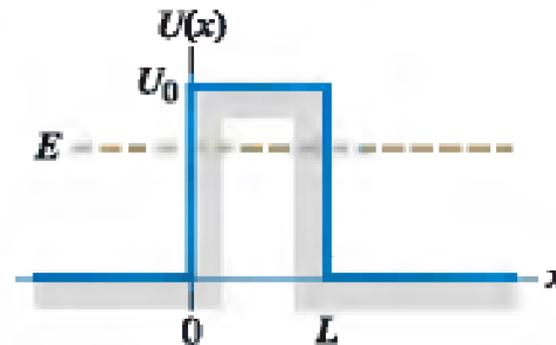
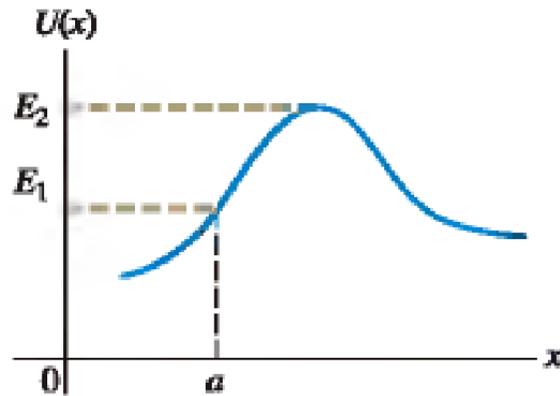
Carbon nanotube
 ~1.3 nm diameter

Carbon buckyball
 ~1 nm diameter

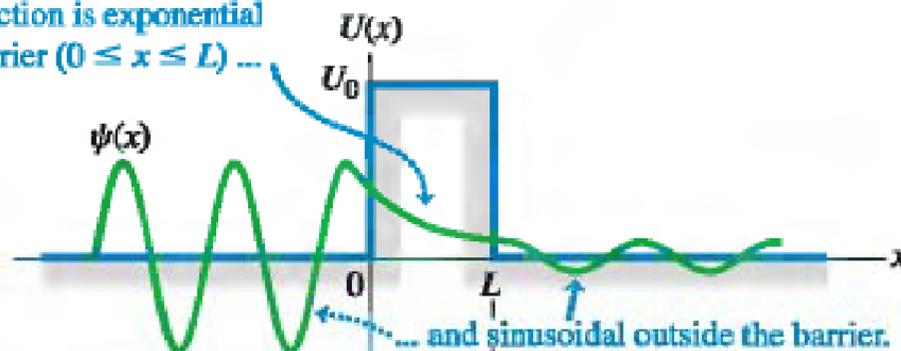
The Challenge

Fabricate and combine nanoscale building blocks to make useful devices, e.g., a photosynthetic reaction center with integral semiconductor storage.

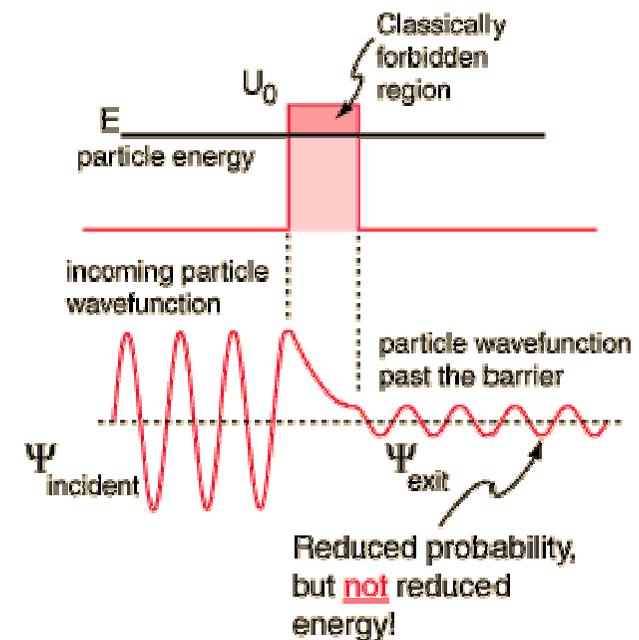
Barreiras de potencial e efeito túnel



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

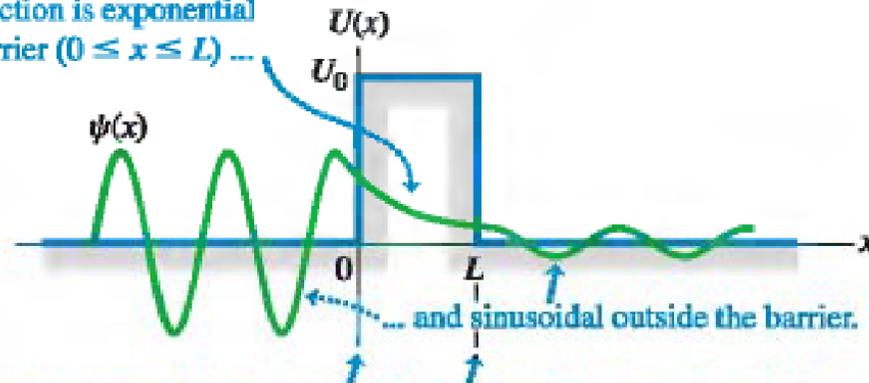


The function and its derivative (slope) are continuous at $x = 0$ and $x = L$ so that the sinusoidal and exponential functions join smoothly.



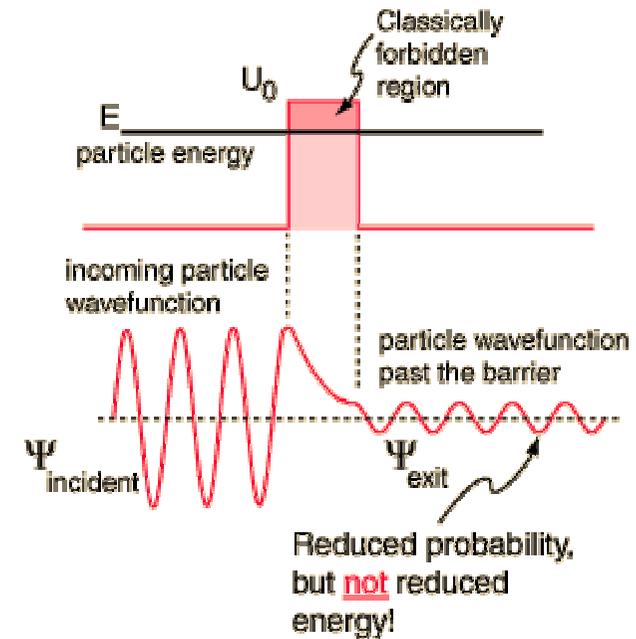
Barreiras de potencial e efeito túnel

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

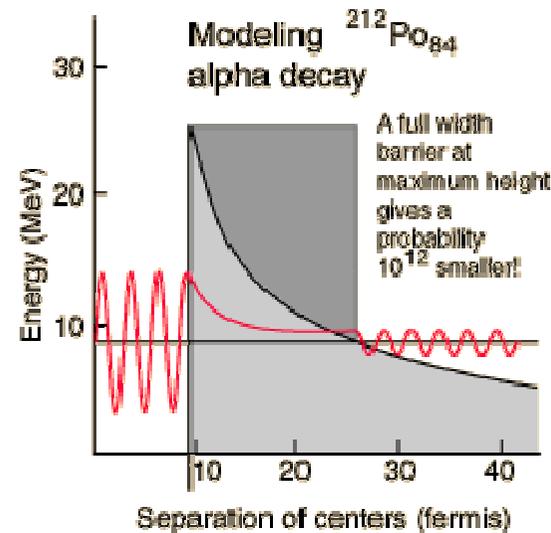
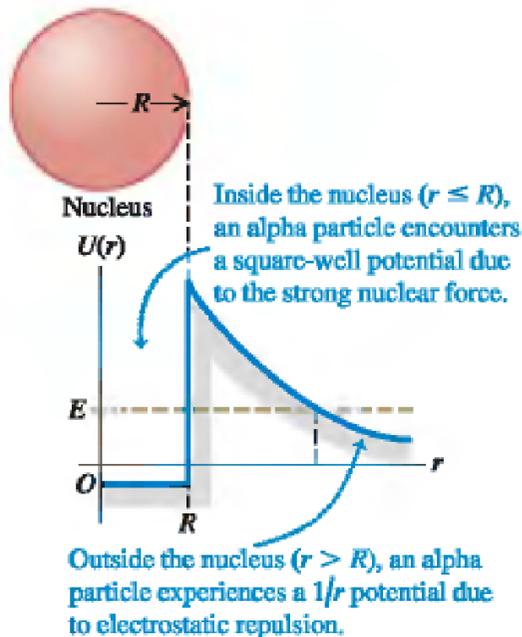


... and sinusoidal outside the barrier.

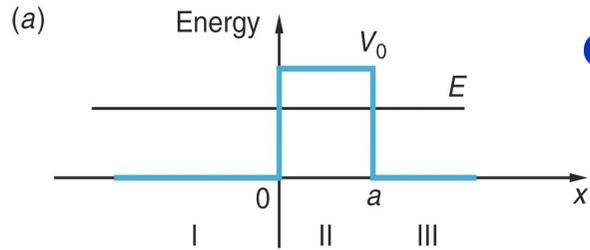
The function and its derivative (slope) are continuous at $x = 0$ and $x = L$ so that the sinusoidal and exponential functions join smoothly.



Reduced probability, but **not** reduced energy!

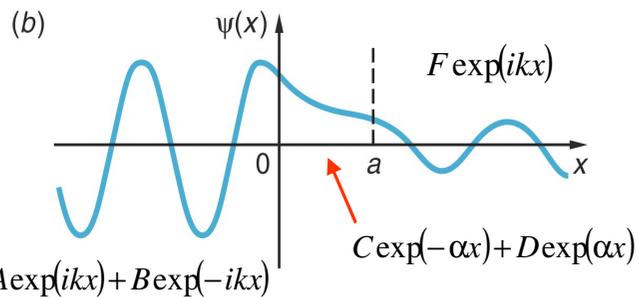


Exemplos de efeito de túnel em barreiras de potencial



Coeficientes de transmissão

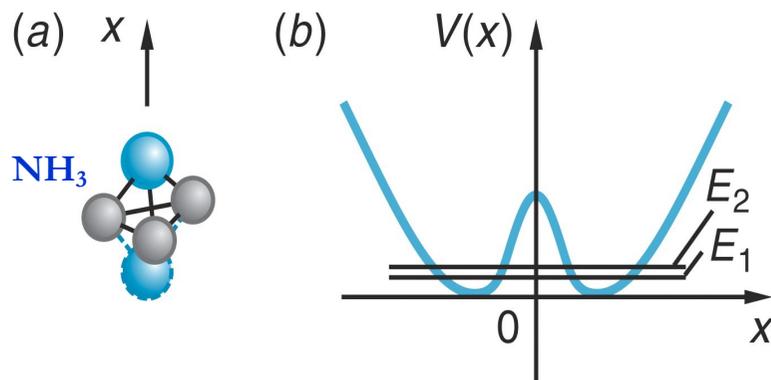
$$T(E) = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left[1 + \sinh^2 \alpha a / 4 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) \right]^{-1}$$



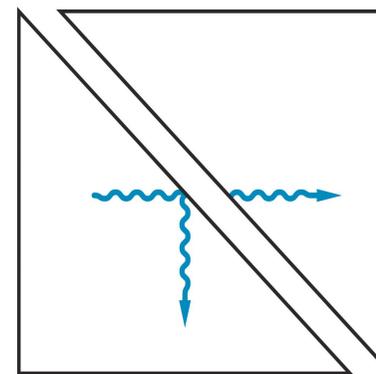
Se $\alpha a \gg 1$: $T(E) \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) \exp(-2\alpha a)$,

onde $\alpha = \sqrt{2m(U_0 - E) / \hbar^2}$.

Relógio atômico de NH₃



Barreira óptica

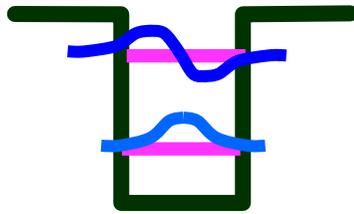


Adaptado de *Modern Physics*, Tipler

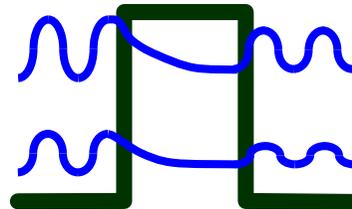
Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

Dupla barreira de potencial: efeito de túnel ressonante

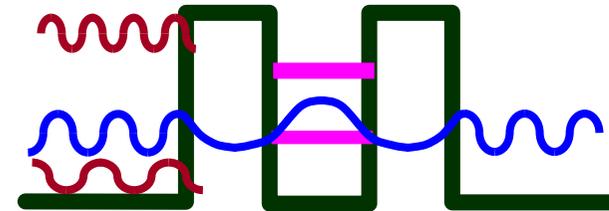
Poço quântico



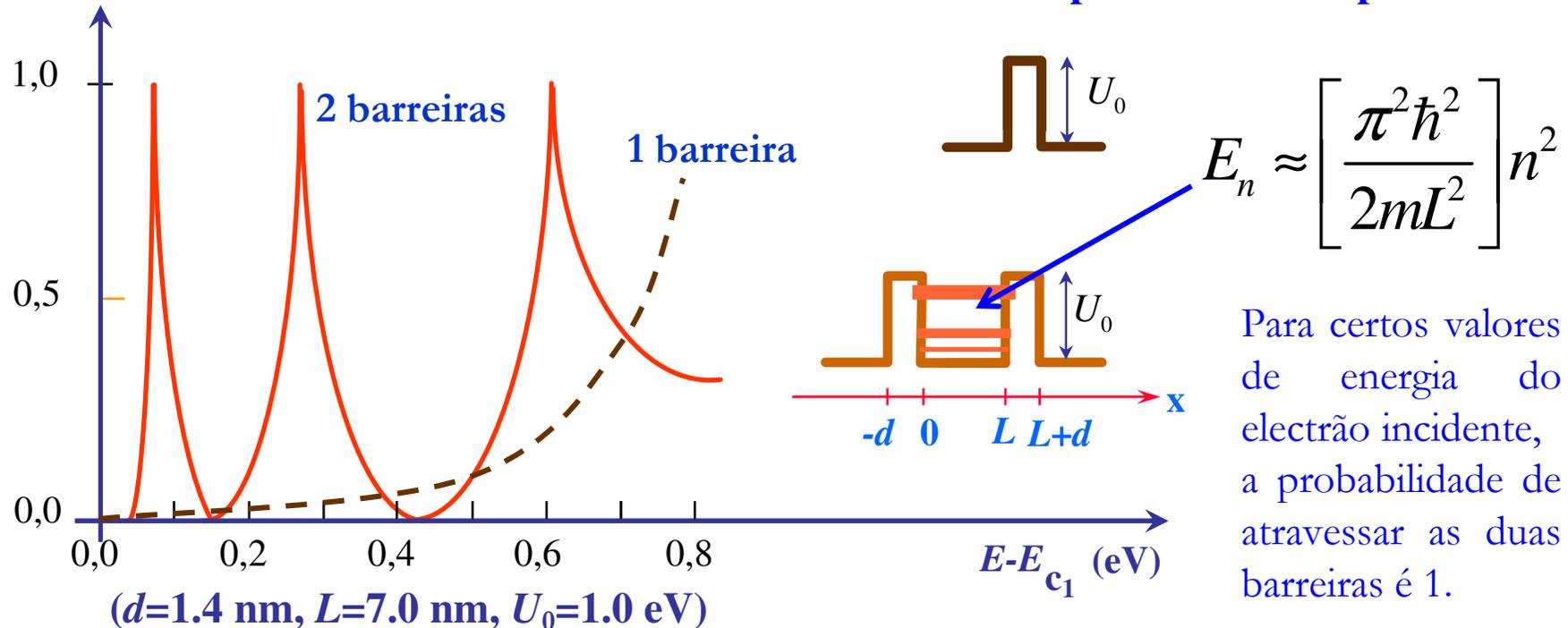
Barreira



Dupla barreira de potencial

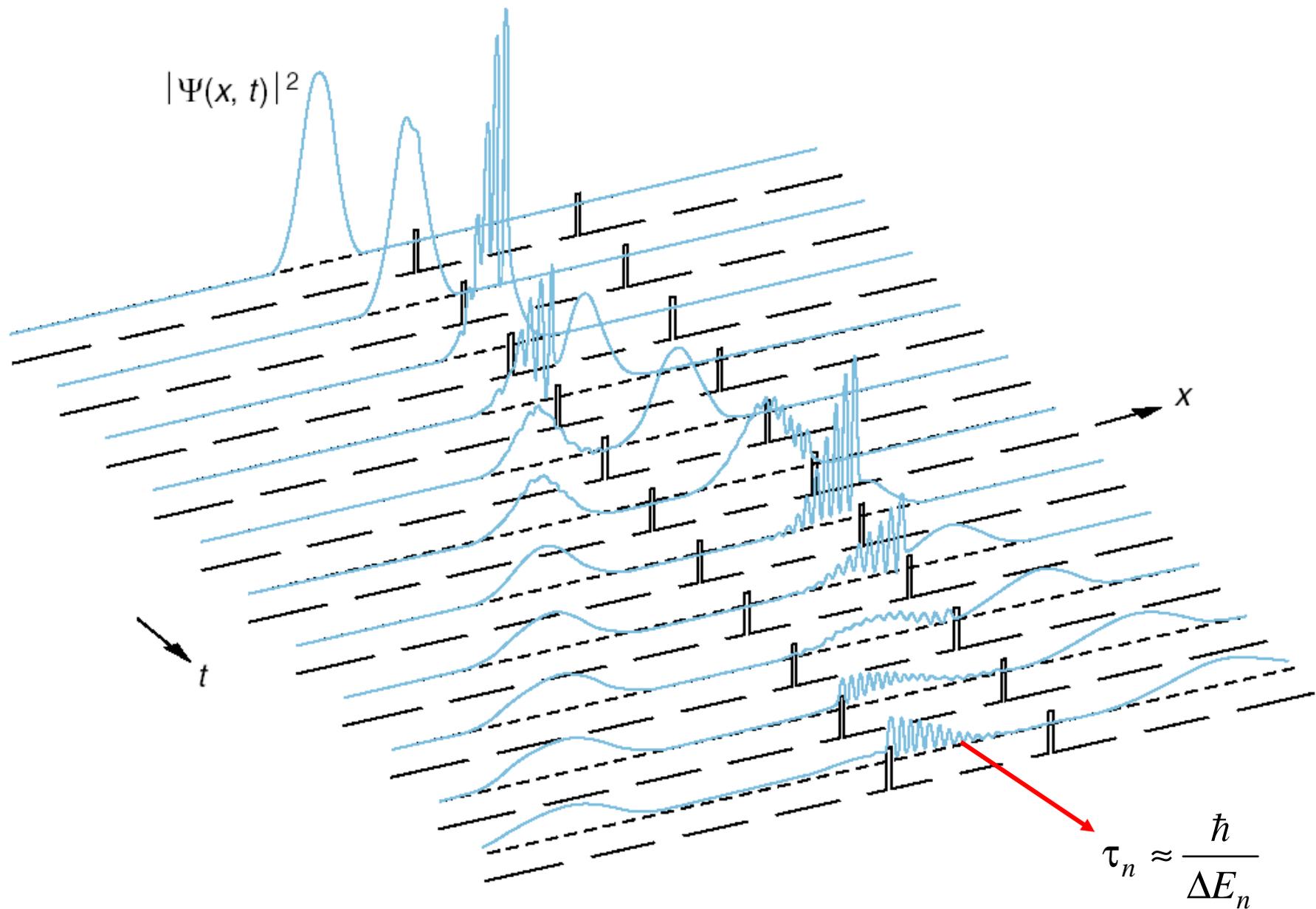


Probabilidade transmissão do electrão através de uma dupla barreira de potencial

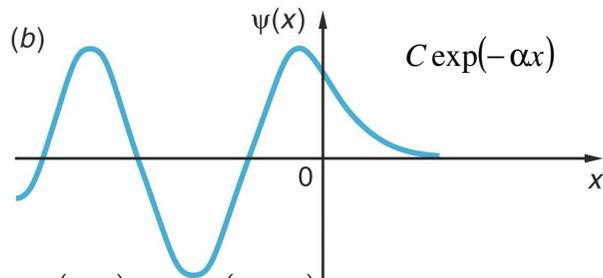
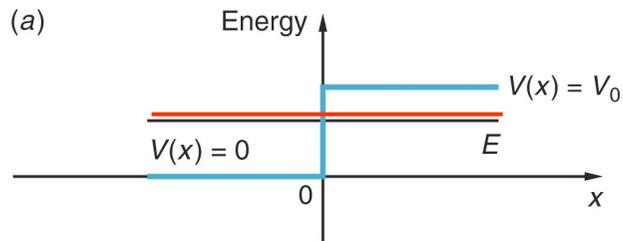
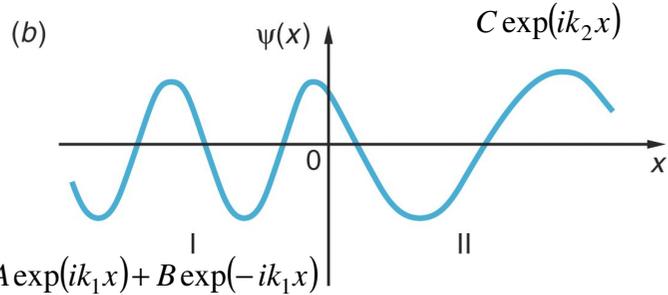
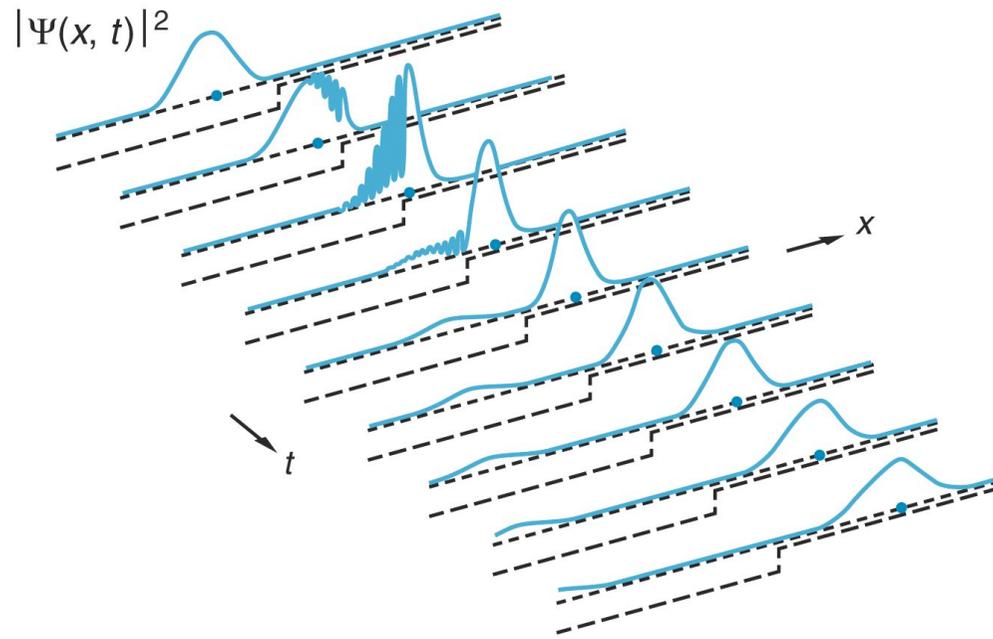
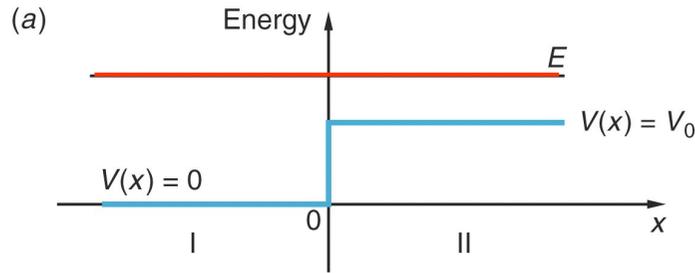


Para mais detalhes ver, por exemplo: <http://w3.ualg.pt/~jlongras/PHD-JMLF.pdf>, 3º capítulo.

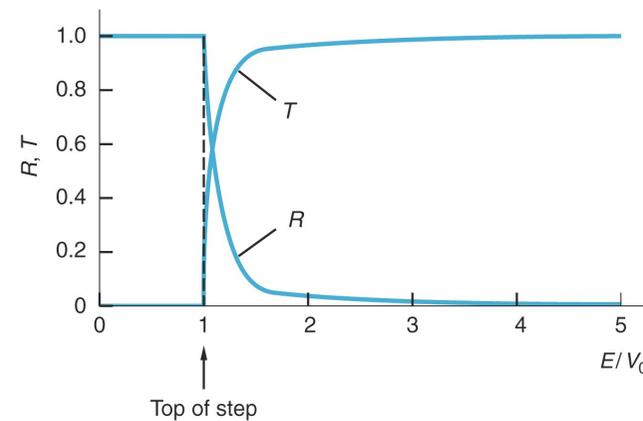
Evolução da função de onda numa dupla barreira



Função de onda num degrau de potencial



Coeficientes de transmissão e de reflexão



Adaptado de *Modern Physics*, Tipler

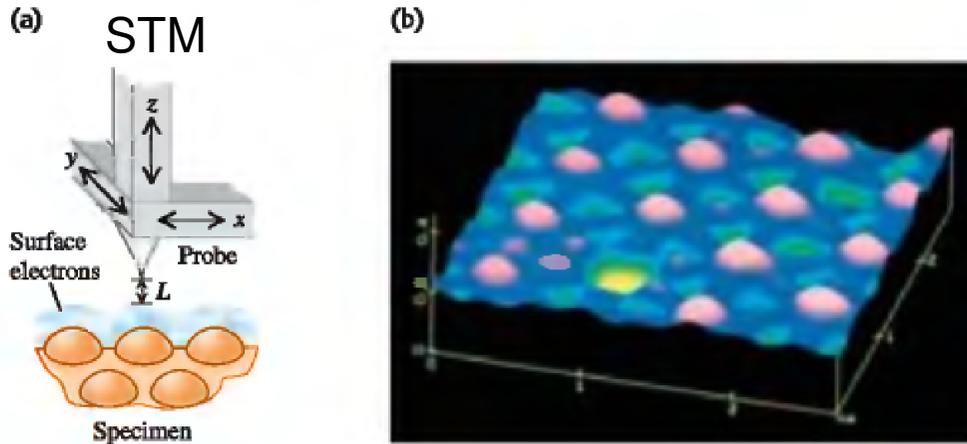
15-09-2009

Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

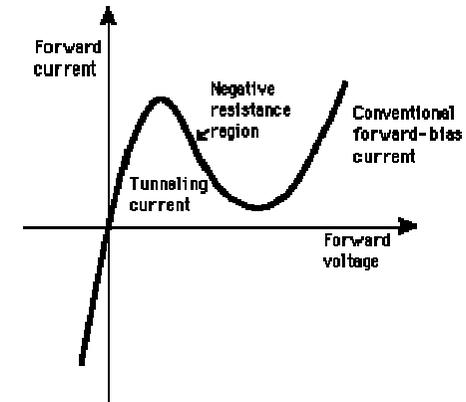
188

Barreiras de potencial e efeito túnel: aplicações

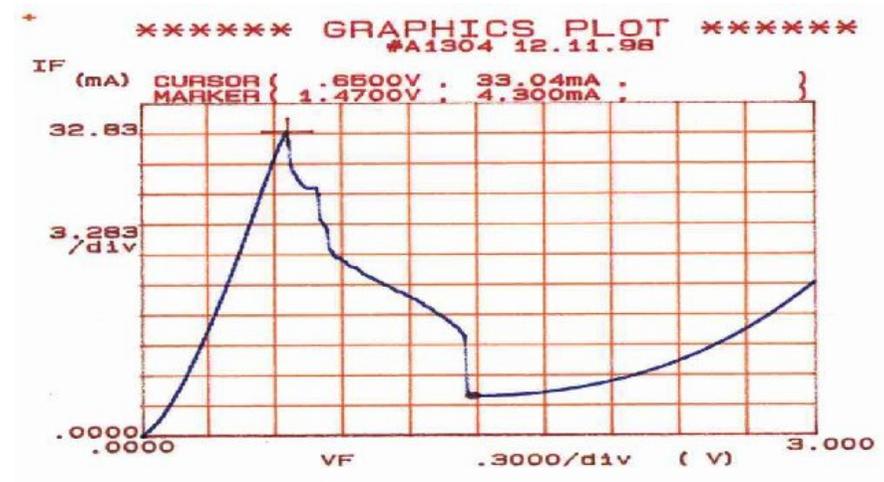
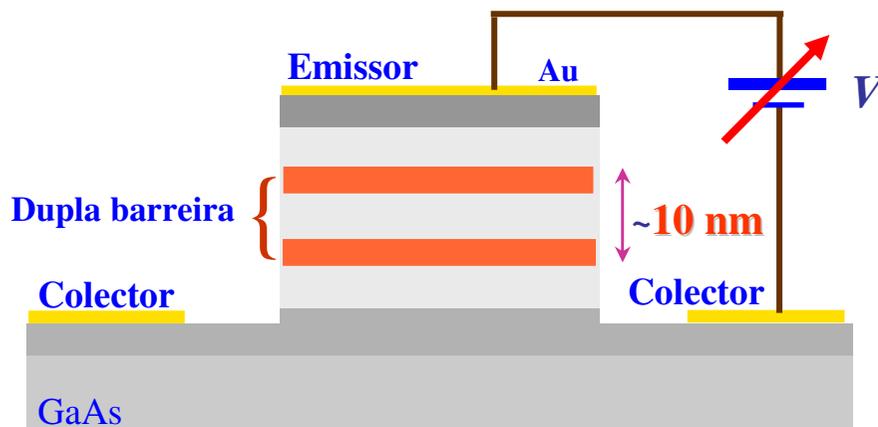
Scanning Tunneling Microscope



Díodo Túnel



RTD: "Resonant Tunnelling Diode"



Microscópico de varrimento baseado no efeito de túnel

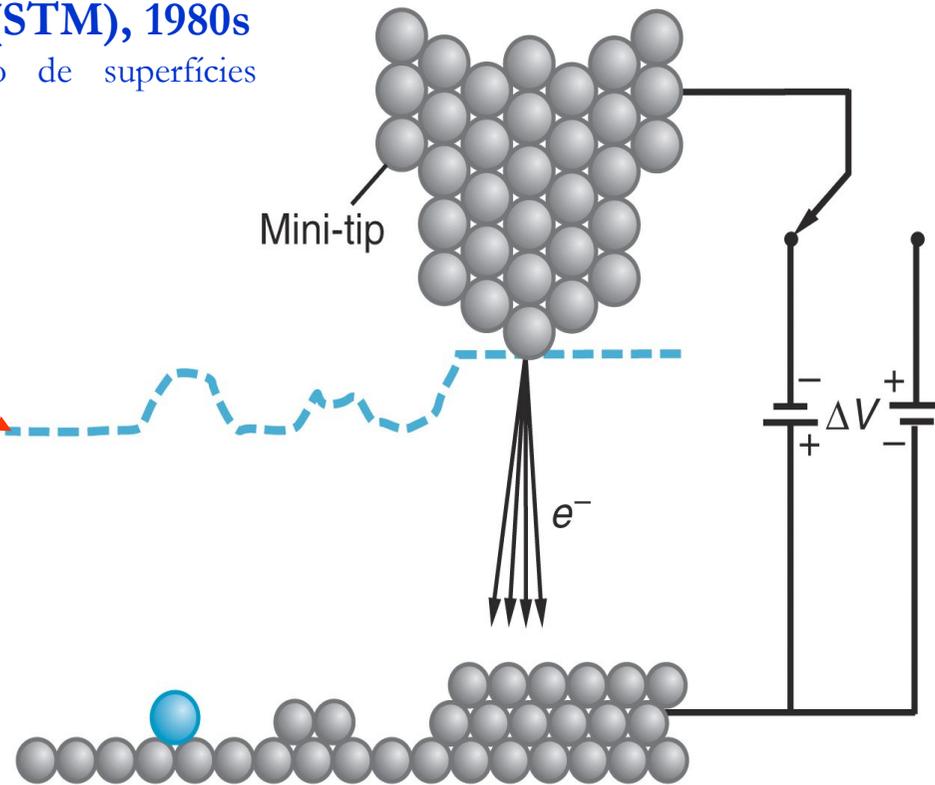
Scanning Tunneling Microscope (STM), 1980s

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.



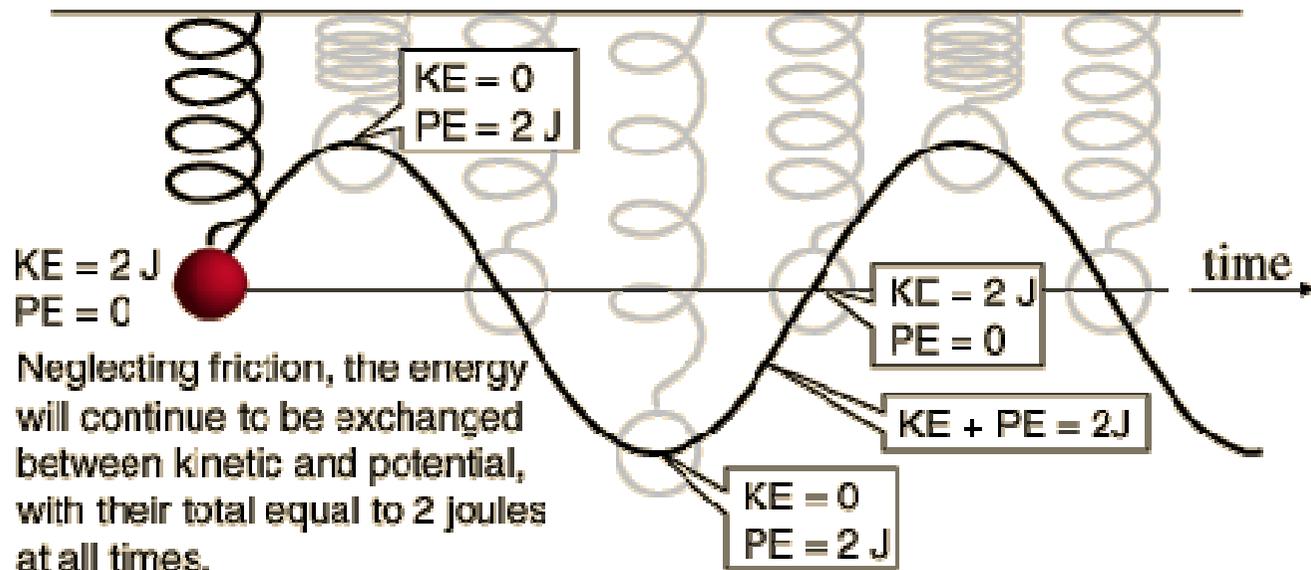
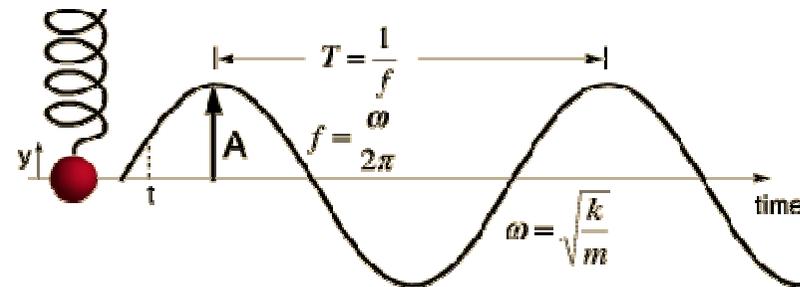
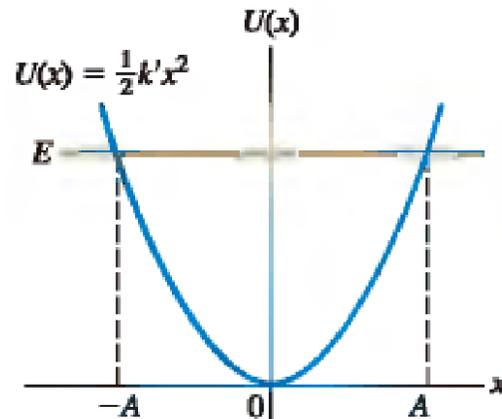
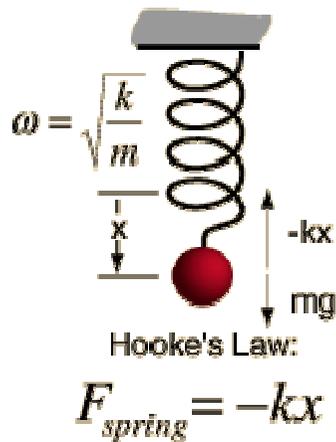
Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

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.

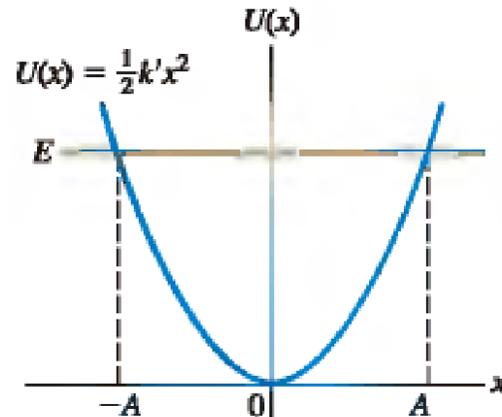
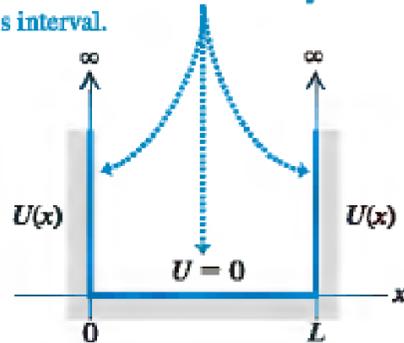
Piezoelectricidade ou piezelectricidade: electricidade desenvolvida em certos cristais quando se exercem pressões sobre as suas faces (de piez- + electricidade); piez(o)- elem. de formação de palavras que exprime a ideia de fazer pressão, comprimir, apertar (do gr. piézein, «fazer pressão»).

Oscilador harmónico clássico



Funções de onda e níveis de energia de um oscilador harmónico quântico

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

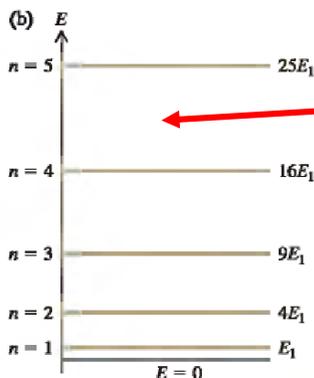


Equação de Schrödinger para o oscilador harmónico quântico

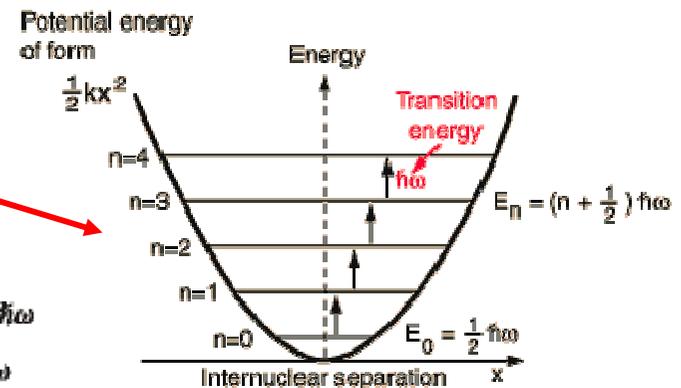
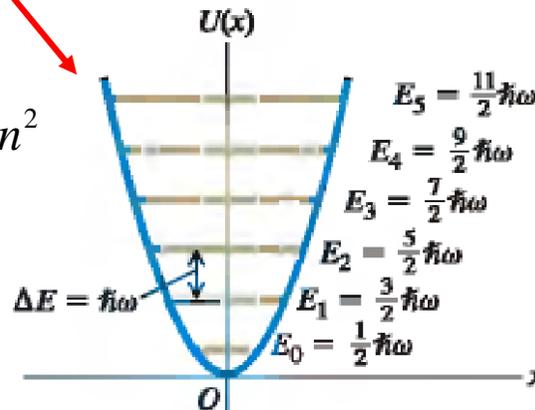
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}k'x^2\psi = E\psi$$

Níveis de energia do oscilador harmónico quântico

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



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

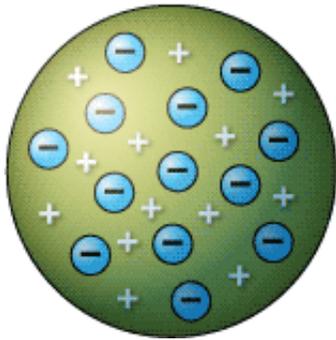


$x=0$ represents the equilibrium separation between the nuclei.

Modelos atómicos

(de Thomson a Sommerfeld)

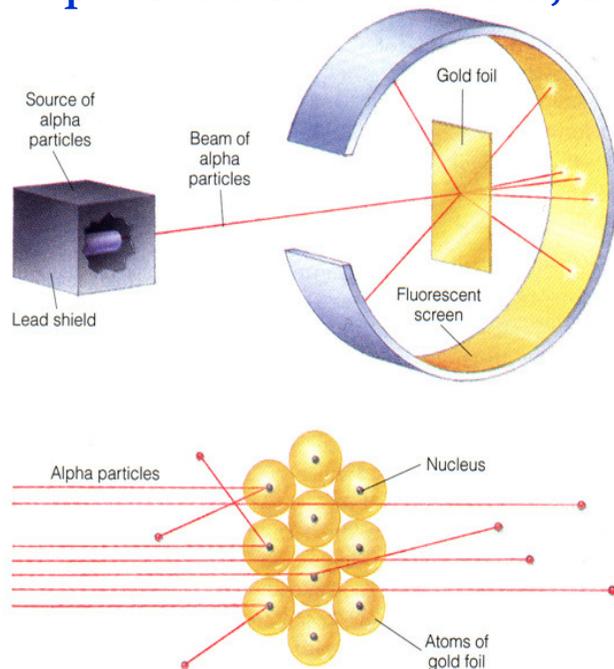
Modelos do átomo e experiência de Rutherford



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



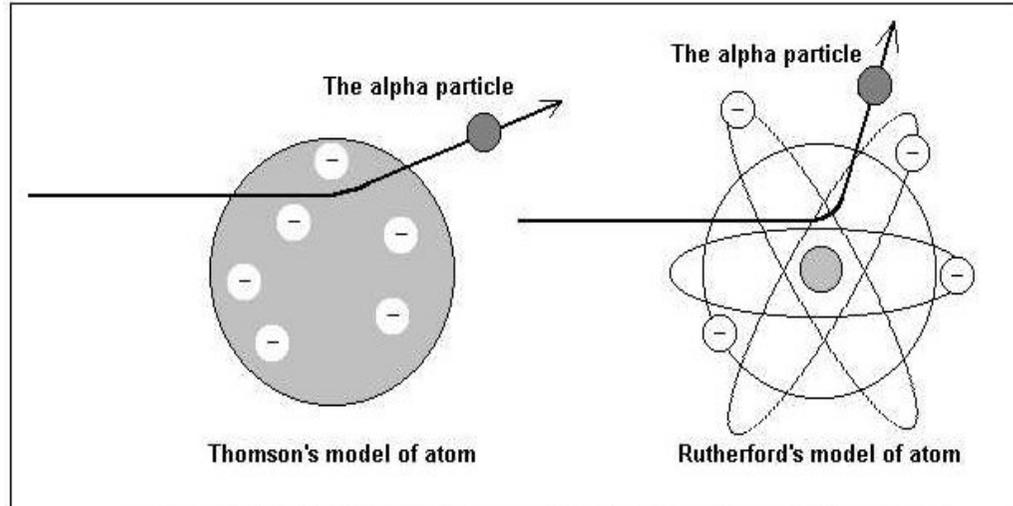
Geiger e Marsden mostraram que o número de partículas espalhadas em função do ângulo de espalhamento era consistente com um pequeno núcleo denso de carga positiva. Para ângulos acima de 140° o núcleo comportava-se como um partícula pontual, não sendo possível determinar a sua dimensão. Nas situações em que o espalhamento não era do tipo coulomb, podia-se inferir a existência de outra força, sendo razoável afirmar que se tinha “atingido” o núcleo. 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).

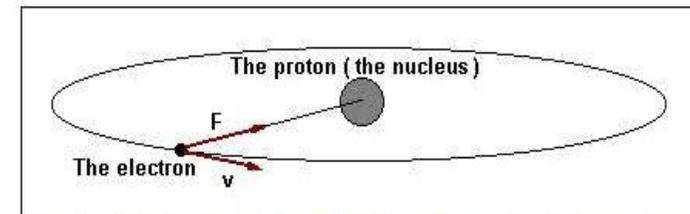
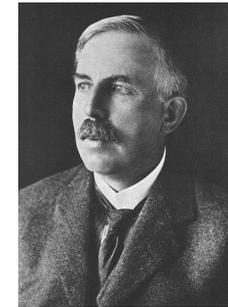
$$r_{\text{nucl}} = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m}, \quad A \equiv \text{número de massa}, \quad \rho_{\text{nucl}} \approx 2,3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$$

«Falhanço» do modelo de Rutherford

Modelo de Rutherford do átomo

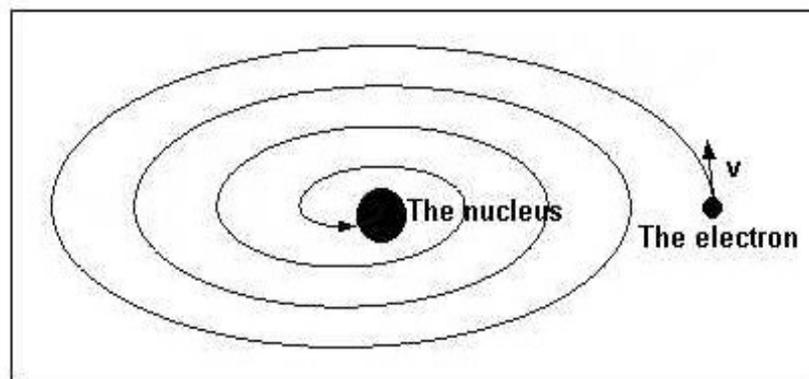


The models of the Thomson's atom and Rutherford's atom; and the expected aberrations of alpha particle in both cases.



The Rutherford's atomic model. The electron circulating on the orbit around the nucleus with the velocity v is attracted by it with the force F

Falhanço do modelo de Rutherford: o electrão acabaria por «cair» no núcleo

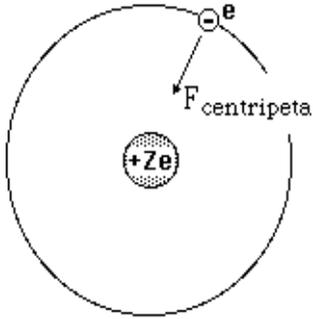


In the planetary model of atom, the electron should emit energy and spirally fall on the nucleus.



Proposta de Bohr para o modelo do átomo

Órbita «clássica» do electrão e a quantização do momento angular



1º postulado de Bohr: a órbita do electrão obedece às leis de Newton

$$m_e a \equiv \frac{m_e v_e^2}{R} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{eZe}{4\pi\epsilon_0 R^2} \quad \text{e} \quad E_C = \frac{m_e v_e^2}{2} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

$$U = E_P = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad \therefore E_T = E_C + U = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

A energia total do sistema electrão (-e) + núcleo (+Ze) é negativa porque se trata de um estado ligado – para separar os componentes do sistema é necessário fornecer energia aos sistema.

2º postulado de Bohr: $L \equiv Rm_e v_e = n\hbar$; obtém-se $R_n = \frac{1}{m_e v_e} n\hbar = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Zm_e e^2} n^2 = a_0 \frac{n^2}{Z}$

Pode escrever a energia da órbita com número quântico principal n , como:

$$E_n = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R_n} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

O parâmetro n designa-se **número quântico principal**. Para o caso do átomo de hidrogénio $a_0 = 52,9$ pm. Este valor corresponde ao raio de Bohr para o átomo de hidrogénio.

3º postulado: nas órbitas estacionárias o sistema não perde energia (não emite radiação)

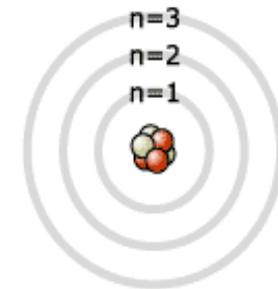
4º postulado: o sistema pode alterar a sua energia emitindo ou absorvendo um *quantum* de energia.

Proposta de Bohr para o modelo do átomo

3º postulado: nas órbitas estacionárias o sistema não perde energia (não emite radiação)

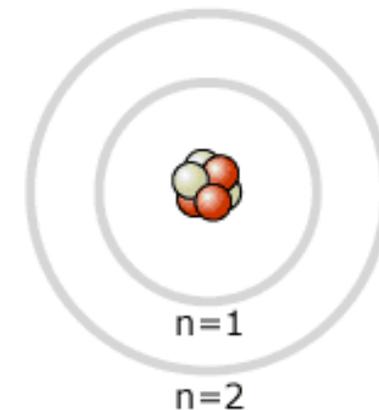
4º postulado: o sistema pode alterar a sua energia emitindo ou absorvendo um *quantum* de energia:

$$\Delta E_{fi} = E_{n_f} - E_{n_i} = -E_0 \frac{Z^2}{n_f^2} + E_0 \frac{Z^2}{n_i^2} = Z^2 E_0 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu$$
$$\rightarrow \nu_{fi} = \frac{Z^2 E_0}{h} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\lambda_{fi}} = \frac{Z^2 E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$



Convenção: a emissão de energia pelo sistema quando altera a sua configuração corresponde a valores positivos de ΔE , de ν e de λ ; a absorção a valores negativos.

Estes postulados são apresentados de forma *ad hoc*, isto é, adrede – “calham bem” – para a explicação dos fenómenos; não resultam dos princípios de uma teoria.



A teoria ondulatória da matéria e o modelo de Bohr do átomo

Guitarra, ondas *electrónicas* e os raios de Bohr no átomo de hidrogénio

Perguntar porque é que só existem determinados estado possíveis num átomo, é semelhante a perguntar como é que uma guitarra sabe que altura de som (frequência) deve produzir quando as suas cordas são percutidas.

Electron wave resonance

$$\lambda_1 = 2\pi r_1$$

$$2\lambda_2 = 2\pi r_2$$

$$3\lambda_3 = 2\pi r_3$$

String resonance modes

$$\lambda = 2L$$

$$\lambda = L$$

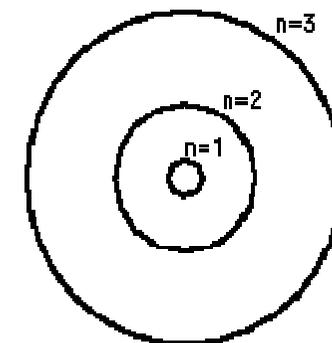
$$\lambda = \frac{2L}{3}$$

Electron wave resonance

$$\lambda_1 = 2\pi r_1$$

$$2\lambda_2 = 2\pi r_2$$

$$3\lambda_3 = 2\pi r_3$$



$$r_n = n^2 r_1 = n^2 a_0$$

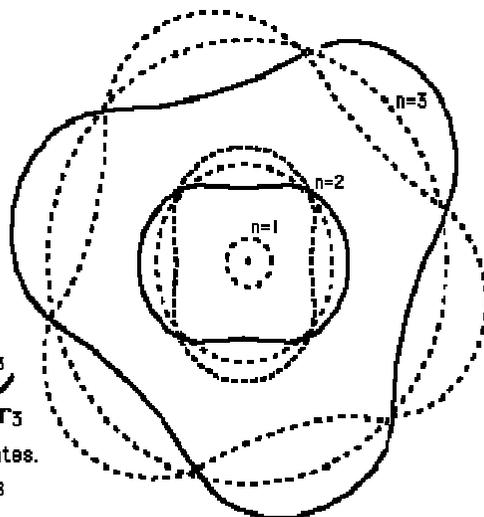
For a hydrogen atom:

$$\lambda_1 = 2\pi r_1 = 6.28 a_0$$

$$\lambda_2 = 12.57 a_0$$

$$\lambda_3 = 18.85 a_0$$

Wavelengths for hydrogen states.
 $a_0 = 0.529 \text{ \AA} = \text{Bohr radius}$



O modelo de Bohr do átomo correspondeu a uma passo significativo no sentido da teoria moderna do átomo, postulando que o momento angular do electrão está quantizado, dando origem aos níveis de energia discretos permitidos. Os desenvolvimentos da teoria quântica e a proposta da equação de Schrödinger permitiram refinar os modelos atómicos e compreender os espectros descontínuos (valores de energia atómicos) obtidos.

Modelo de Bohr para átomos hidrogenóides

Os **átomos hidrogenóides** são **átomos** formados por um núcleo e um só electrão. Chamam-se assim porque o seu comportamento é similar ao do hidrogénio. É hidrogenóide dentro desta definição quaisquer dos **isótopos** do hidrogénio. Um caso típico de átomo hidrogenóide é também o de um átomo de qualquer elemento que se tenha ionizado até perder todos os electrões menos um (um exemplo claro é o **hélio** após perder um dos seus electrões). Existe além disso uma multiplicidade de **átomos exóticos** que também têm comportamento hidrogenóide por motivos diversos.

Na Figura faz-se a comparação entre os níveis de energia do hidrogénio atómico e os do ião He^+ ($Z=2$, onde Z representa o número atómico do elemento). Como se pode ver, a estrutura de níveis é a mesma.

Fórmula de Balmer-Rydberg para o H

$$\frac{1}{\lambda} = R_{y,H} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\text{ou } hf = E_{0,H} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

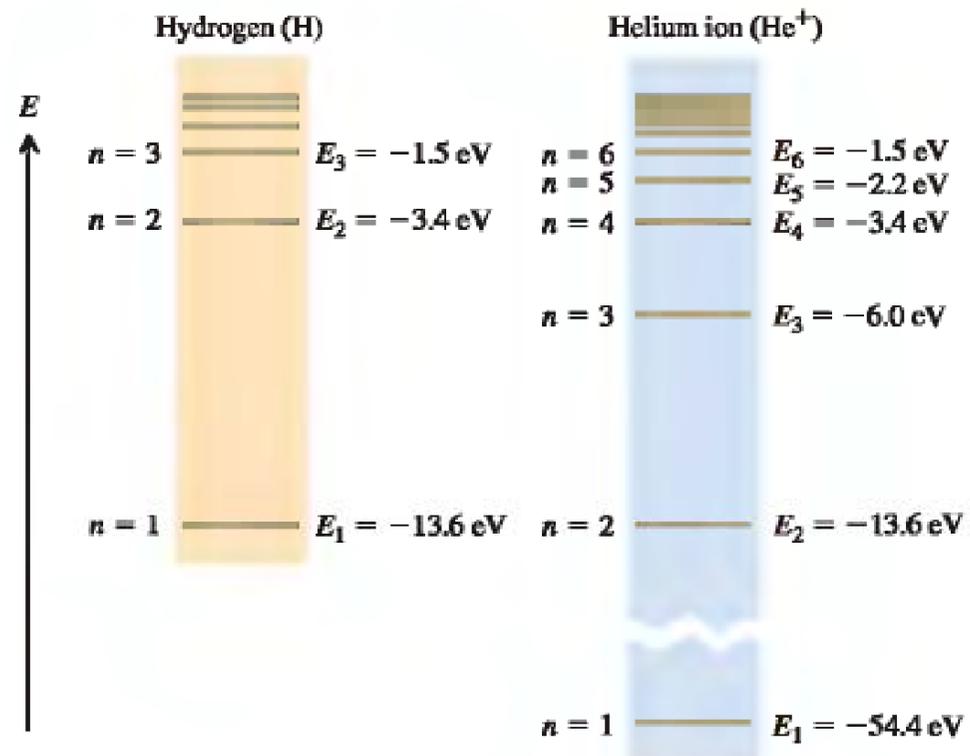
$$\text{com } E_{0,H} = -13.6 \text{ eV}$$

Fórmula de Balmer-Rydberg para o He^+

$$\frac{1}{\lambda} = R_{y,\text{He}^+} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\text{ou } hf = E_{0,\text{He}^+} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

$$\text{com } E_{0,\text{He}^+} = E_{0,H} Z^2 = -54.4 \text{ eV}$$



Niels Bohr



“Niels Bohr deve ser um cérebro de primeira linha, extremamente crítico e visionário, que nunca perde o rasto do objectivo essencial.” Einstein, 1919 (bilhete-postal a Planck)

“É verdadeiramente um homem de génio. ... Tenho uma confiança total na sua maneira de pensar.” Einstein, 1922

Que esta insegura e contraditória fundamentação [a da Física entre os anos de 1910 e 1920] tivesse sido suficiente para permitir que um homem como Bohr, de instinto e tacto únicos, descobrisse as leis supremas das riscas espectrais e das camadas electrónicas dos átomos conjuntamente com os seus significados para a química, pareceu-me um milagre; e ainda hoje me parece um milagre. É a forma mais elevada de musicalidade na esfera do pensamento.” Einstein (P. A. Schilpp), 1949

[A. Pais]



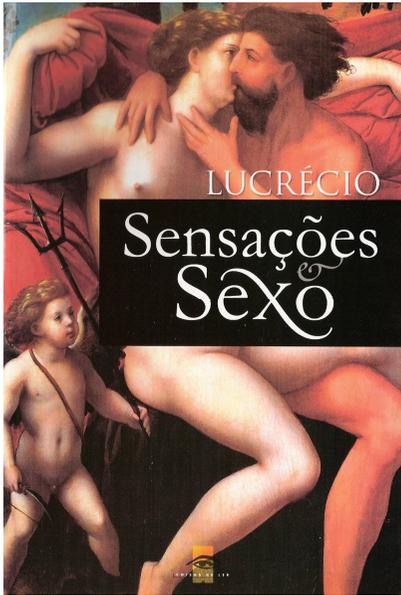
Debates Bohr–Einstein a propósito da Mecânica Quântica

Einstein liked inventing phrases such as "God does not play dice," "The Lord is subtle but not malicious."

On one occasion Bohr answered, "Einstein, stop telling God what to do."

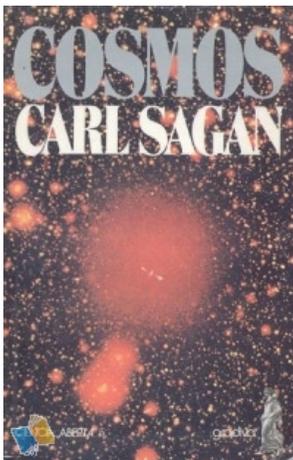
<http://www.aip.org/history/einstein/ae63.htm>

Leituras recomendadas sobre atomismo



Sensações e sexo (edição da “Coisas de Ler”) é um extracto do poema filosófico De Rerum Natura (Sobre a Natureza das Coisas), do poeta e filósofo romano Titus Lucretius Carus, que viveu no século I a.C. Descreve a captação do mundo pelos nossos órgãos dos sentidos. Trata-se da primeira descrição em pormenor da teoria atómica: o mundo é feito de átomos que se movem num universo eterno tanto no espaço como no tempo (quanto ao tempo, estava enganado, mas Lucrecio não sabia do Big Bang). É sensacional que o mundo da física atómica e da genética, o mundo da Nanotecnologia e da biotecnologia, tenha sido antevisto por um poeta!

Texto copiado do blog: <http://dererummundi.blogspot.com/>
<http://dererummundi.blogspot.com/2007/03/sensaes-e-sexo.html>

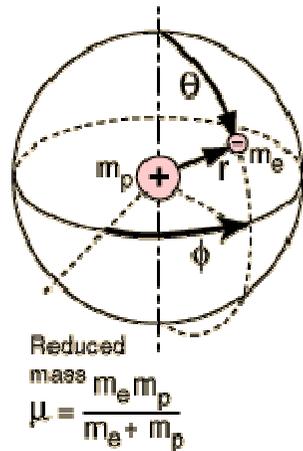


Cosmos - foi uma série de TV realizada por Carl Sagan e sua esposa Ann Druyan, produzida pela KCET e Carl Sagan Productions, em associação com a BBC e a Polytel International, veiculada na PBS em 1980. <http://pt.wikipedia.org/wiki/Cosmos>

Capítulo/Episódio 7 - *A Espinha Dorsal da Noite (The Backbone of Night)* - Dos antigos gregos à actualidade, Sagan traça o percurso do conhecimento científico sobre o Cosmos.

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

Átomo de hidrogénio segundo a Mecânica Quântica



$$U(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + U(x, y, z) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

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

n ℓ m_ℓ
 principal orbital magnetic
 quantum quantum quantum
 number number number

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

$$R(r) \xrightarrow{\text{Solution exists if and only if ...}} n = 1, 2, 3, \dots \longrightarrow E_n = \frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{-13.6 eV}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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

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

Números quânticos

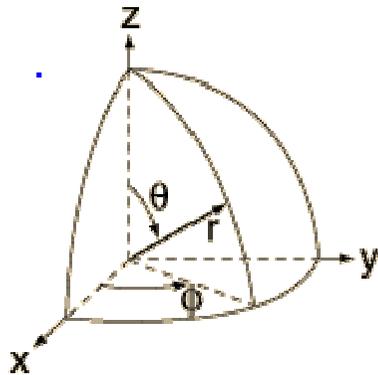
Os **números quânticos** caracterizam os estados e as energias dos átomos e são de enorme relevância quando se trata de descrever a distribuição dos electrões nos átomos.

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

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 $+l$.

Números quânticos



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

$R(r)$ → Principal quantum number

$P(\theta)$ → Orbital quantum number

$F(\phi)$ → Magnetic quantum number

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

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar \quad \begin{array}{l} \ell = \text{angular momentum quantum number} \\ \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \end{array}$$

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

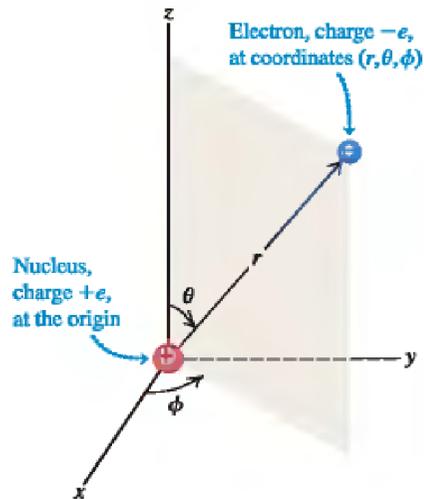
$$L_z = m_\ell \hbar \quad m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell$$

Notação espectroscópica

"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

Quantização do momento angular orbital



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

$$L_z = m_l \hbar$$

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

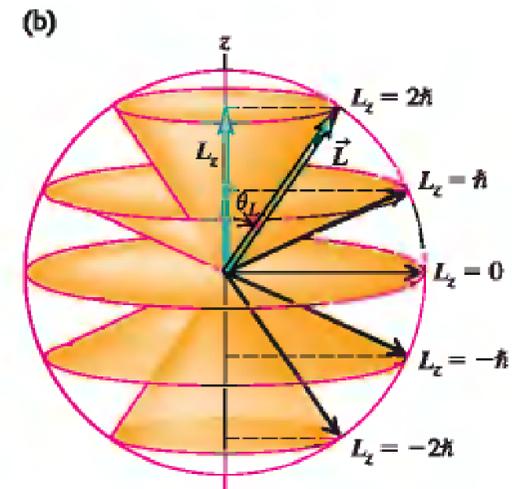
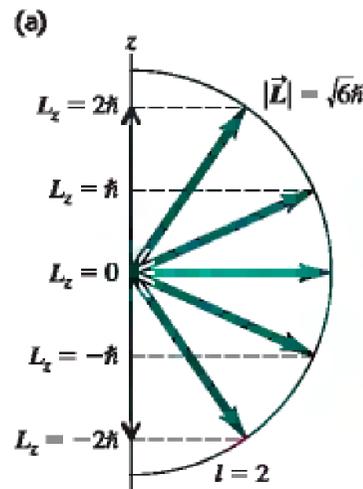


Table 41.1 Quantum States of the Hydrogen Atom

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

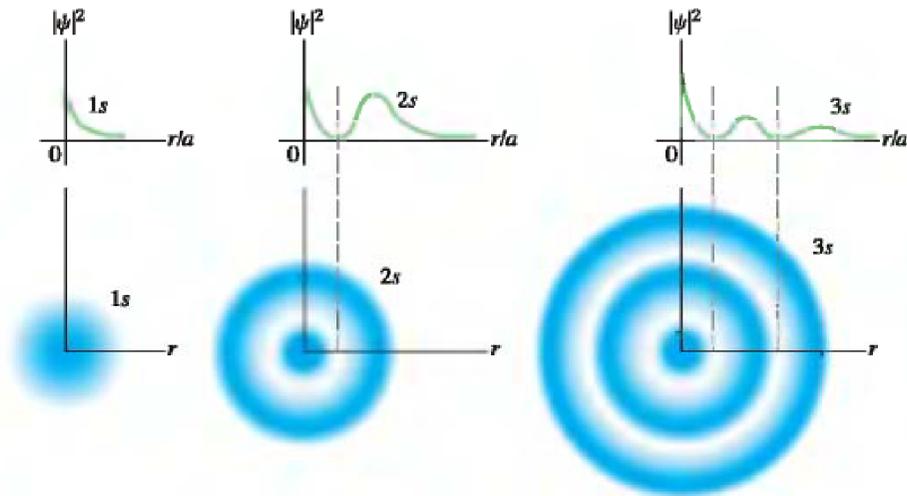
and so on

Distribuição de probabilidade dos electrões

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

$$\text{Probabilidade} = |\Psi|^2 dV$$

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



Raio de Bohr

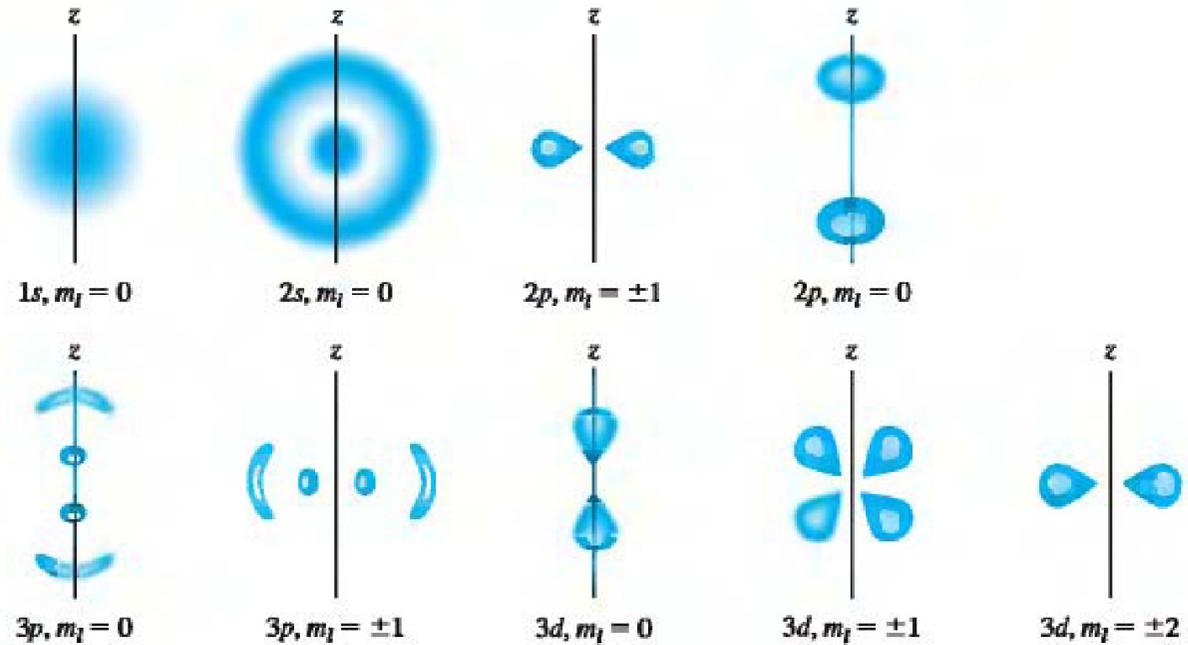
$$a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \sim 52,9 \text{ pm}$$

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



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, que 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

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

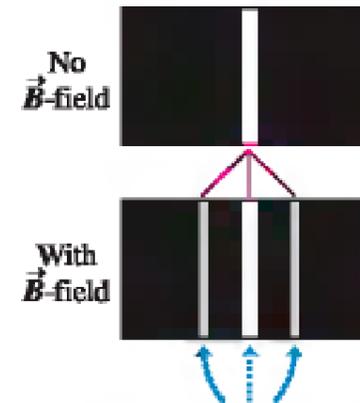
Energia de interacção

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

(orbital magnetic interaction energy)

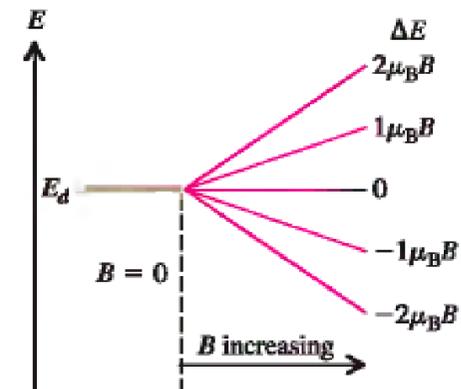
$$U = m_l \mu_B B \quad (\text{orbital magnetic interaction energy})$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (\text{definition of the Bohr magneton})$$



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.



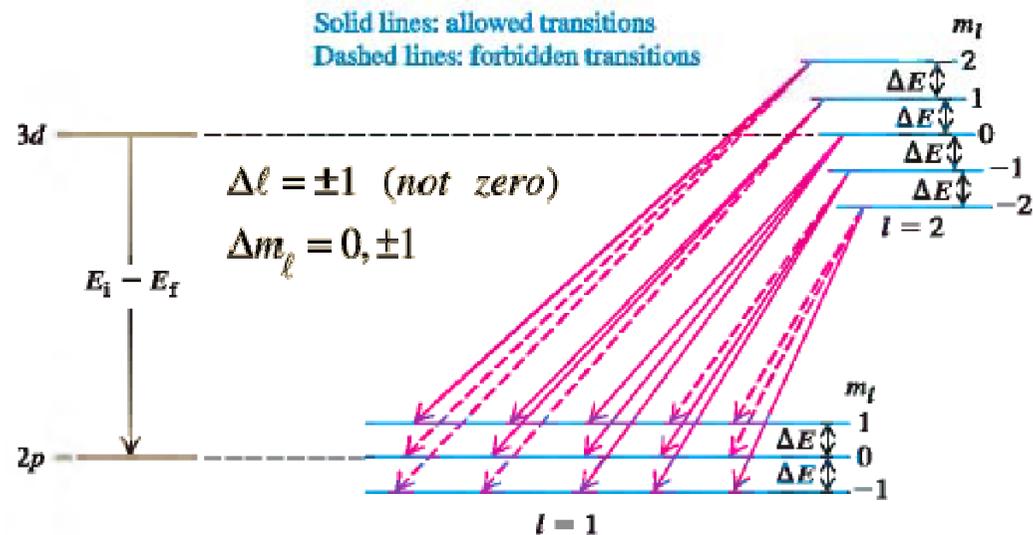
Regras de selecção para as transições atómicas

Nos fenómenos espectrais como o efeito de Zeeman não se observam todas as transições possíveis entre os diferentes pares de níveis de energia. Algumas transições são “proibidas” (i.e., 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 variar 0 ou ± 1 . (O campo eléctrico oscilante associado às transições assemelha-se a um dipolo eléctrico oscilante)

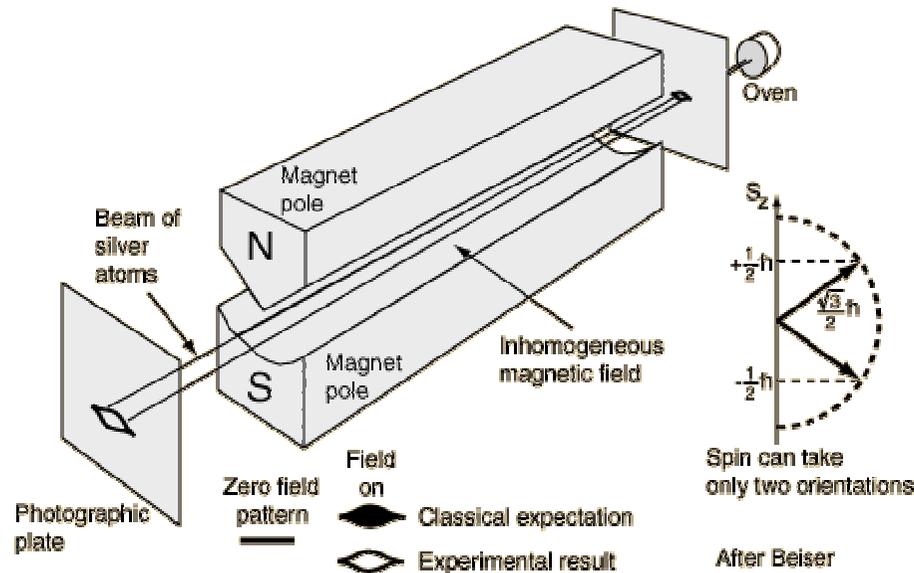
Porque é que l tem de variar de uma unidade?

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 varie de uma unidade, o número quântico magnético pode não variar ou variar ± 1 .

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.



Spin do electrão



Spin é a designação do momento cinético intrínseco do electrão e certas partículas fundamentais (como o protão e o neutrão), que não é devido ao facto de a partícula estar a descrever qualquer órbita, mas é uma propriedade quântica, que caracteriza as possíveis orientações que partículas subatómicas, como protões, electrões, neutrões, alguns núcleos atómicos, etc, têm quando estão em um campo magnético.

O Spin não possui uma interpretação clássica, ou seja, é um fenómeno estritamente quântico. Embora o termo tenha surgido considerando que os electrões "giravam" em torno de si mesmos, produzindo um campo magnético, da mesma forma que uma *volta* de fio percorrido por uma corrente também produz um campo magnético (ver Oersted), esta descrição não é adequada para os neutrões, que não possuem carga eléctrica, nem explica valores de spin como $7/2$ para certos núcleos atómicos (neste caso, ^{235}U). Assim, o termo spin é encarado como quarto número quântico, necessário para caracterizar os estados de um sistema, como os níveis de energia no átomo.

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

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

Momento magnético de spin: $\mu_z = -g\mu_B S_z$ O valor "exacto" de g é dado pela QED.

Fermiões e Bosões. Acoplamento *Spin* - órbita

Pelo facto de ter spin semi-inteiro o electrão é um fermião. O fóton tem spin inteiro e pertence ao grupo dos bosões.

Fermião s. m. (fís.) 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 (electrão, protão, positrão, neutrão, neutrino, núcleos de número de massa ímpar). (De fémio + -ão)

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

Interacção entre os momentos angulares orbital e de spin

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

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 e a tabela periódica

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. Aplica a um átomo, significa que 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.

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	8	L
3	0	0	3s	2		
3	1	-1, 0, 1	3p	6	18	M
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	10		
4	0	0	4s	2	32	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		

Princípio de exclusão de Pauli e a tabela periódica

Table 41.3 Ground-State Electron Configurations

Element	Symbol	Atomic Number (<i>Z</i>)	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 ² 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

Moléculas e matéria condensada

(Molecules and Condensed Matter)

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Prof. MARCELO POLACHINI

© Quimicatual (2000) - todos os direitos reservados

www.quimicatual.com.br

IA 1	CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS																VIIIA 18							
1	Hidrogênio 1,00784 (7) H																	Hélio 4,002602 (2) He						
2	Li 6,941 (2) Li	Be 9,012182 (3) Be																	Boro 10,811 (7) B	Carbono 12,0107 (8) C	Nitrogênio 14,0067 (2) N	Oxigênio 15,9994 (3) O	Fluor 18,9984032(5) F	Neônio 20,1797 (6) Ne
3	Na 22,989770 (2) Na	Magnésio 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						
4	K 39,0983 (1) K	Ca 40,078 (4) Ca	Escândio 44,955910 (8) Sc	Titânio 47,867 (1) Ti	Vanádio 50,9415 (1) V	Cromo 51,9961 (6) Cr	Manganês 54,938049 (9) Mn	Ferro 55,845 (2) Fe	Cobalto 58,933200 (9) Co	Níquel 58,6934 (2) Ni	Cobre 63,546 (3) Cu	Zinco 65,39 (2) Zn	Gálio 69,723 (1) Ga	Germânio 72,64 (1) Ge	Arsênio 74,92160 (2) As	Selênio 78,96 (3) Se	Bromo 79,904 (1) Br	Criptônio 83,80 (1) Kr						
5	Rb 85,4678 (3) Rb	Estrôncio 87,62 (1) Sr	Ítrio 88,90585 (2) Y	Zircônio 91,224 (2) Zr	Níobio 92,90638 (2) Nb	Molibdênio 95,94 (1) Mo	Tecnécio [98] Tc	Rutênio 101,07 (2) Ru	Ródio 102,90550 (2) Rh	Paládio 106,42 (1) Pd	Prata 107,8682 (2) Ag	Cádmio 112,411 (8) Cd	Índio 114,818 (3) In	Estanho 118,710 (7) Sn	Antimônio 121,760 (1) Sb	Telúrio 127,60 (3) Te	Iodo 126,90447 (3) I	Xenônio 131,293 (6) Xe						
6	Cs 132,90545 (2) Cs	Bário 137,327 (7) Ba	Lantânio 138,90549 (2) La	Háfnio 178,49 (2) Hf	Tântalo 180,9479 (1) Ta	Tungstênio 183,84 (1) W	Rênio 186,207 (1) Re	Osmio 190,23 (3) Os	Írídio 192,222 (3) Ir	Platina 195,078 (2) Pt	Ouro 196,96655 (2) Au	Mercurio 200,59 (2) Hg	Tálio 204,3833 (2) Tl	Chumbo 207,2 (1) Pb	Bismuto 208,98038 (2) Bi	Polônio [209] Po	Astato [210] At	Rádônio [222] Rn						
7	Fr [223] Fr	Rádio [226] Ra	Actínio [227] Ac	Rutherfordio [261] Rf	Dubnio [262] Db	Seabórgio [263] Sg	Bório [264] Bh	Hássio [265] Hs	Mitnério [268] Mt	Ununílio [269] Uun	Ununílio [272] Uuu	Ununílio [277] Uub		Ununquádio [285] Uuq										
				Lantânio 138,9055 (2) La	Cério 140,116 (1) Ce	Praseodímio 140,90785 (2) Pr	Neodímio 144,24 (3) Nd	Promécio [145] Pm	Samário 150,36 (3) Sm	Európio 151,964 (1) Eu	Gadolínio 157,25 (3) Gd	Térbio 158,92534 (2) Tb	Disprósio 162,50 (3) Dy	Hólmio 164,93032 (2) Ho	Érbio 167,259 (3) Er	Túlio 168,93421 (2) Tm	Íterbio 173,04 (3) Yb	Lutécio 174,967 (1) Lu						
				Actínio [227] Ac	Tório 232,0381 (1) Th	Protactínio 231,03588 (2) Pa	Urânio 238,02891 (3) U	Netúnio [237] Np	Plutônio [244] Pu	America [243] Am	Cúrio [247] Cm	Berquílio [247] Bk	Califórnio [251] Cf	Einsteinio [252] Es	Férmio [257] Fm	Mendelévio [258] Md	Nobélio [259] No	Laurêncio [262] Lr						

Mg Magnésio
24,305
Nome do Elemento
Massa Atômica
(relativa ao isótopo
¹²C = 12,000... u.)
Símbolo
Estado Físico
a 25° C e 1 atm
Sólido
Líquido
Gasoso
[227]
Número Atômico (Z)

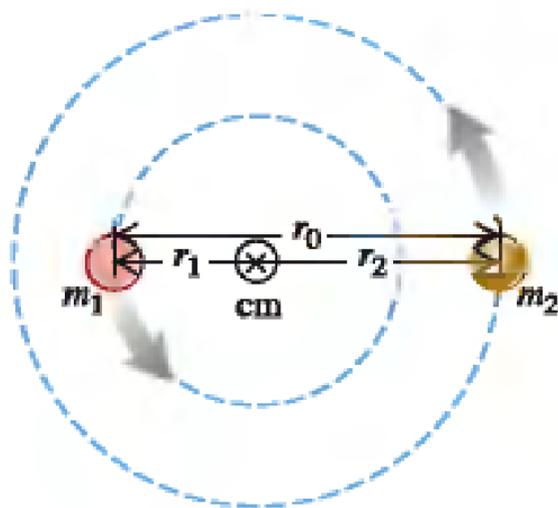
 Hidrogênio
 Metais
 Semimetais
 Ametais
 Gases Nobres
 Lantanóides
 Actinóides

* 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)

Espectros moleculares

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

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

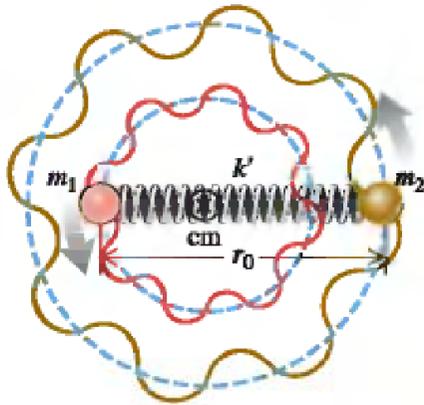
$$I = m_r r_0^2$$

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' .



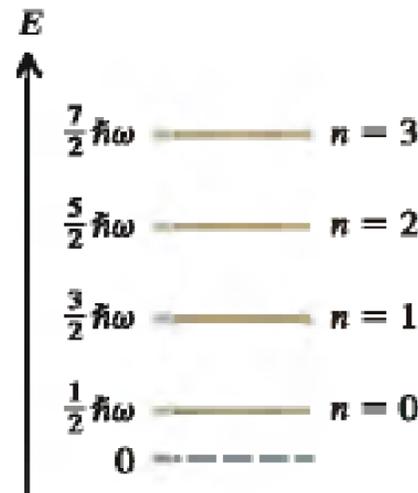
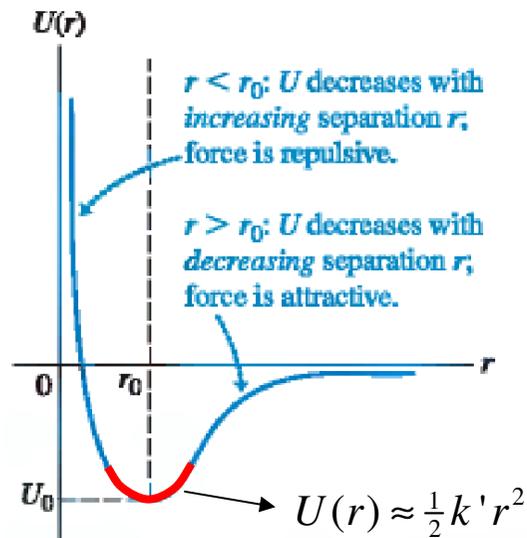
Oscilador harmónico quântico

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

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 $\Delta E = \hbar \omega$.



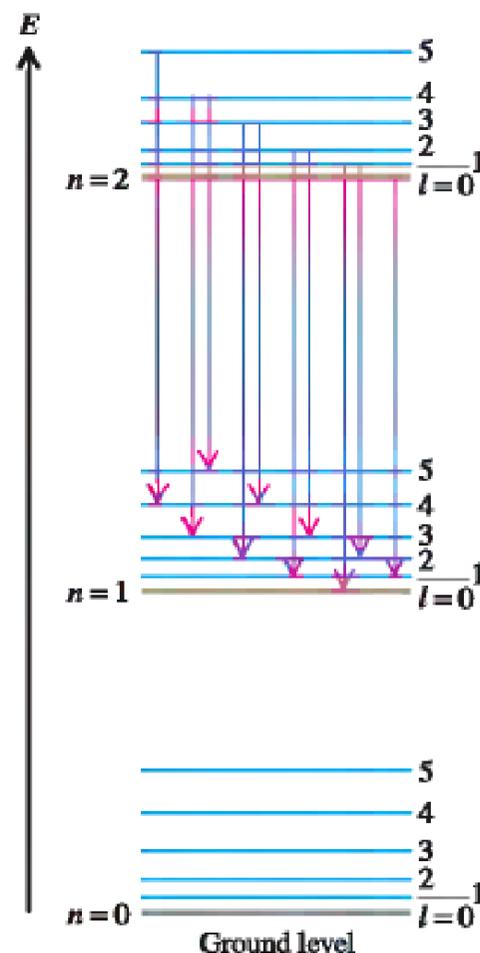
A diferença de energia entre níveis é da ordem de décimas de eV. Para a molécula de monóxido de carbono a separação entre níveis de energia vibracional é ~ 0.2690 eV.

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 $\Delta l = \pm 1$.



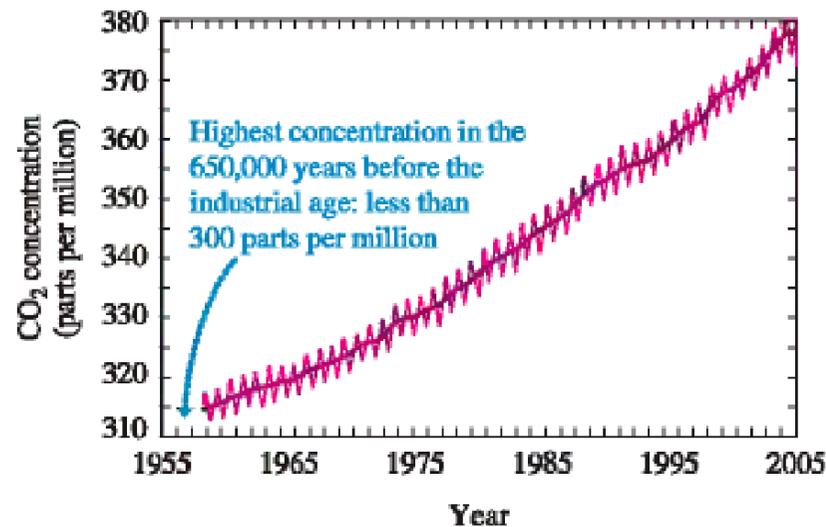
As an illustration of these selection rules, Fig. 42.8 shows that a molecule in the $n = 2, l = 4$ level can emit a photon and drop into the $n = 1, l = 5$ level ($\Delta n = -1, \Delta l = +1$) or the $n = 1, l = 3$ level ($\Delta n = -1, \Delta l = -1$), but is forbidden from making a $\Delta n = -1,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

Moléculas complexas

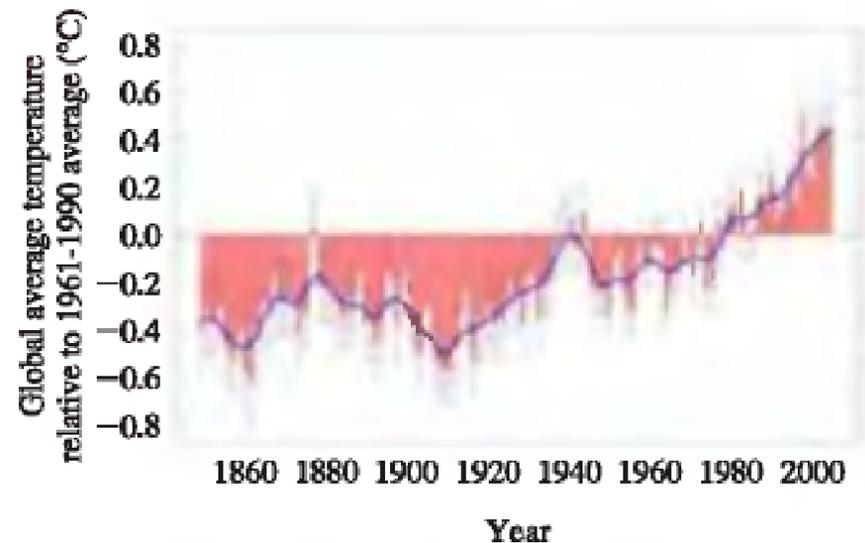
O dióxido de carbono, o metano e o aquecimento global.

42.10 (a) The concentration of atmospheric CO_2 has increased by 18% since continuous measurements began in 1958. (The yearly variations are due to increased intake of CO_2 by plants in spring and summer.) (b) The increase in global average temperature since the beginning of the industrial era is a result of the increase in CO_2 concentration.

(a)



(b)



Estruturas cristalinas

(estrutura dos sólidos)

Classificação dos Materiais

- **materiais moleculares**
- **sólidos cristalinos**
 - **iônicos**
 - **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.

Estudo de fenómenos da matéria condensada

Os modelos físicos usados para descrever as propriedades da matéria condensada:

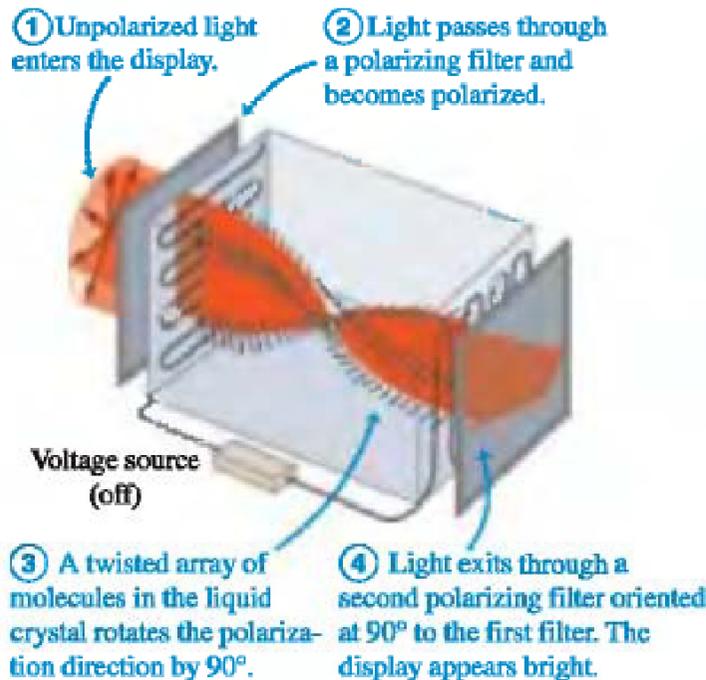
- clássicos (Física clássica)
- semi-clássicos (Física Clássica + Física Quântica)
- totalmente quânticos

Na aproximação clássica a matéria e a radiação são tratados usando a Física Clássica. O modelo do oscilador dipolar (dipolo eléctrico) é um exemplo. Estes modelos são, em geral, o ponto de partida para entender as propriedades gerais da matéria condensada. Nos modelos semi-clássicos a matéria é analisada quanticamente e o campo electromagnético é tratado como onda electromagnética clássica. O tratamento da absorção entre bandas é um exemplo. O coeficiente de absorção é calculado usando a regra de ouro de Fermi, que requer o conhecimento das funções de onda dos níveis de energia envolvidos, mas trata a radiação como campo eléctrico clássico. Os modelos **totalmente** quânticos tratam tanto a matéria como a radiação de acordo com as regras da Mecânica Quântica. O tratamento quântico quantitativo só é usado quando estritamente necessário.

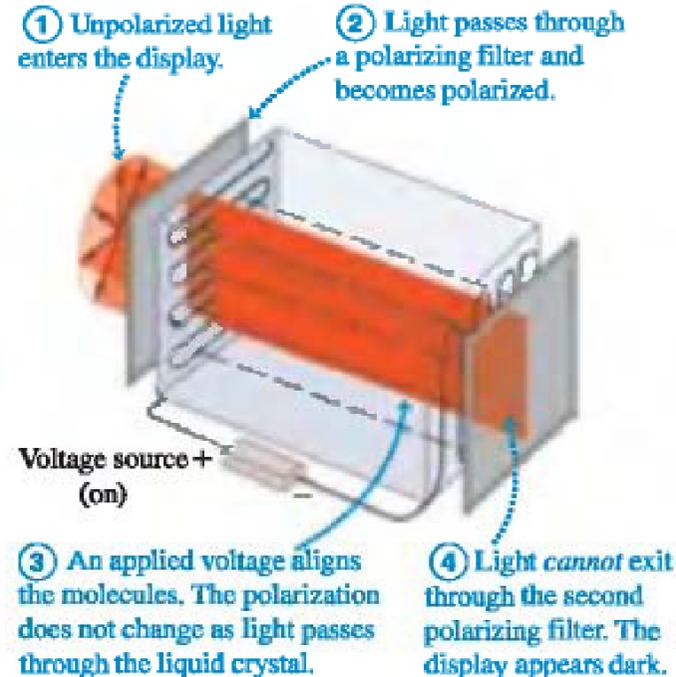
Líquidos e sólidos: ordem de curto e longo alcance

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)



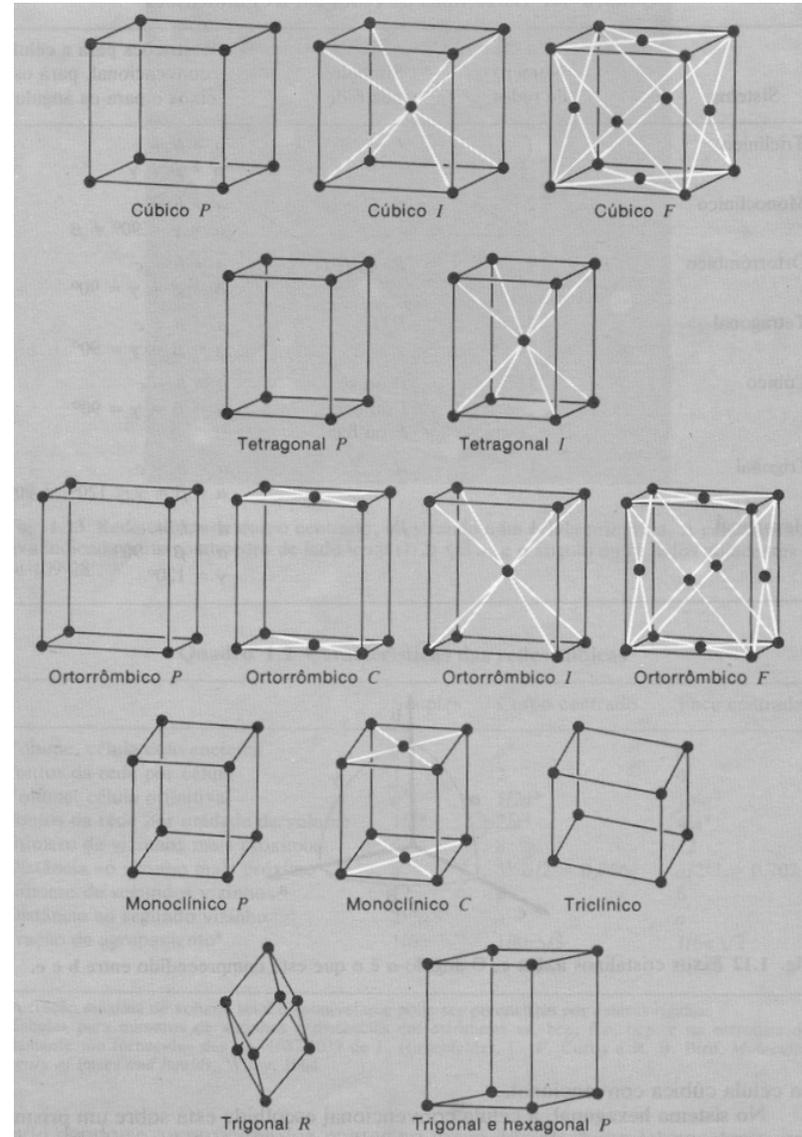
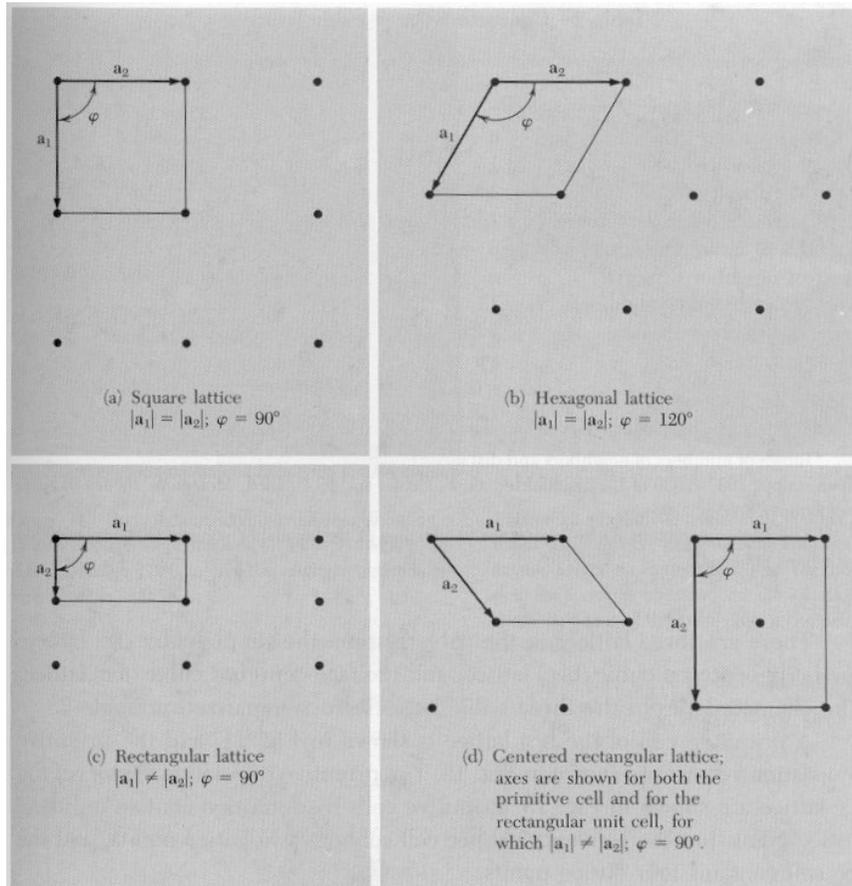
(b) Liquid crystal display (voltage on)



Redes cristalinas

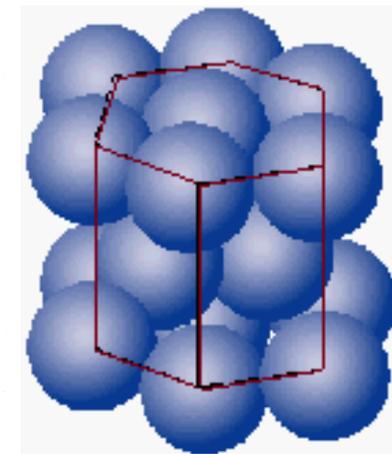
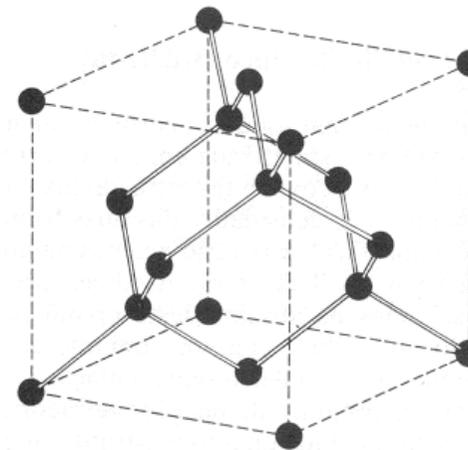
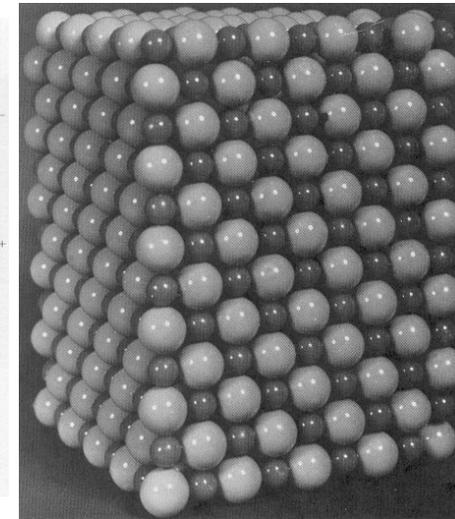
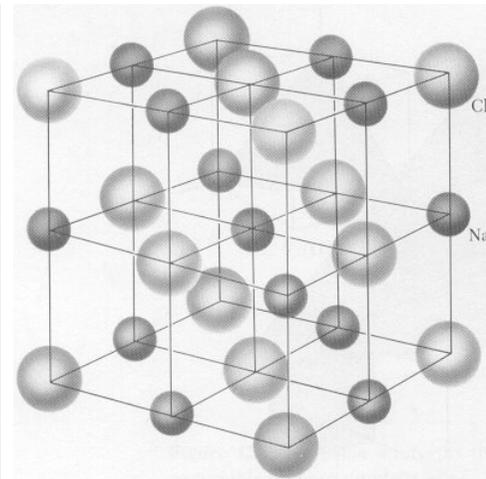
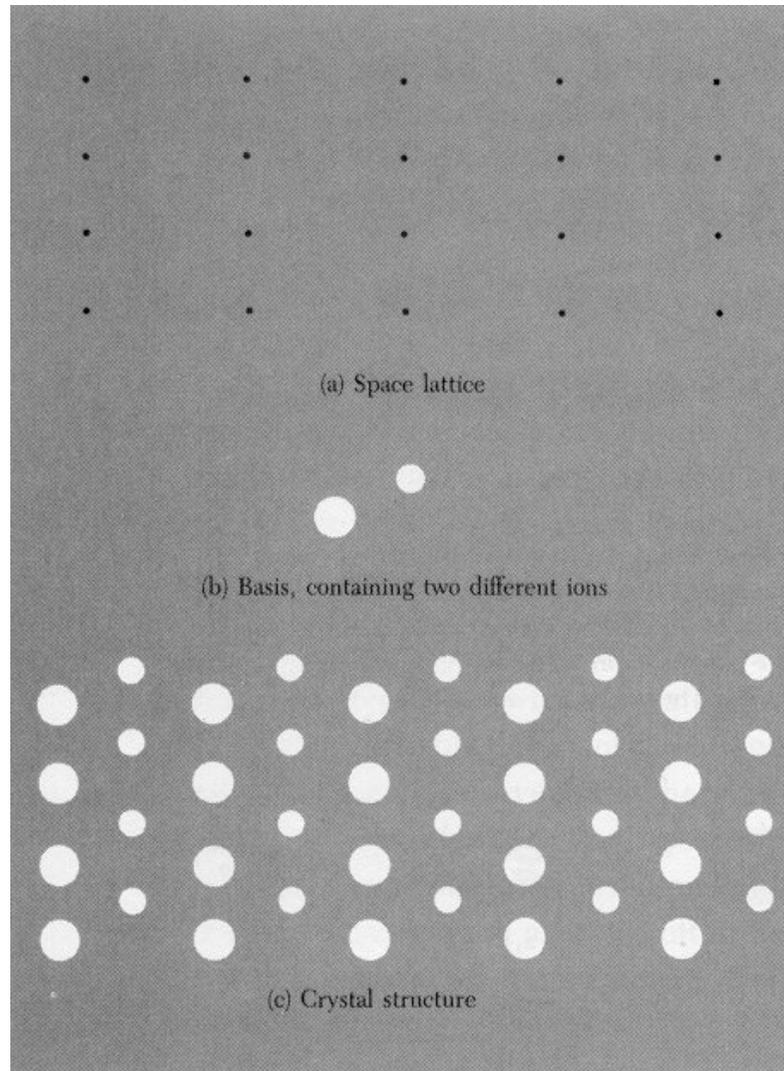
Redes de Bravais espaciais

Redes de Bravais bidimensionais



Redes cristalinas

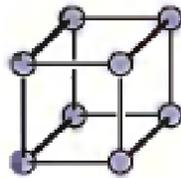
rede cristalina + base = estrutura cristalina



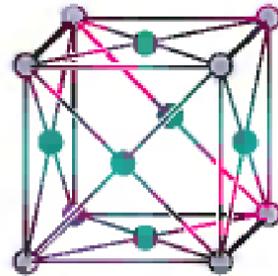
Redes cristalinas mais comuns

42.12 Portions of some common types of crystal lattices.

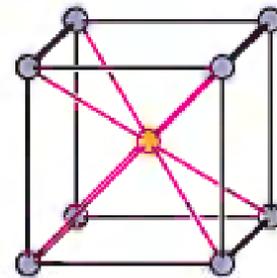
(a) Simple cubic (sc)



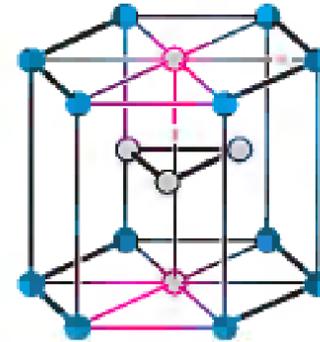
(b) Face-centered cubic (fcc)



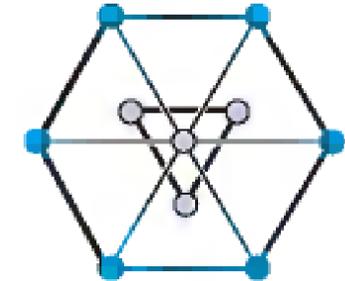
(c) Body-centered cubic (bcc)



(d) Hexagonal close packed (hcp)

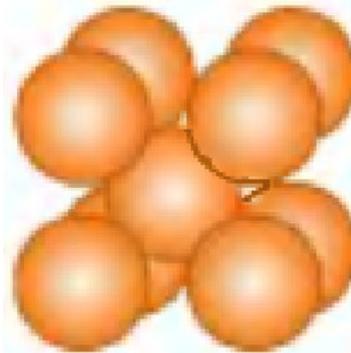


(e) Top view, hexagonal close packed

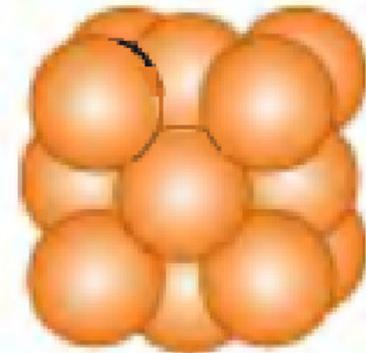


42.13 (a) The bcc *structure* is composed of a bcc *lattice* with a basis of one atom for each lattice point. (b) The fcc *structure* is composed of an fcc *lattice* with a basis of one atom for each lattice point. These structures repeat precisely to make up perfect crystals.

(a) The bcc structure

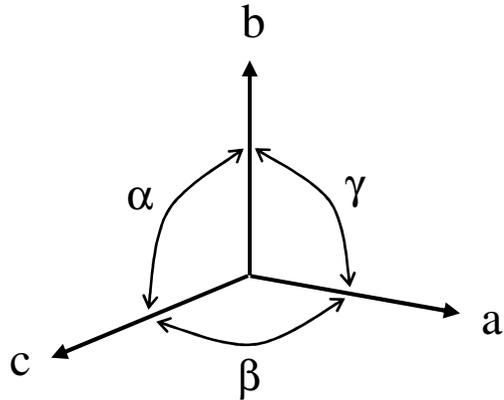


(b) The fcc structure



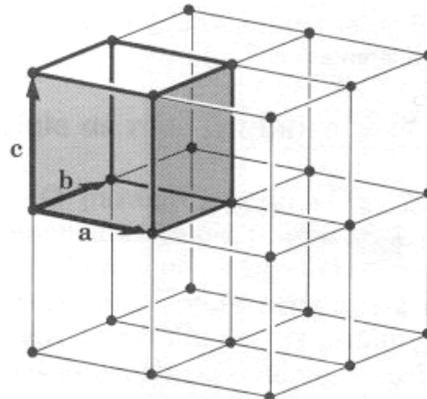
Estruturas cristalinas

Uma estrutura cristalina obtém associando a cada ponto da rede cristalina uma base (um átomo ou um conjunto de átomos)



Os módulos de a , b e c são os parâmetros da rede.

Célula primitiva



$$V_c = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}|$$

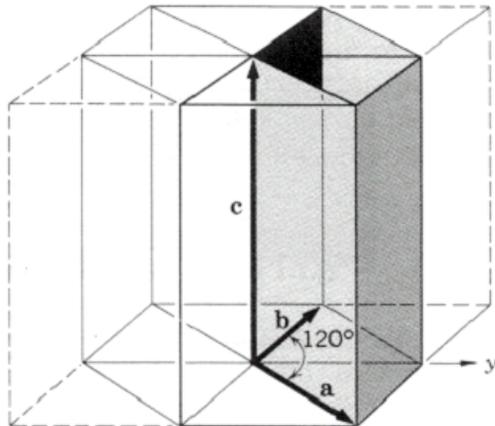
Base: átomo ou conjunto de átomos

A posição do centro do átomo j da base é dada por :

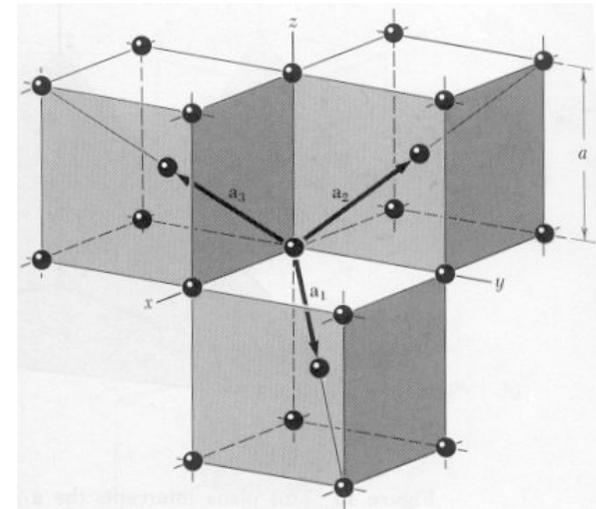
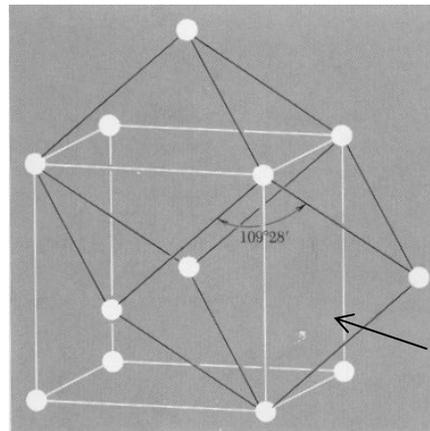
$$\vec{r}_j = x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c},$$

em relação a um ponto da rede, onde $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$.

Célula primitiva hexagonal



Rede cúbica de corpo centrado



Redes cúbica simples

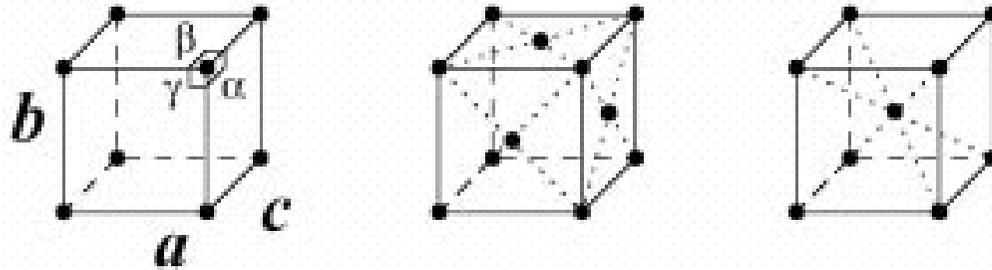


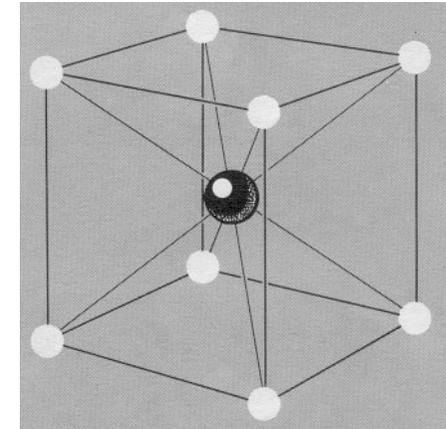
Figura 2.9: Redes cúbicas: simples, de faces centradas, e de corpo centrado.

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

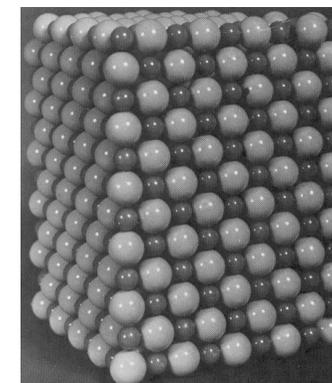
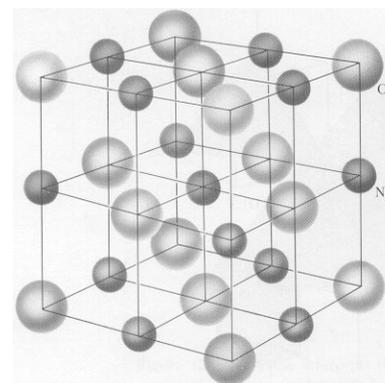
Os metais alcalinos cristalizam todos em redes cúbicas de corpo centrado (ccc). Neste caso a célula unitária tem dois átomos, um num vértice (compartilhado) e outro no centro. O número de coordenação é 8, i.e., cada átomo está rodeado por outros oito átomos.

Elemento	a (nm)	Elemento	a (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	Mn	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.

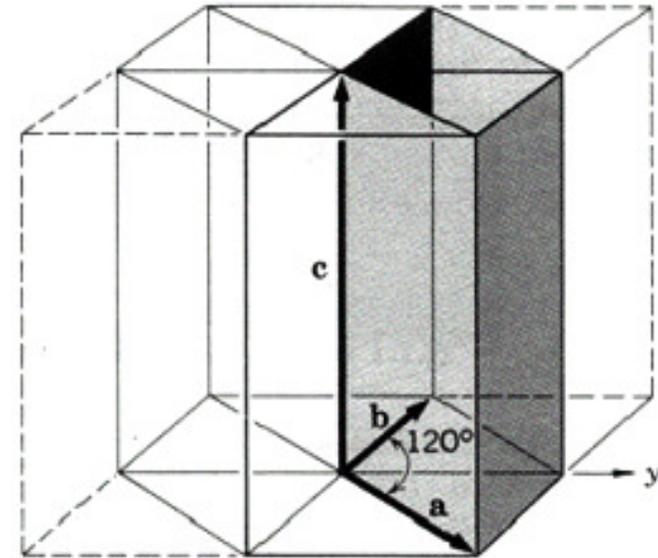
Elemento	a (nm)	Substância	a (nm)
Cu	0,361	NaCl	0,563
Ag	0,408	LiF	0,402
Au	0,407	KCl	0,628
Al	0,404	LiBr	0,549



Redes hexagonais

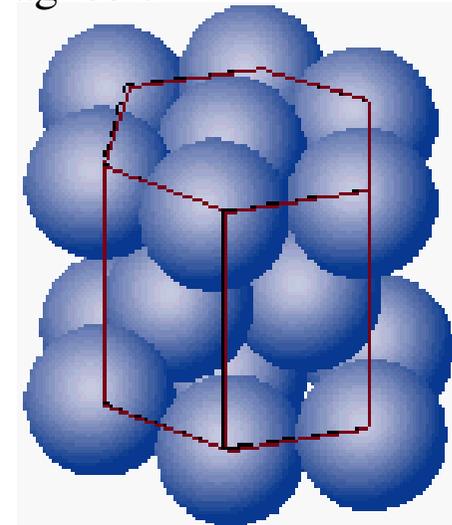
As relações entre os parâmetros de rede, neste tipo de estrutura, são $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=\pi/2$, $\gamma=2\pi/3$.

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.

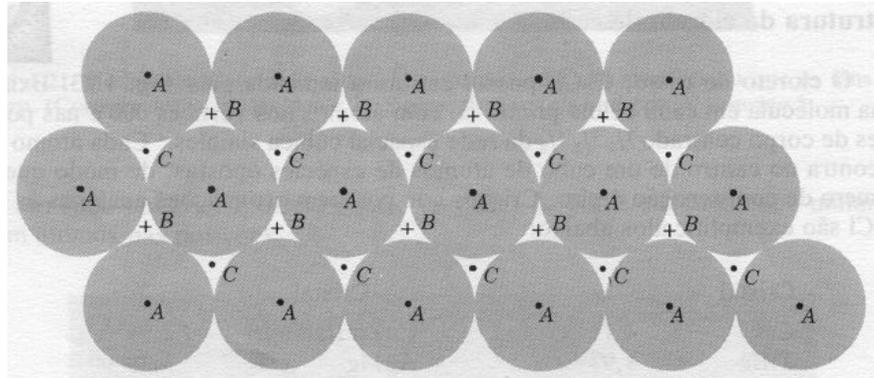


As estruturas hexagonais são caracterizadas pela constante de rede no plano hexagonal a e pela distância entre planos hexagonais c . Numa estrutura hexagonal com agrupamento compacto (hcp) ideal, $c \sim 1,633 a$.

magnésio



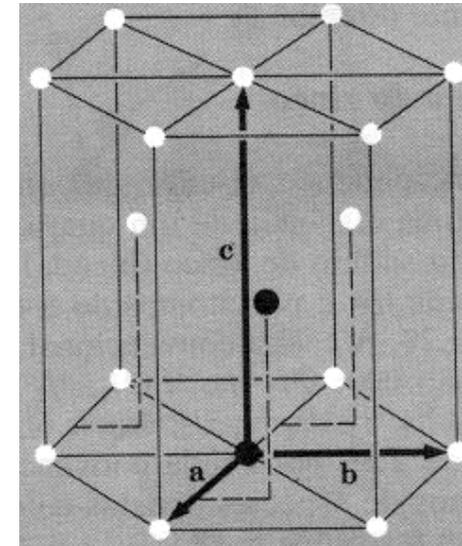
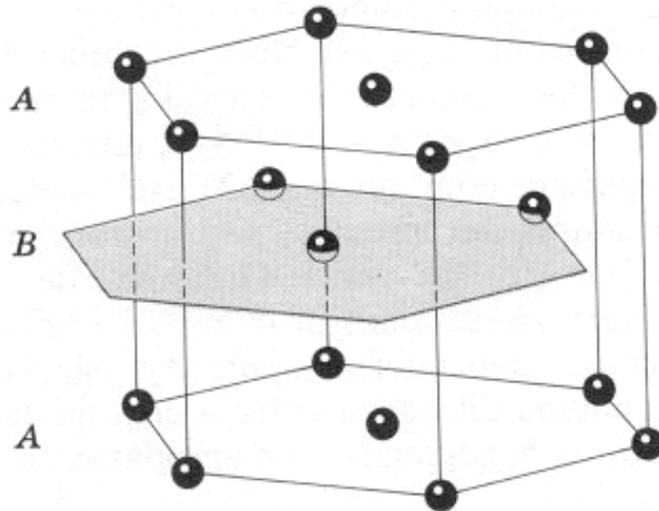
Agrupamentos compactos cúbico e hexagonal



Agrupamento compacto cúbico (fcc):
ABCABC...

Agrupamento compacto hexagonal (hcp):
ABABAB...

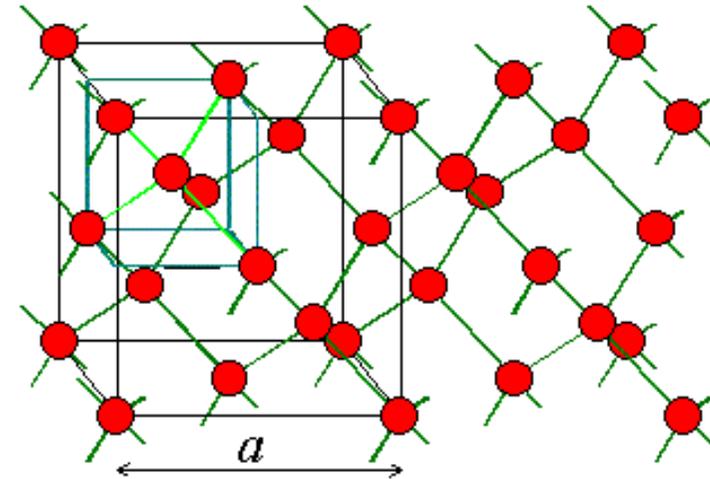
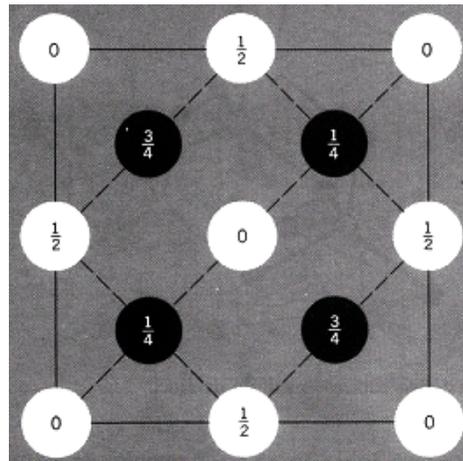
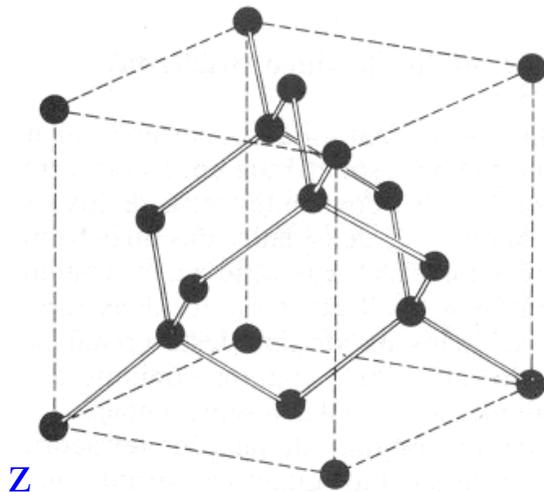
Estrutura hexagonal com agrupamento compacto (hcp)



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.

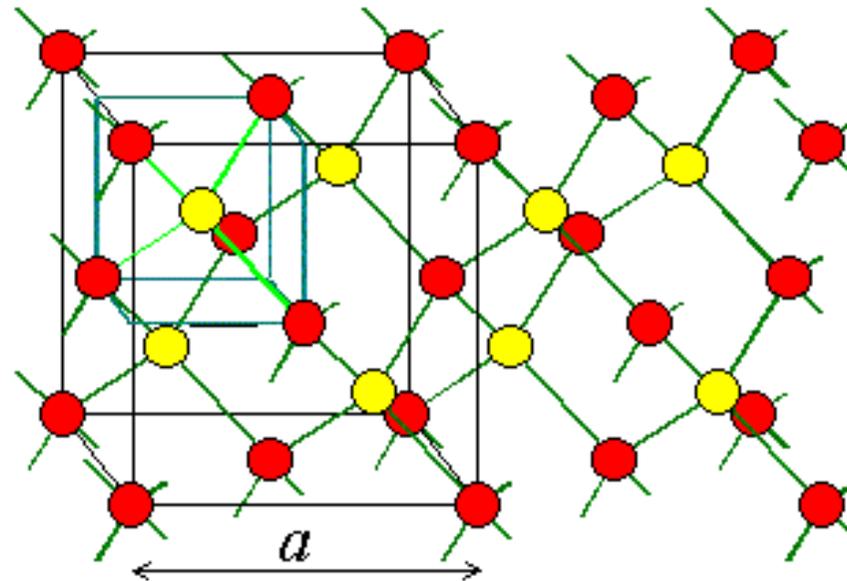
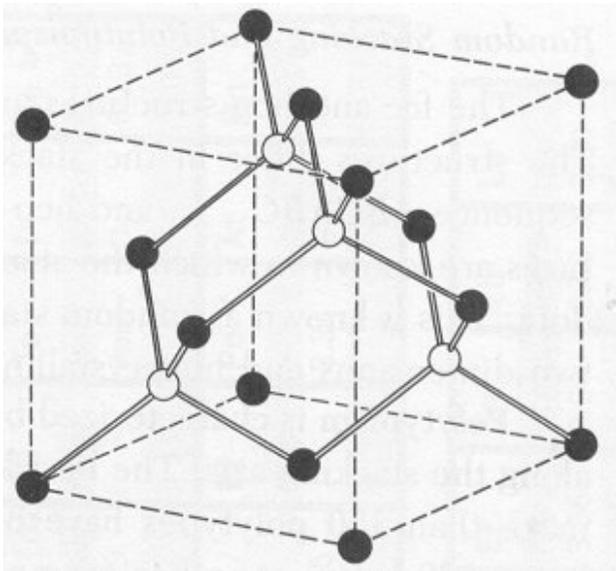
Esta configuração é comum nos cristais semicondutores elementares mais usados (silício e germânio, muito importantes na industria de semicondutores). O Si e o Ge cristalizam na rede cúbica de faces centradas, com valores para o parâmetro de rede a de 0,543 nm e de 0,545 nm, respectivamente.



Estrutura do sulfeto de zinco

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.

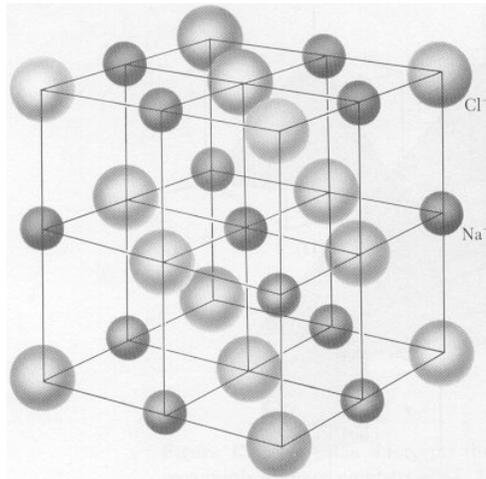
Vários compostos semicondutores como o arsenieto de gálio (GaAs), o *fosfeto* de índio (“indium phosphide”, InP), o arsenieto de índio (InAs), o SiC, o InSb, e o GaSb, apresentam a estrutura do sulfeto de zinco.



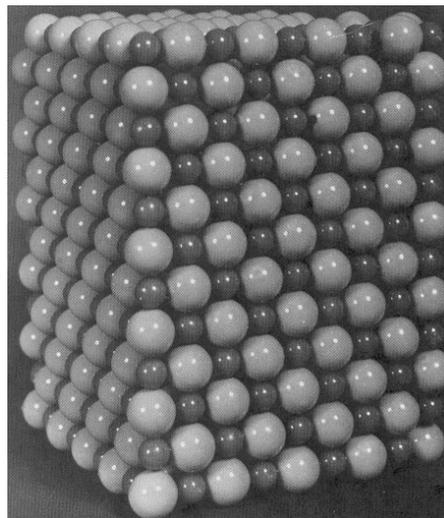
Exemplos de Estruturas Cristalinas

Rede cfc

Cloreto de sódio



Cloreto de sódio



15-09-2009

Rede cfc

Árgon

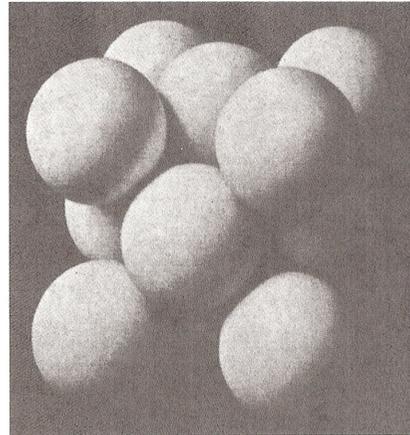
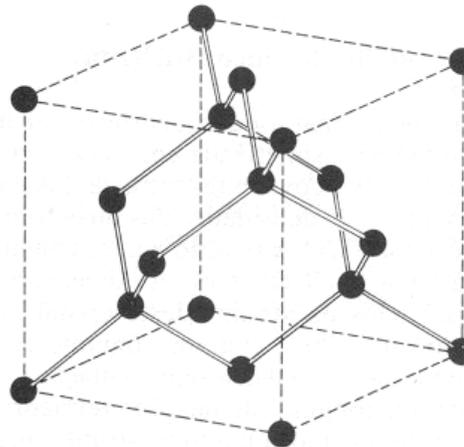


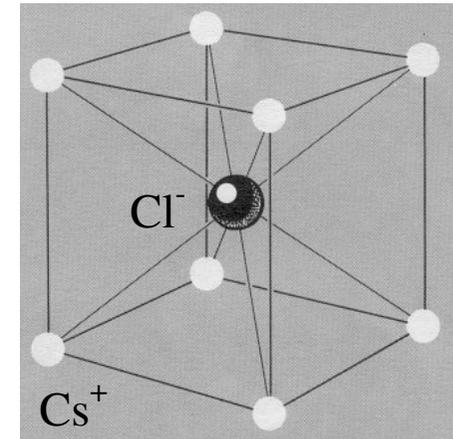
Figure 2 Cubic close-packed (fcc) crystal structure of the inert gases Ne, Ar, Kr, and Xe. The lattice parameters of the cubic cells are 4.46, 5.31, 5.64, and 6.13 Å, respectively, at 4 K.

Diamante, Silício, etc. (cfc)

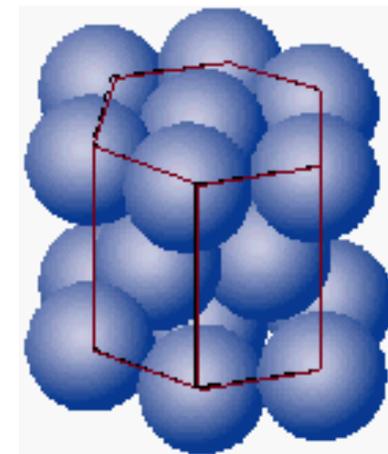


Rede cúbica simples

Cloreto de céσιο (CsCl)



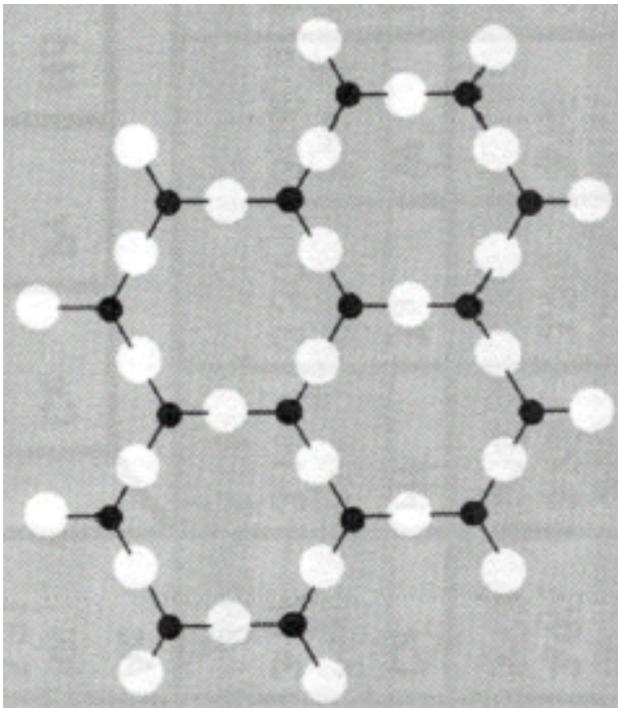
Magnésio (hexagonal)



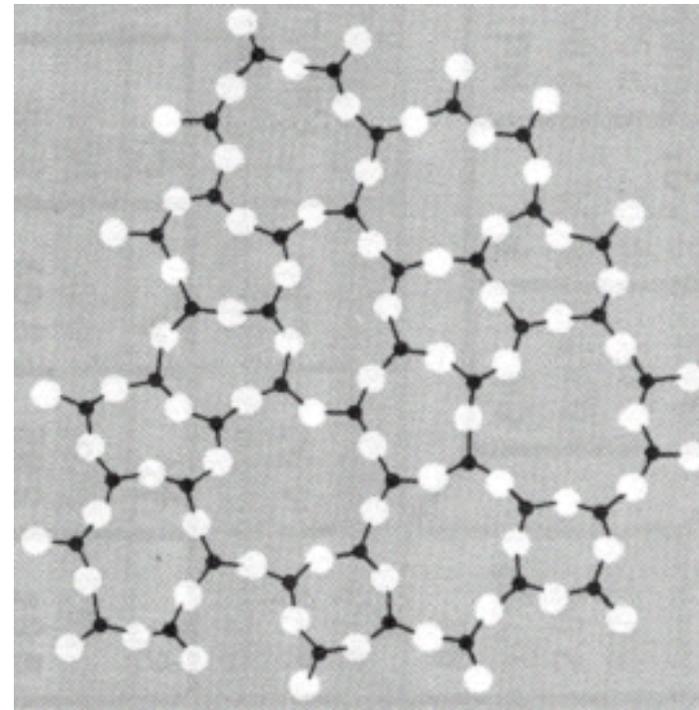
235

Agrupamentos não cristalinos

Estrutura regular de um cristal

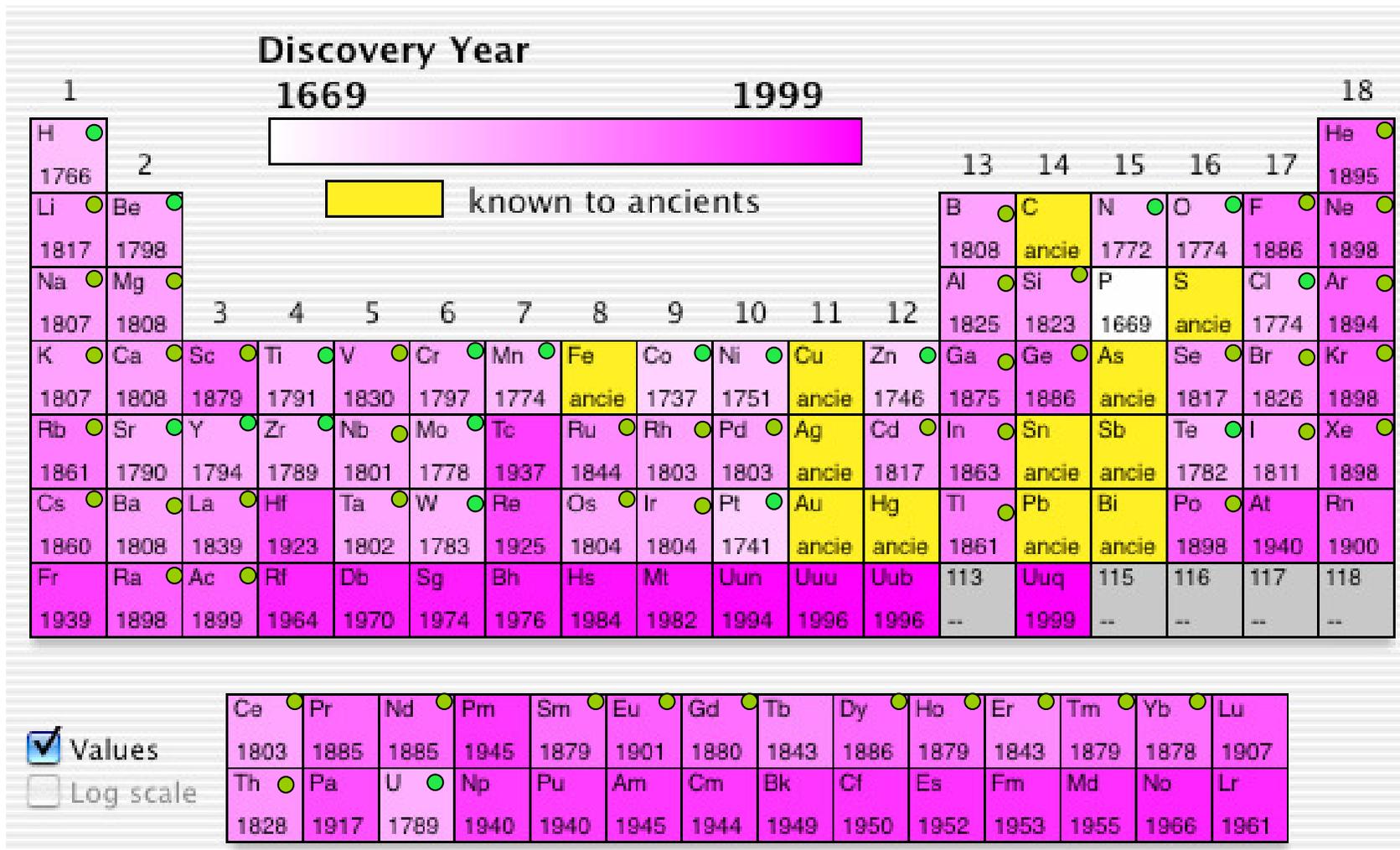


Rede caótica de um vidro



Forças de Interação e Ligações em Cristais

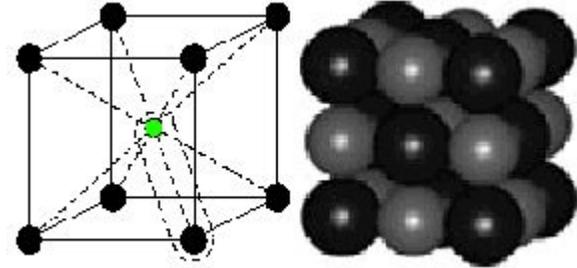
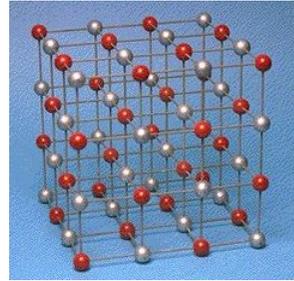
Elementos



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

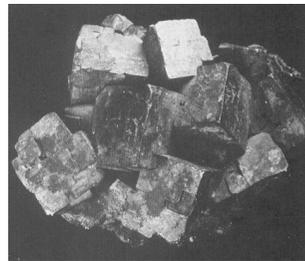
Tipos de Ligação entre átomos

iónica, *cloreto de sódio*

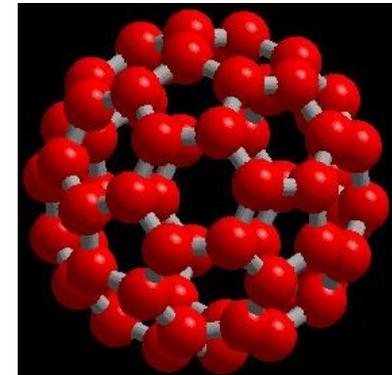
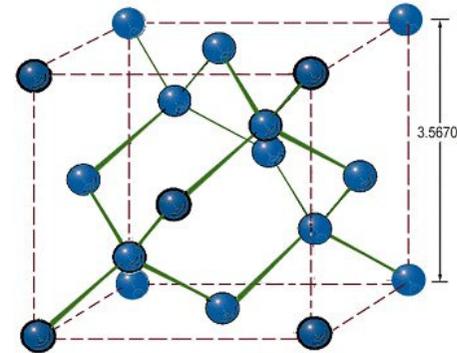


NaCl

metálica, *cobre*



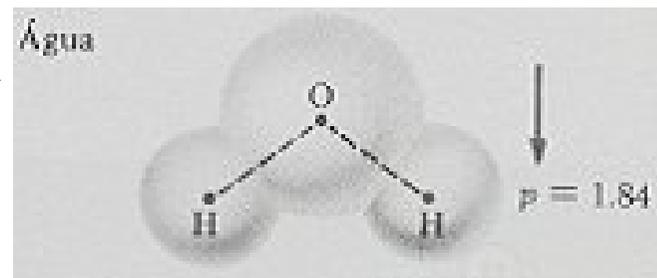
covalente, *diamante*



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



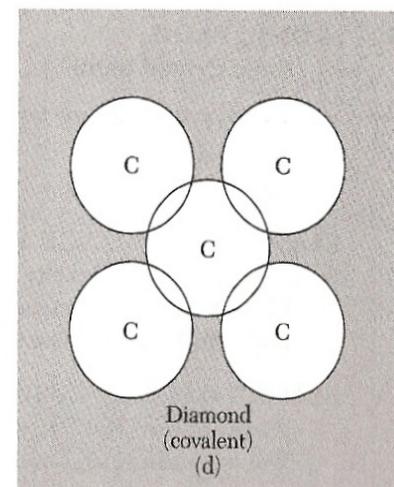
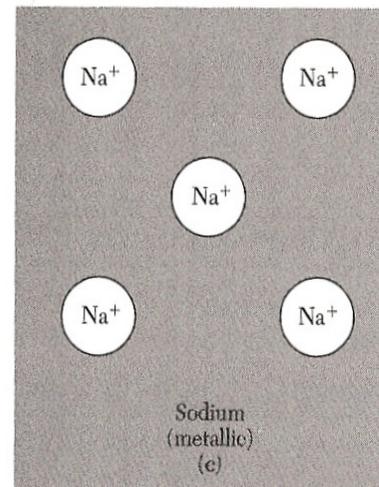
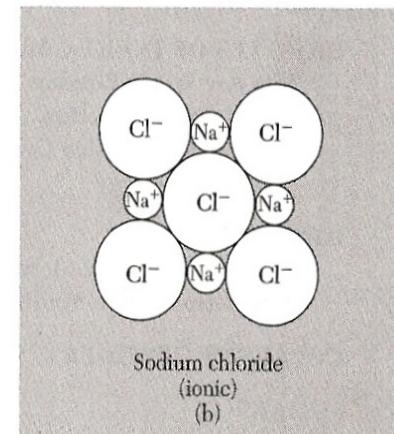
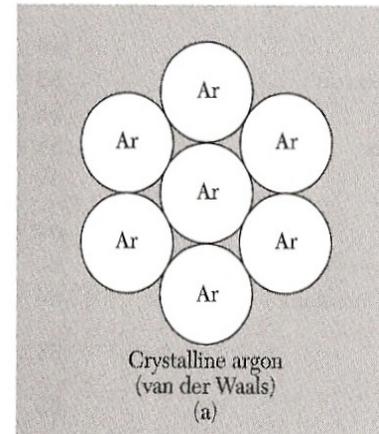
pontes de hidrogénio, *gelo*



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 prótons e neutrões do núcleo atómico;
- O número de prótons 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**



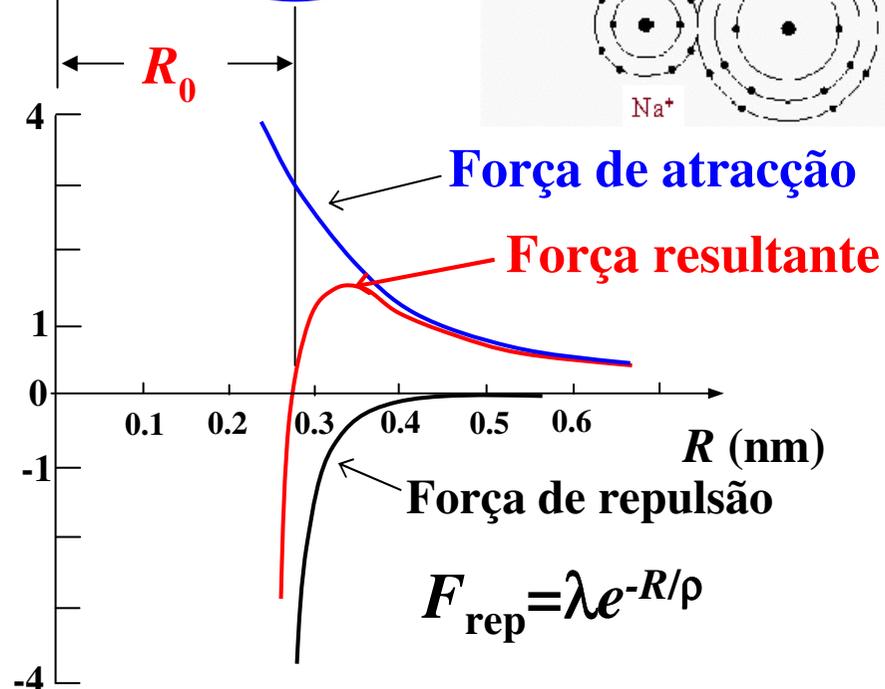
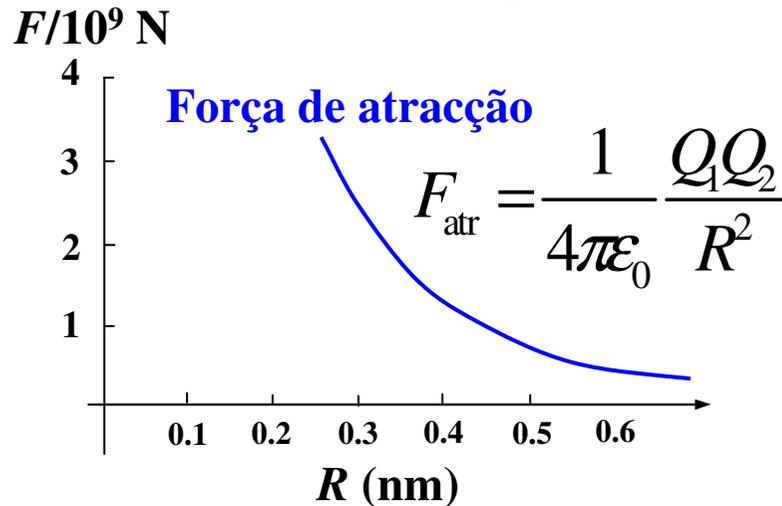
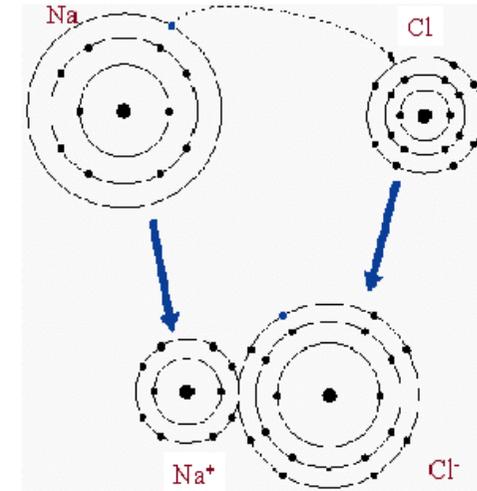
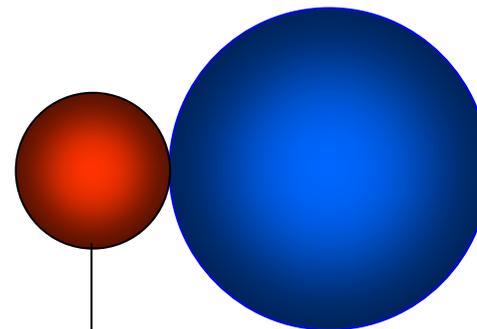
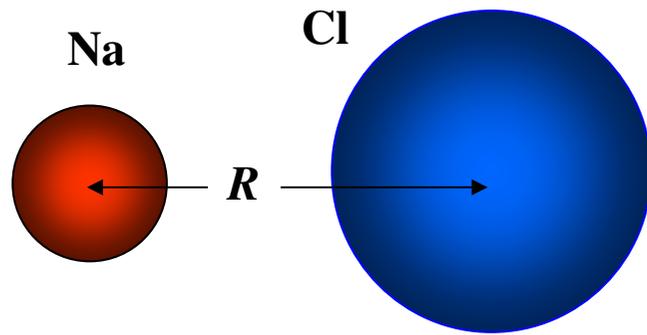
Tipos de Ligações Atômicas

A interacção responsável pela coesão das várias formas de matéria condensada é a **força electrostática** entre os electrões e os núcleos dos elementos. As forças magnéticas desempenham um papel menor na coesão dos sólidos. A força da gravidade não é considerada nesta análise, dada a sua fraca intensidade quando comparada com as outras interacções fundamentais. Foi já demonstrado que a força electromagnética e a força nuclear fraca são duas formas da mesma interacção fundamental **electrofraca**.

As diferentes formas da matéria condensada são consequência das formas diversas como a interacção electrostática se manifesta. Esta variedade resulta das diferenças na distribuição dos electrões das camadas mais externas e na distribuição espacial dos cernes atômicos. A coesão de um sólido pode ser caracterizada comparando a energia total do sólido, cinética + potencial, com a energia do mesmo número de átomos livres (átomos separados infinitamente uns dos outros). Uma substância só é estável se a sua energia total for menor que a energia dos átomos ou moléculas livres. A diferença entre a energia dos átomos livres e a energia total da substância designa-se por **energia de coesão**. Os cristais de gases inertes são as substâncias mais fracamente ligadas. Os cristais de metais alcalinos apresentam energias de coesão significativamente superiores. Os elementos metálicos de transição (colunas centrais da tabela periódica) são os mais fortemente ligados.

Os principais tipos de ligações cristalinas são a **ligação covalente**, **ligação iónica**, **ligação metálica**, **ligação de van der Waals** e **forças de hidrogénio**. Na ligação covalente, os elementos participantes repartem os electrões mais exteriores de forma que há sobreposição das distribuições electrónicas mais exteriores. Na ligação metálica, os electrões de valência do elemento são "libertados" pelos cernes atômicos para formar uma espécie de mar de electrões, no qual os iões positivos se encontram dispersos. Nas ligações iónicas os electrões de valência dos elementos de menor energia de ionização são cedidos aos elementos com maior afinidade electrónica, e as distâncias entre os iões resultantes são mantidas por forças electrostáticas. As ligações van der Waals resultam de flutuações nas distribuições electrónicas de átomos neutros com camadas completamente preenchidas, e estas forças são de fraca intensidade.

Forças Inter-atômicas: exemplo NaCl



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

$$R_0 = R_{\text{Na}} + R_{\text{Cl}} = 98 \text{ pm} + 181 \text{ pm} = 278 \text{ pm}$$

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

Forças Inter-atômicas: exemplo Na₂O

Calcule a força de atração em uma molécula de Na₂O

↪ Neste caso temos Na⁺ (valência 1) e O²⁻ (valência 2)

$$\hookrightarrow F = \frac{KZ_1qZ_2q}{a^2} \quad \text{onde } Z_1 \text{ e } Z_2 \text{ são as valências}$$

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

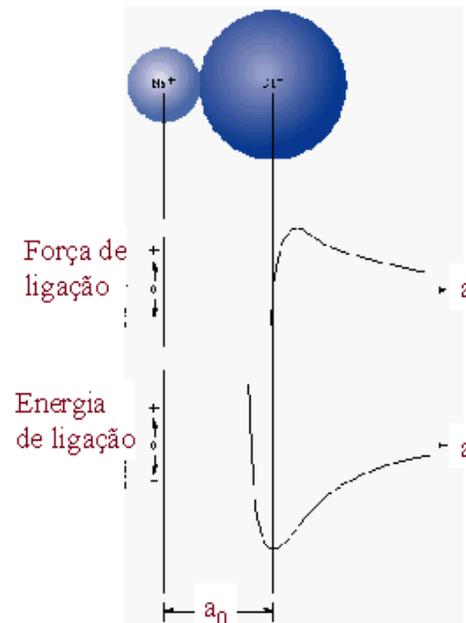
$$F = \frac{(9 \times 10^9 \text{ V.m / C})(1)(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(2)(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})}{(0.231 \times 10^{-9} \text{ m})^2} = 8.64 \times 10^{-9} \text{ N}$$

Na₂O (0,098 nm +0,132 nm=0,231 nm); F=8,64×10⁻⁹ N.

Força e energia de ligação

22

Força e Energia de Ligação



$$F = dE/da$$

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

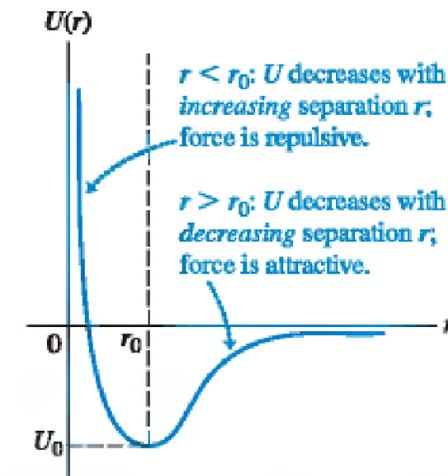
Configuração estável

Valores típicos para a_0 são da ordem de 0.3nm (0.3×10^{-9} 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.



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),

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

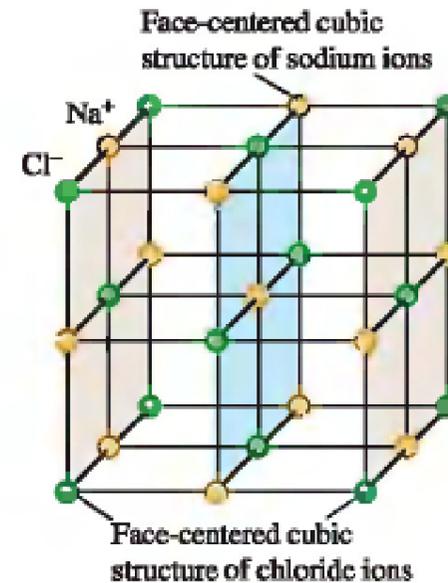
Ligações iónicas

A ligação iónica resulta da interacção electrostática entre iões de cargas opostas. Um exemplo típico de uma substância que resulta de ligações iónicas é o cloreto de sódio (NaCl), o sal das cozinhas. No estado cristalino, cada átomo de sódio cede o electrão de valência ao átomo de cloro vizinho, resultando um cristal iónico contendo iões positivos Na^+ e negativos Cl^- : cada átomo de Na^+ é rodeado por seis iões Cl^- e vice-versa. A análise do par de iões Na^+ e Cl^- permite concluir que existe uma força electrostática atractiva de grandeza $e^2/(4\pi\epsilon_0 R^2)$, entre os pares de iões de carga oposta. Esta força é responsável pela estrutura do NaCl e de cristais iónicos similares como o CsCl.

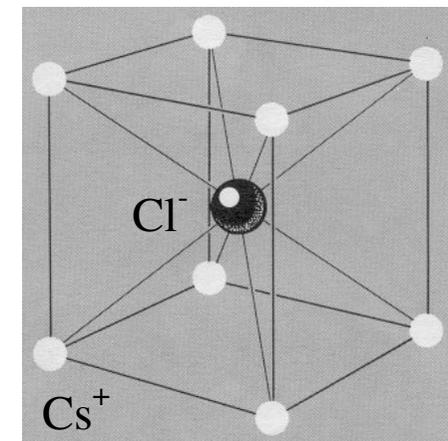
A estrutura resultante da ligação iónica é muito estável, sendo a energia de ligação de um par de átomos da ordem de 5 eV, que resulta da elevada intensidade da força de Coulomb entre os iões. Em geral, os sólidos iónicos apresentam temperaturas de fusão elevadas: cerca de 801 °C no caso do NaCl (comparar com os 97,8 °C do metal Na).

15-09-2009

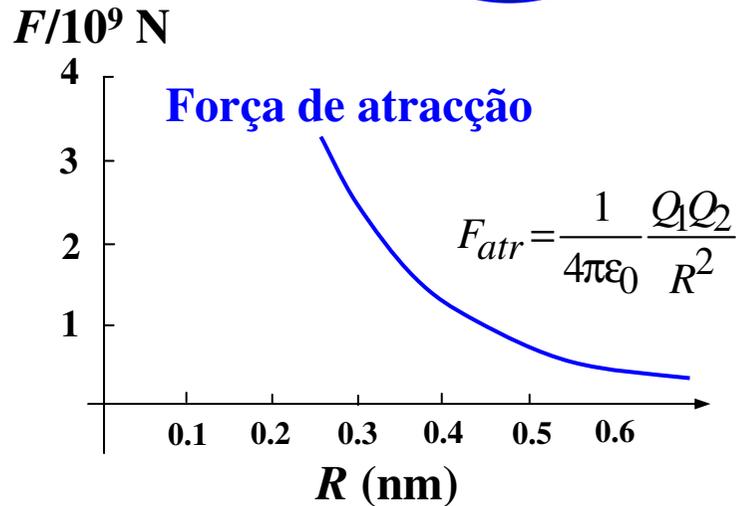
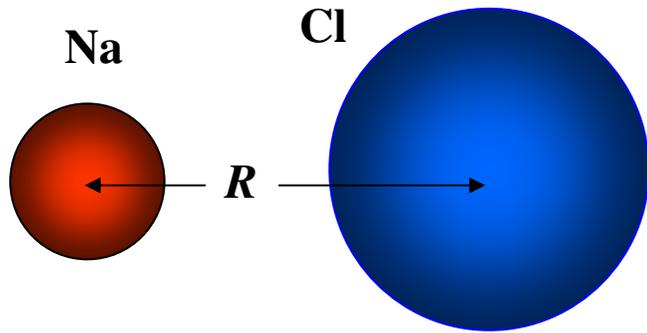
42.14 Representation of part of the sodium chloride crystal structure. The distances between ions are exaggerated.



Cloreto de céσιο (CsCl)

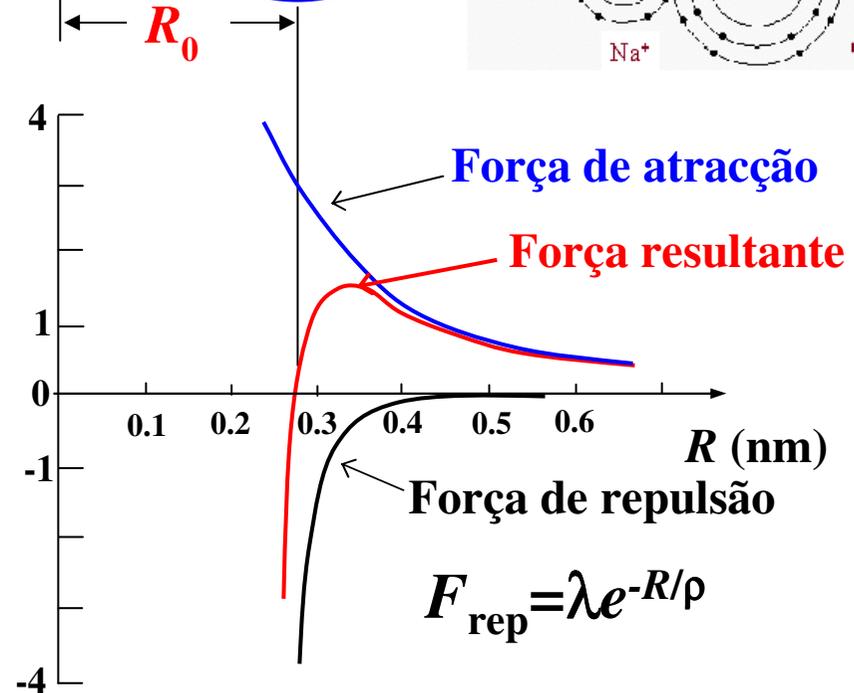
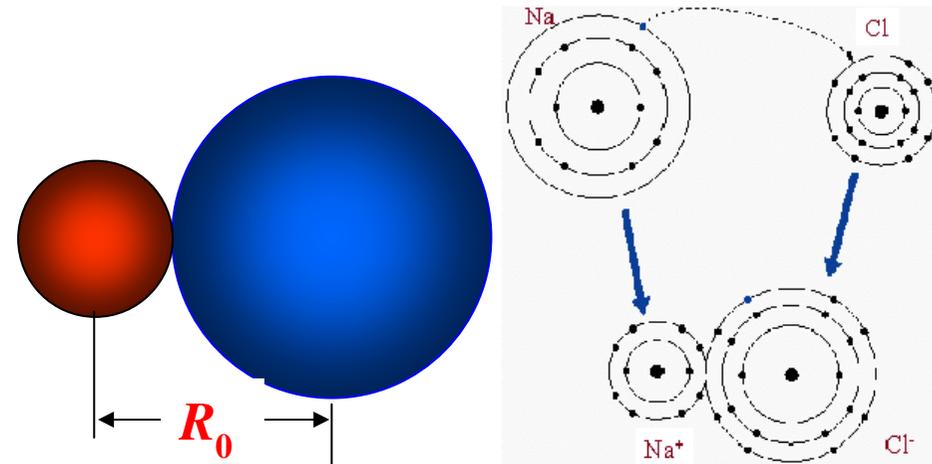


Cristal de NaCl



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

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.

Ligação Iónica

A ligação iónica é bastante comum entre elementos com electronegatividades muito diferentes, como é o caso dos metais alcalinos (electropositivos) e dos halogéneos (electronegativos). As configurações electrónicas para todos os iões de um cristal iónico simples correspondem a camadas electrónicas fechadas (de gás nobre).

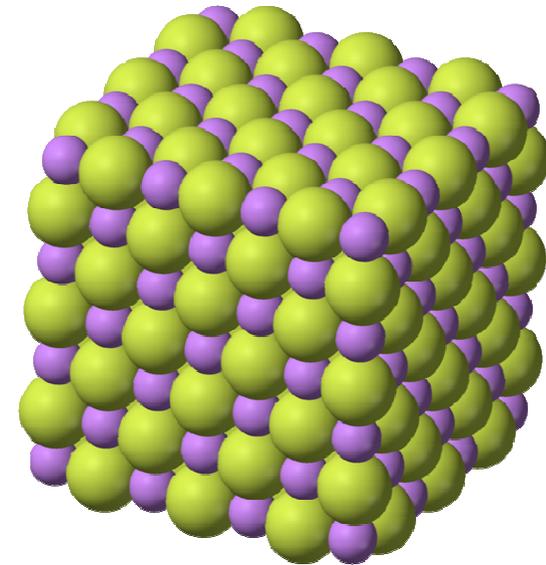
Por exemplo, no fluoreto de lítio a configuração dos átomos neutros é de acordo com a tabela periódica dos elementos: Li $1s^2 2s$ e F $1s^2 2s^2 2p^5$. Os iões Li^+ $1s^2$ e F^- $1s^2 2s^2 2p^6$, como no caso do hélio e do néon, respectivamente. As distribuições de carga de cada ião de um cristal iónico têm aproximadamente simetria esférica, com alguma distorção próxima da região de contacto entre átomos vizinhos.

Esta configuração é confirmada por estudos de raios x das distribuições electrónicas.

A ligação iónica não é direccional.

Para se formar um material 3D cada ião tem de estar rodeado por iões de polaridade oposta. A interacção de longo alcance entre iões com cargas $\pm q$ é dada pela interacção electrostática $\pm q^2/(4\pi\epsilon_0 R)$, que é atractiva entre iões de cargas opostas e repulsiva entre iões de mesma carga. A energia de coesão da estrutura cristalina é dada pela soma algébrica das contribuições de todos os iões da rede. As interacções repulsivas entre iões com configurações iguais às dos elementos nobres são semelhantes às existentes entre os átomos dos gases inertes (ver adiante).

Fluoreto de lítio (LiF)



Energia electrostática ou energia de Madelung

A interacção de longo alcance entre iões com cargas $\pm q$ é dada pela interacção electrostática $\pm q^2/(4\pi\epsilon_0 R)$, que é atractiva entre iões de cargas opostas e repulsiva entre iões de mesma carga. As interacções repulsivas entre iões com configurações iguais às dos elementos nobres são semelhantes às existentes entre os átomos dos gases inertes. A parte devida à interacção de van der Waals (ver adiante) em cristais iónicos produz uma contribuição relativamente pequena para a energia de coesão de cristais iónicos, inferior a 2%. **A principal contribuição para a energia de ligação da rede cristalina em cristais iónicos é dada pela interacção electrostática e denomina-se energia de Madelung.**

Se U_{ij} for a energia de interacção entre os iões i e j , a energia de interacção envolvendo o ião i é: $U_i = \sum_j U_{ij}$, onde a soma inclui todos os iões, excepto $j=i$. Pode-se escrever U_{ij} como a soma de um potencial repulsivo central da forma $U_{\text{rep}} = \lambda e^{-R/\rho}$, onde λ (está relacionado com a intensidade da interacção) e ρ (está associado ao alcance da interacção) são parâmetros empíricos, com um potencial coulombiano $\pm q^2/(4\pi\epsilon_0 R)$: $U_{ij} = \lambda e^{-R_{ij}/\rho} \pm q^2/(4\pi\epsilon_0 R_{ij})$.

O termo repulsivo indica a resistência do ião à sobreposição da sua distribuição com as distribuições electrónicas dos iões vizinhos. A forma do potencial repulsivo usado adoptada produz melhores resultados nos cristais iónicos do que a interacção do tipo R^{-12} . Se se desprezarem os efeitos de superfície, pode-se escrever a energia total do cristal composto N moléculas ou $2N$ iões como: $U_{\text{tot}} = NU_i$.

Energia electrostática ou energia de Madelung (2)

A energia total de uma rede é a energia necessária para separar os iões da rede até uma distância infinita.

A energia total de uma rede cristalina contendo $2N$ iões na configuração de equilíbrio, $R=R_0$, é dada por:

$$U_{tot} = -N\alpha \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

O primeiro termo do produto é a **energia de Madelung**. Para que a interacção repulsiva seja de muito curto alcance $\rho \sim 0,1R_0$.

A constante de Madelung para o NaCl é 1,747565; para o CsCl é 1,762675; para o sulfeto de zinco cúbico (blenda) é 1,6381.

Existem mais cristais iónicos com a estrutura do NaCl do que com a estrutura do CsCl, porém, as diferenças de energias de ligação são pequenas. Para se determinar a estrutura mais estável é necessário considerar as contribuições de ordem superior para a energia.

Os valores calculados para a energia de ligação da rede cristalina concordam de modo excelente com os valores observados.

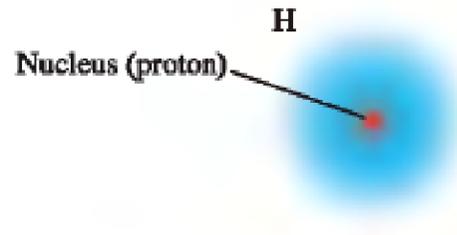
NaCl; $R_0=0,2820$ nm, $z\lambda=1,05 \times 10^{-15}$ J, $\rho=0,0321$ nm, $E_{lig}=765$ (748) kJ/mol;

NaBr; $R_0=0,2989$ nm, $z\lambda=1,33 \times 10^{-15}$ J, $\rho=0,0328$ nm, $E_{lig}=727$ (709) kJ/mol.

Ligação Covalente

42.2 Covalent bond in a hydrogen molecule.

(a) Separate hydrogen atoms

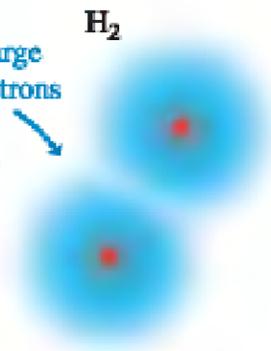


Individual H atoms are usually widely separated and do not interact.

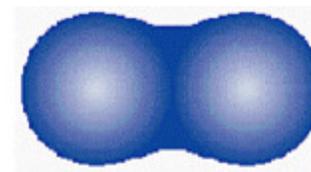
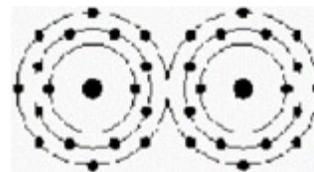
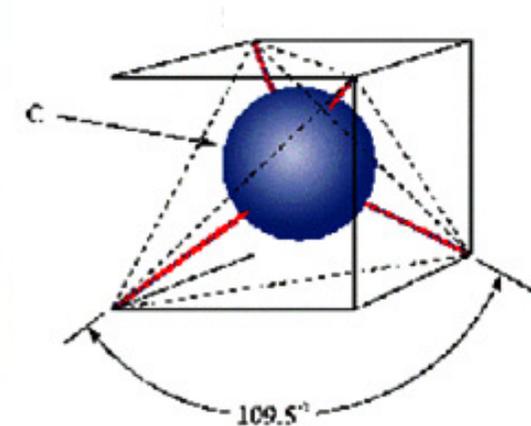
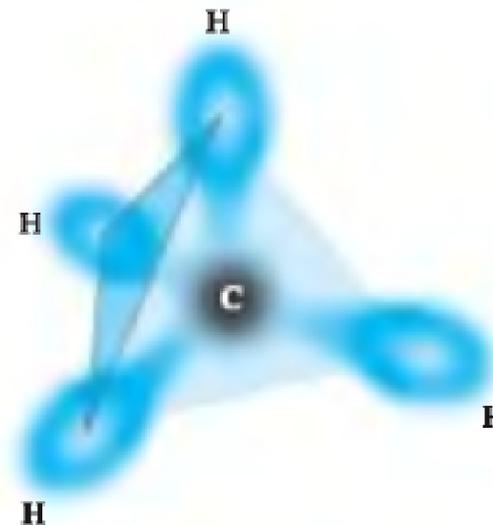
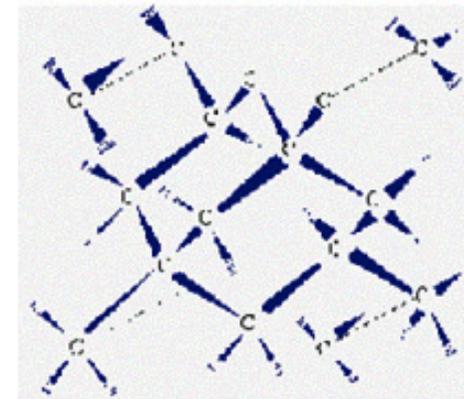


(b) H₂ molecule

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 (CH₄) 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.



Cl-Cl

Ligação Covalente (1)

A ligação covalente é particularmente comum entre elementos do grupo IV-A (14) da tabela periódica. Por exemplo, o diamante é formado por átomos de carbono numa estrutura cúbica, em que cada átomo está rodeado por quatro, formando um tetraedro regular. No diamante, cada átomo de carbono mantém os seus electrões, não havendo formação de iões. Isto é comum no caso de estruturas de átomos idênticos. 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. Este tipo de ligação, em que não há cedência definitiva de electrões, é muito comum em compostos orgânicos e designa-se por **ligação covalente**. Na Química Clássica, em particular na Química Orgânica, a ligação covalente designa-se **par electrónico** ou **ligação homopolar**. 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 forte, como comprova a dureza e o elevado ponto de fusão do diamante. O valor típico da energia de ligação entre dois átomos de carbono é $\sim 7\text{ eV}$ por ligação, em relação aos átomos neutros separados. Esta energia é da mesma ordem de grandeza da energia de ligação entre dois iões num cristal iónico. Contudo, a ligação covalente existe entre átomos neutros.

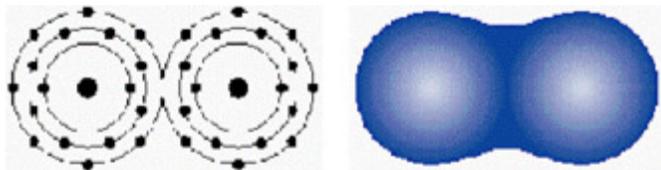
A ligação covalente apresenta **elevada direccionalidade** e forma ângulos bem definidos. Na estrutura cristalina do diamante, as ligações com átomos vizinhos, formam um tetraedro regular. A separação entre átomos é 154 pm e o comprimento da aresta do tetraedro é $0,3567\text{ nm}$. É importante referir que este arranjo corresponde a uma fracção de preenchimento de apenas $0,34$ (muito inferior aos $0,74$ da estrutura cfc ou hc). Esta ligação tetraédrica permite apenas a existência de quatro vizinhos mais próximos, enquanto que, por exemplo, a estrutura cfc possui 12 vizinhos.

A ligação covalente é, normalmente, formada por dois electrões, um de cada átomo participante na ligação. Os electrões que “participam” na ligação tendem a ficar parcialmente localizados na região entre os átomos envolvidos na ligação. Os spins dos dois electrões da ligação são anti-paralelos.

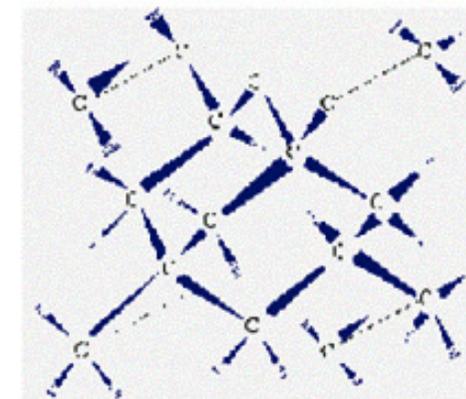
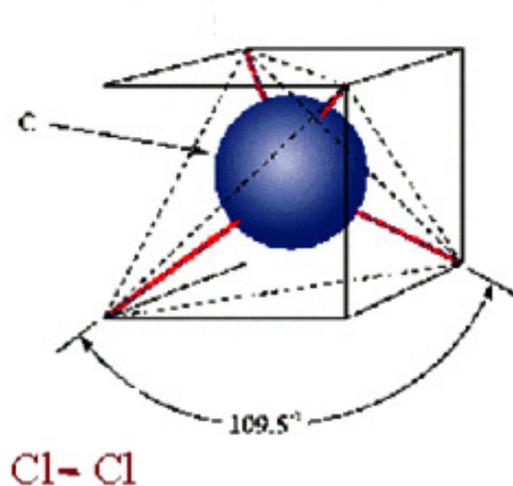
Ligação Covalente (2)

Como as camadas de valência dos elementos que participam em ligações covalente não estão completas, a sobreposição de electrões é, em geral, estabelecida sem que haja excitação dos electrões para níveis de energia mais elevados. Quanto mais próxima estiver a configuração de um dado elemento da de um gás nobre, maior será a interacção de repulsiva. Para além do carbono que apresenta uma configuração electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$, também no caso do Si, do Ge, do Sn, etc., são necessários quatro electrões para obter a configuração de um gás raro. Estes elementos formam cristais por ligações covalentes semelhante à do diamante, i.e., a interacção entre os átomos do elemento possui natureza atractiva associada à sobreposição de cargas. O carbono é muito importante na biologia, enquanto que o silício é de grande relevância tecnológica dado que é um semiconductor muito usado em electrónica.

Em geral, os cristais formados por ligações covalentes são duros, quebradiços e muito difíceis de moldar. Tal resulta das características das forças inter-atómicas que originam ligações com direcções bem definidas, o que justifica a elevada resistência do cristal a alterações. Um modelo mais completo da ligação covalente é obtido através da Mecânica Quântica, considerando a *hibridização* sp^3 . Estudos de Mecânica Quântica, indicam que a formação de ligações tetraédricas no diamante exige que a configuração electrónica do carbono evolua do estado fundamental $1s^2 2s^2 2p^2$ para o estado excitado $1s^2 2s^1 2p^3$, o que requer uma energia de 4 eV. Esta energia é recuperada quando se estabelece a ligação tetraédrica. **As energias de ligação podem atingir valores da ordem de centenas de kJ/mol.**



15-09-2009



Ligações covalentes: carbono e sílicio

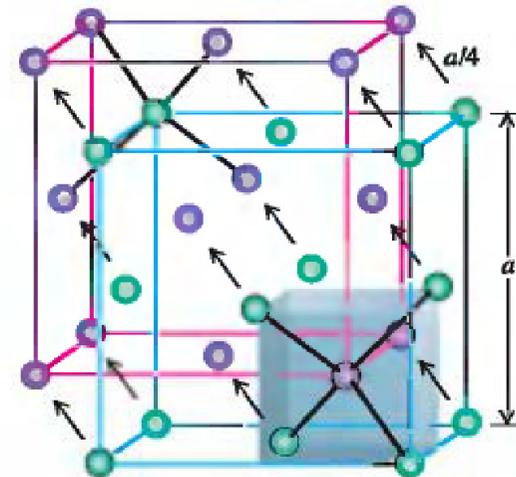
O diamante é formado por átomos de carbono numa estrutura cúbica, em que cada átomo está rodeado por quatro, formando um tetraedro regular, onde cada átomo de carbono mantém os seus electrões, não havendo formação de iões. Os quatro electrões de valência do carbono são usados para formar ligações com 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 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.

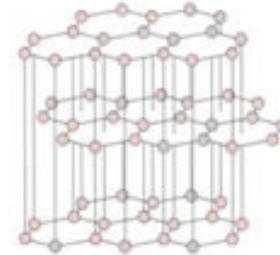
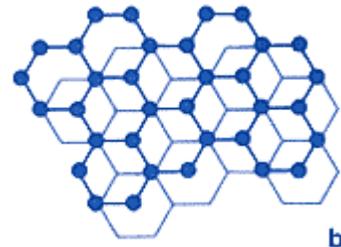
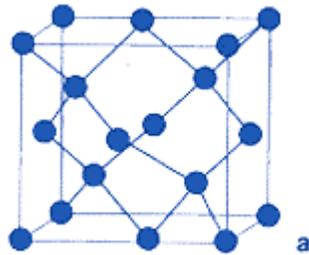


15-09-2009

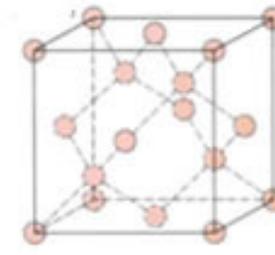
42.16 The diamond structure, shown as two interpenetrating face-centered cubic structures with distances between atoms exaggerated. Relative to the corresponding green atom, each purple atom is shifted up, back, and to the left by a distance $a/4$.



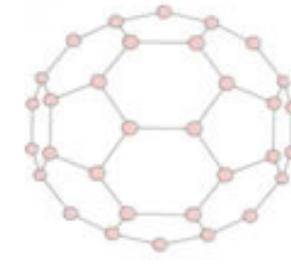
Formas alotrópicas de carbono mais comuns



Grafite



Diamante

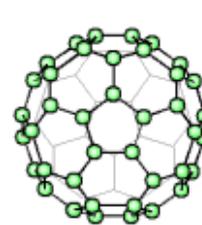
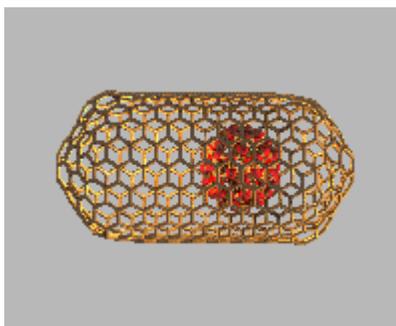
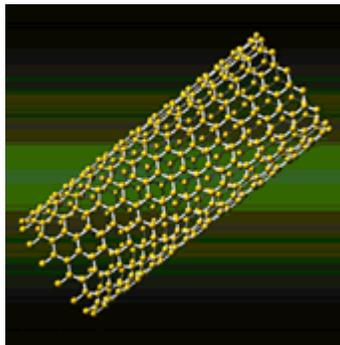


Fulereno

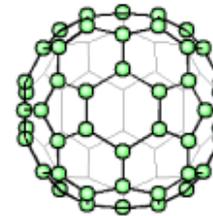
Nanotubos de carbono

Nanotubos de carbono e fulerenos

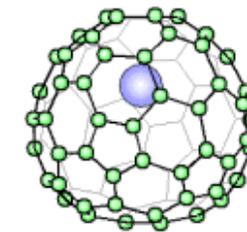
Os fulerenos são a terceira forma mais estável do carbono, após o diamante e a grafite.



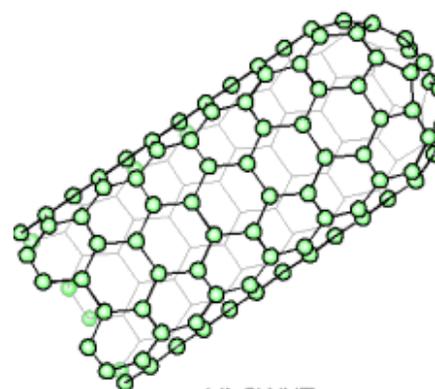
(a) C₆₀



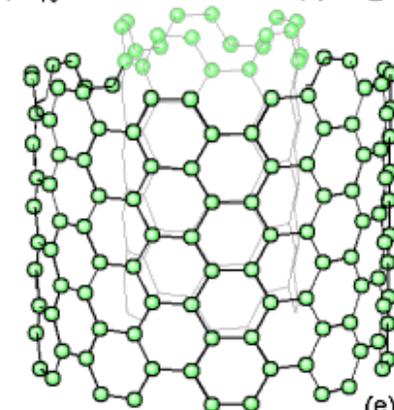
(b) C₇₀



(c) La@C₈₂



(d) SWNT



(e) MWNT

Oito formas alotrópicas do carbono

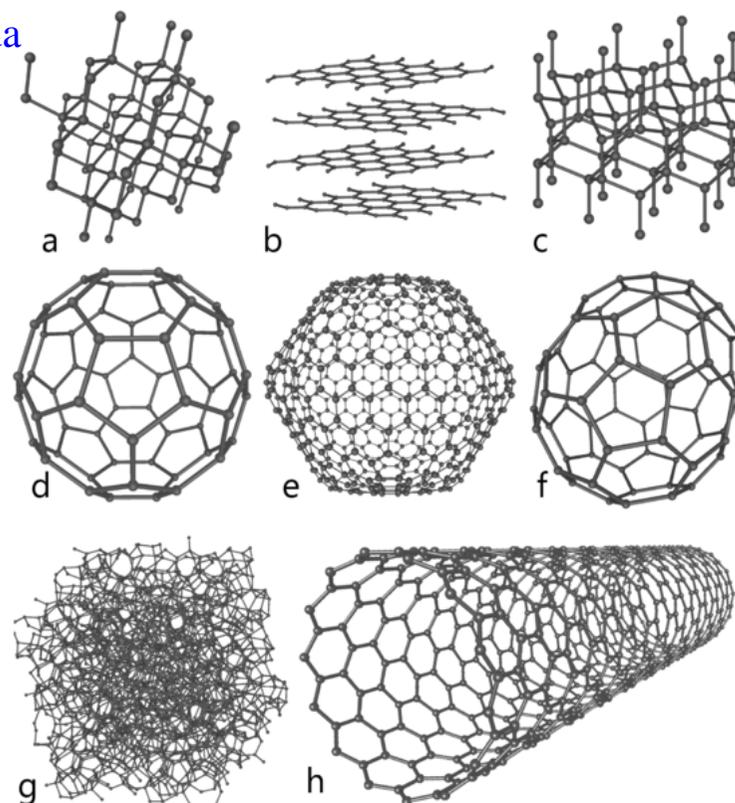
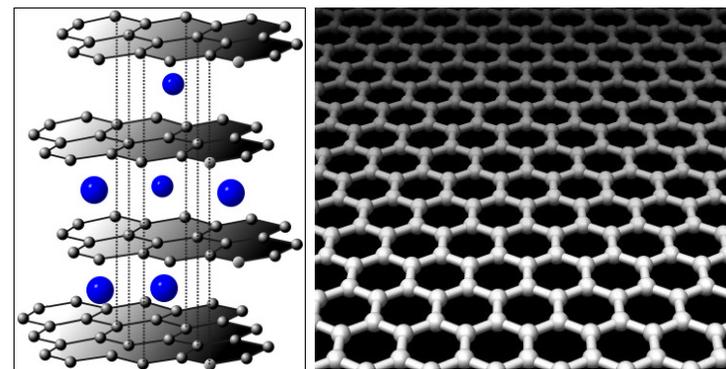
O grafeno é um material encontrado na grafite e em outros compostos de carbono. Bastante abundante e de estrutura significativamente estável e resistente, ele pode ser a chave para a produção de transístores de apenas 0.01 micrómetros, indo além do limite teórico de 0.02 micrómetros, onde os transístores 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)



Ligações de van der Waals (1)

Os gases nobres formam os cristais mais simples. A distribuição electrónica dos átomos individuais constituintes destes cristais são muito próximas das distribuições dos átomos livres. Relembrar que as camadas electrónicas externas destes elementos estão completamente preenchidas, e as distribuições de carga dos átomos livres têm simetria esférica. A energia de ionização destes elementos são as mais elevadas dos elementos pertencentes aos mesmos períodos da tabela periódica.

Os cristais de gases inertes apresentam temperaturas de fusão inferiores a 161 K, energias de coesão inferiores a 0.2 eV, e são transparentes e isolantes. Com a excepção do ^3He e do ^4He , os átomos destes elementos formam cristais com a estrutura de empacotamento máximo do tipo **cfc**.

Os isótopos de hélio ^3He e do ^4He não solidificam à pressão zero, mesmo a zero kelvin. A energia cinética dos átomos no zero absoluto é um efeito quântico que desempenha um papel determinante nas propriedades destes dois isótopos do hélio. As flutuações médias nas posições destes átomos, no zero absoluto são da ordem de 30 a 40% da distância média entre vizinhos mais próximos. Quanto maior a massa atómica menor é a importância do efeito quântico associado à energia no ponto zero. Os valores observados para o volume molar são $27,5 \text{ cm}^3\text{mol}^{-1}$ e $36,8 \text{ cm}^3\text{mol}^{-1}$ para o ^3He e para o ^4He líquidos, respectivamente.

Ligações de van der Waals (2)

Sejam dois átomos idênticos de gases nobres separados por uma distância R muito maior que os raios atômicos dos átomos. Se a distribuição de cargas simétrica dos átomos for rígida, a interacção entre estes elementos será nula, porque o potencial electrostático de uma distribuição esférica de electrões é anulada, para distâncias superiores ao raio atómico, pela contribuição da distribuição de cargas positivas do núcleo.

Nesta situação os átomos dos elementos inertes não podem formar agregados.

Contudo, os átomos podem induzir momentos dipolares uns nos outros e estes momentos dipolares induzidos provocam uma interacção do tipo atractivo entre os átomos.

Representado dois átomos de gases nobre por dois osciladores harmónicos lineares idênticos, separados de uma distância R , pode-se mostrar que a energia de interacção entre os dois átomos é dada por:

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

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.

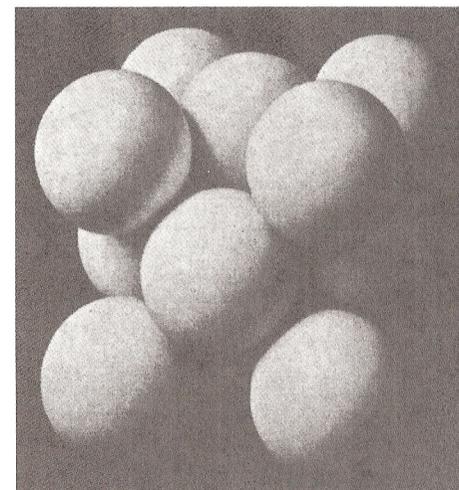
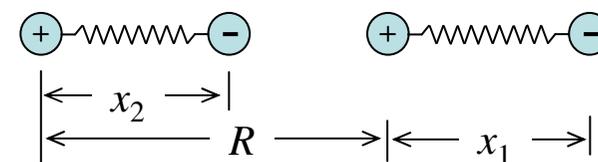


Figure 2 Cubic close-packed (fcc) crystal structure of the inert gases Ne, Ar, Kr, and Xe. The lattice parameters of the cubic cells are 4.46, 5.31, 5.64, and 6.13 Å, respectively, at 4 K.



Ligações de van der Waals (3)

À medida que dois átomos se aproximam, as suas distribuições de carga começam a sobrepor-se, fazendo variar a energia electrónica do sistema. Para distâncias suficientemente próximas, a energia da sobreposição torna-se repulsiva devido, em grande parte, ao princípio de **exclusão de Pauli**. O princípio de exclusão de Pauli impossibilita a ocupação simultânea de um mesmo estado quântico por dois electrões. Só pode ocorrer sobreposição das distribuições electrónicas correspondentes a uma mesma camada se esta for acompanhada pela promoção de electrões para estados de energia superiores e ainda não ocupados. Assim, a sobreposição de electrões com os mesmos números quânticos provoca um aumento da energia do sistema. Como consequência surge uma componente repulsiva na interacção.

Pode-se, após algum cálculo avançado, determinar a natureza quantitativa da interacção repulsiva. Contudo, os resultados experimentais têm sido razoavelmente explicados usando um potencial repulsivo da forma B/R^{12} , onde B é uma constante positiva quando usada conjuntamente com um potencial atractivo de longo alcance da forma $-A/R^6$.

É comum escrever-se a energia potencial de dois átomos separados de uma distância R na forma:

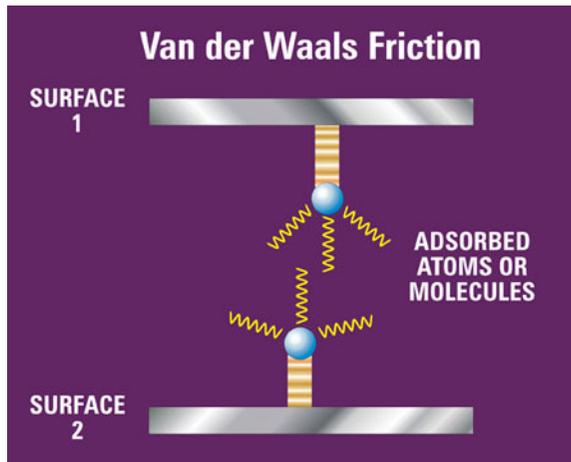
$$U(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \text{ onde } 4\varepsilon\sigma^6 \equiv A \text{ e } 4\varepsilon\sigma^{12} \equiv B$$

Este potencial é designado por potencial de Lennard-Jones. A força entre dois átomos é dada por:

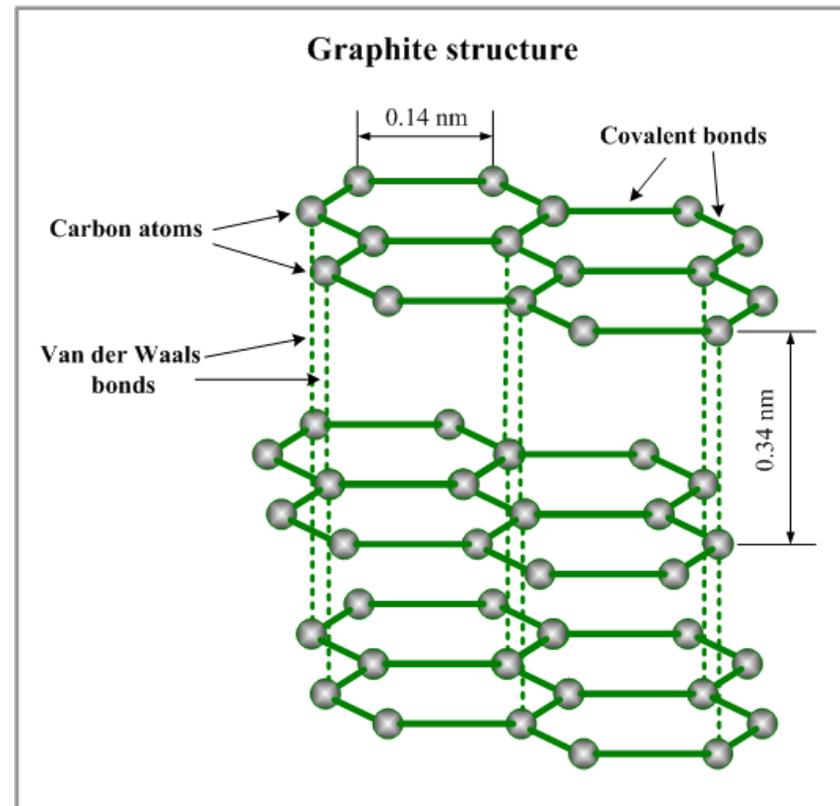
$$F = -dU/dR.$$

A distância R_0 de equilíbrio corresponde à configuração de energia mínima. Obtém-se a partir da expressão: $dU/dR=0$. Para o caso da expressão do potencial Lennard-Jones, resulta: $R_0 \cong 1,12\sigma$, com $U_{\min} = -\varepsilon$. Este valor será o mesmo para todos os elementos com estrutura cfc.

Ligações de van der Waals (4)



15-09-2009



259

Ligação de Hidrogénio

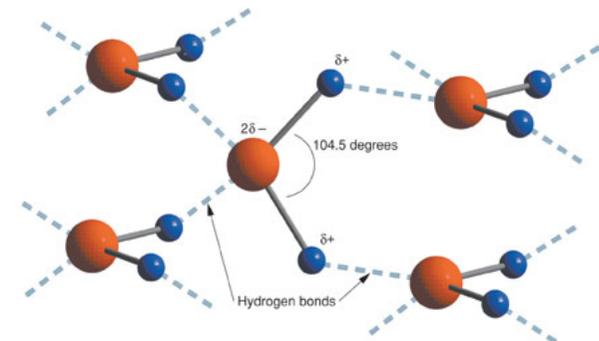
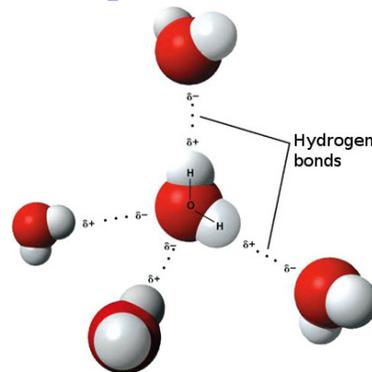
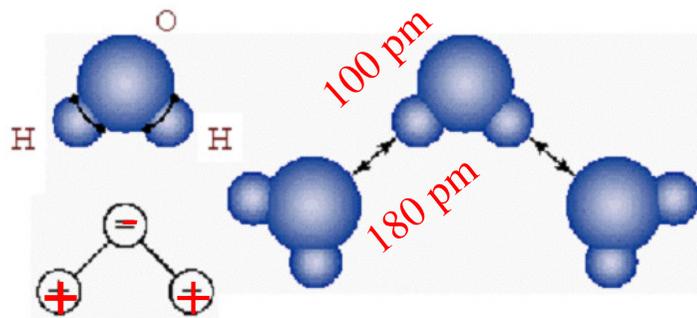
Além dos três tipos de ligação, ditas primárias (iónica, covalente e metálica), há ligações mais fracas que, contudo, permitem, muitas vezes, explicar as propriedades de várias substâncias, como por exemplo, o cristal de gelo ($\text{H}_2\text{O}_{(g)}$). A molécula de água é formada por dois átomos de hidrogénio e um átomo de oxigénio. As ligações entre o oxigénio e o hidrogénio são do tipo covalente. O electrão de valência de cada hidrogénio é compartilhado com o oxigénio, ficando este, em média, com uma distribuição electrónica na última camada característica de gás nobre, i.e., com oito electrões de valência. Esta configuração é bastante estável (os átomos da molécula de água estão fortemente ligados). Contudo, as ligações entre moléculas de água são significativamente mais fracas, como demonstra o baixo ponto de fusão do gelo ($0\text{ }^\circ\text{C}$).

Convém referir que embora cada molécula de H_2O seja electricamente neutra, a distribuição interna de carga não é uniforme. Os electrões da ligação H-O na mesma molécula estão, em média, mais próximos do átomo de oxigénio, resultando numa distribuição de carga negativa em torno do O e positiva em redor do H. Esta distribuição de carga produz um dipolo eléctrico na molécula de água, e diz-se que a molécula da água é dipolar. A distribuição de carga interna desigual na molécula de água pode induzir interacção entre diferentes moléculas, i.e., os dipolos atraem-se, fazendo com que as moléculas se liguem umas às outras: a região negativa do dipolo (o átomo de oxigénio) atrai as zonas positivas do dipolo (o ião hidrogénio) de outras moléculas. Esta ligação é, normalmente, designada por **ligação de hidrogénio**, sendo também referida muitas vezes como **ponte de hidrogénio**.

Ligação de Hidrogénio (1)

Este tipo de ligação é, em geral, comum em estruturas onde participa o ião hidrogénio (protão). O átomo de hidrogénio possui apenas um electrão. É de esperar que o hidrogénio forme uma ligação covalente apenas com um outro átomo. É possível que, contudo, um átomo de hidrogénio seja atraído fortemente para dois átomos, formando-se, portanto, uma ligação de hidrogénio entre eles com uma **energia de ligação** da ordem de 0,1 eV (20 kJ/mol; comparar com ~1 kJ/mol das ligações van der Waals e com a energia da ligação covalente O-H, 20 vezes superior).

A ligação hidrogénio apresenta uma caracter iónico, sendo formada quase exclusivamente entre os átomos mais electronegativos, como o F, o O e o N. O pequeno tamanho do ião hidrogénio não permite mais do que dois átomos próximos. A ligação hidrogénio é responsável em grande parte pela interacção entre as moléculas H_2O e, juntamente, com a atracção electrostática entre os momentos de dipolo, determina as propriedades físicas características do gelo e da água. A ligação de hidrogénio restringe as moléculas das proteínas nos seus arranjos geométricos normais. Esta ligação é também responsável pela polimerização do fluoreto de hidrogénio e do ácido fórmico, sendo importante em certos cristais ferroeléctricos, como o fosfato de potássio di-hidrogenado.



Ligação metálica

Boa parte dos elementos ocorrem na Natureza na forma de metais. Estes são caracterizados por apresentarem elevadas condutividade (eléctrica e calorífica) e resistência mecânica, para além de apresentarem grande ductilidade. Os metais tendem a cristalizar em estruturas com empilhamento compacto hc, cfc, ccc, e outras estruturas próximas destas. Considere-se um metal típico, por exemplo, o sódio. Cada átomo de sódio tem um electrão de valência que está fracamente ligado ao átomo. Quando se forma um cristal de sódio, o electrão de valência desliga-se do átomo original a que pertence e torna-se, essencialmente, um electrão quase-livre, capaz de se deslocar através do cristal. É comum designar os electrões de valência com estas características por **electrões de condução**. A função de onda associada aos estados destes electrões apresenta diferenças significativas em relação às associadas aos electrões de valência dos elementos que tendem a formar sólidos covalentes ou iónicos. Nestes, os electrões de valência estão mais fortemente ligados aos seus átomos.

No caso da ligação metálica, os electrões de valência estão muito fracamente ligados a cada átomo, sendo relativamente fácil o seu deslocamento para outras regiões do cristal, após o estabelecimento da ligação. A propriedade destes electrões de valência se comportarem como electrões quase-livres e, portanto, de condução, é consequência da **deslocalização das funções de onda** destes electrões, que se estendem por todo o volume do metal, i.e., há igual probabilidade de encontrar estes electrões junto a qualquer átomo do cristal. Estas funções de onda são, normalmente, designadas por **orbitais metálicas**. A deslocalização das orbitais metálicas é responsável pela elevada condutividade térmica e eléctrica dos metais (dai a designação de electrões de condução), e por outras propriedades características dos metais. É a propriedade dos electrões de valência se comportarem como electrões quase livre que distingue, principalmente, os metais dos cristais covalentes.

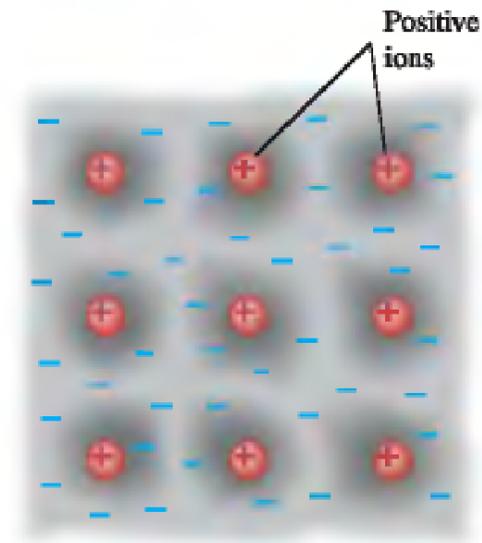
Um cristal de sódio, num modelo simplista, corresponde a um conjunto de iões positivos Na^+ formando uma rede cúbica imersa num gás de electrões. A razão porque a energia deste sistema é inferior à dos átomos isolados/livres só é explicada em termos quânticos. Segue-se uma explicação simples: o electrão de valência de um átomo de Na no estado gasoso possui, em média, elevada energia cinética porque se move exclusivamente na região limitada pelo átomo (volume atómico).

Ligação metálica (1)

No cristal de sódio, os electrões podem mover-se por todo o cristal, o que reduz consideravelmente a energia cinética média associada a estes electrões, de que resulta uma diminuição apreciável da energia total do sistema, justificando a ligação metálica.

A ligação metálica é um pouco mais fraca que as ligações iónica e covalente (relembrar que o ponto de fusão do sódio ocorre a 97.8°C). Como foi referido, a elevada condutividade eléctrica é devida à facilidade com que os electrões de valência se deslocam através do cristal sob a influência de um campo eléctrico, originando facilmente uma corrente eléctrica na direcção e sentido do campo. A condutividade térmica é, também, consequência da grande mobilidade dos electrões de valência uma vez que este comportamento permite um empacotamento denso de átomos, pois os electrões de valência tendem a contrariar a repulsão entre os iões. A elevada **ductilidade** é consequência de a ligação metálica não ter uma direcção preferencial, i.e., é não direccional. Deste modo, se for aplicado um binário ao sólido, os iões podem, facilmente, alterar as suas posições, acomodando-se ao efeito do binário. Os electrões de valência, mais móveis, adaptam-se rapidamente à deformação imposta.

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)

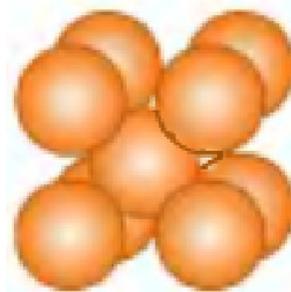
Este modelo de ligação metálica explica razoavelmente bem o comportamento dos metais simples, particularmente, dos alcalinos. Os metais mais complexos - especialmente os elementos de transição Fe, Ni, etc. - requerem um modelo mais elaborado. Assim, no Fe e no Ni, os electrões 3d têm apresentam elevada direccionalidade e tendem a formar ligações covalentes com os seus vizinhos. Estas estão para além da contribuição dos electrões de valência 4s, que originam uma ligação metálica. Em alguns cristais, a interacção entre os cernes e os electrões de condução contribui fortemente para a energia de ligação.

Uma característica da ligação metálica é a diminuição da energia dos electrões de valência dos átomos do metal quando comparados com os átomos livres, o que explica que os electrões se tornem livres. A energia de ligação de um cristal metálico alcalino é consideravelmente menor do que a energia de ligação de um cristal halogeneto alcalino.

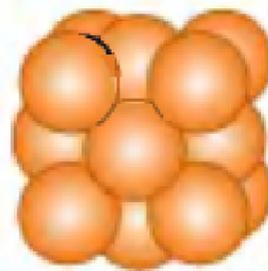
As distâncias interatómicas são relativamente grandes nos metais alcalinos porque a energia cinética dos electrões de condução é menor para distâncias interatómicas maiores. A ligação não é direccional, embora haja um compartilhamento de electrões de forma semelhante à ligação covalente. As energia de ligação são da ordem de centenas de quilojoule por mole.

15-09-2009

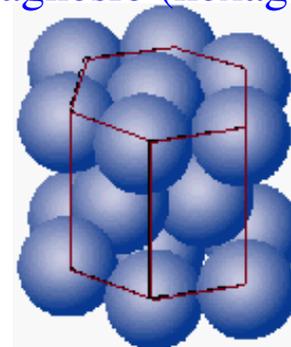
(a) The bcc structure



(b) The fcc structure



Magnésio (hexagonal)



Ligação Covalente-Iônica

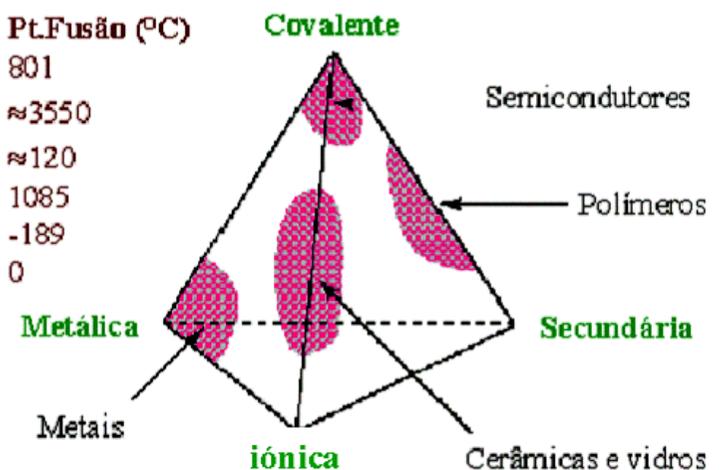
Existem, contudo, compostos em que as ligações nem são puramente iônicas nem são completamente covalentes. De facto existe uma variedade contínua de cristais entre o limite iônico e o covalente. Por exemplo, o arsenieto de gálio (GaAs), composto semiconductor binário formado por elementos dos grupos III-A e V-A da Tabela Periódica que cristaliza na estrutura do ZnS, não é completamente covalente. Estes compostos são, em geral, polares. Neste caso não há transferência completa de electrões de um para o outro átomo: apenas 46% dos electrões de valência do átomo de Ga são cedidos ao átomo de As. Esta transferência é responsável pela parte iônica da ligação. Contudo, a componente da ligação devido ao compartilhar de electrões (parte covalente da ligação) entre os átomos de Ga e de As vizinhos é mais forte. Os átomos com camadas aproximadamente preenchidas, como o Na e o Cl, tendem a formar sólidos iônicos, enquanto que os elementos dos grupos III, IV e V da tabela periódica tendem a formar ligações covalentes.

A ligação do hidrogénio molecular é o exemplo mais simples de ligação covalente. A energia de ligação depende da orientação dos spins, não por causa das forças entre dipolos magnéticos de spins, devido às diferentes distribuições de cargas associadas às duas orientações de spin (consequência do princípio exclusão de Pauli). Esta energia coulombiana dependente do spin denomina-se interação de troca.

Ligação Covalente-Metálica

Há, ainda, compostos em que as ligações não são puramente covalentes. Contudo, também não possui características iônicas. A ligação apresentam alguma propriedades da ligação metálica. As tendências, iônica ou metálica, das ligações covalentes depende essencialmente da electronegatividade dos átomos envolvidos.

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

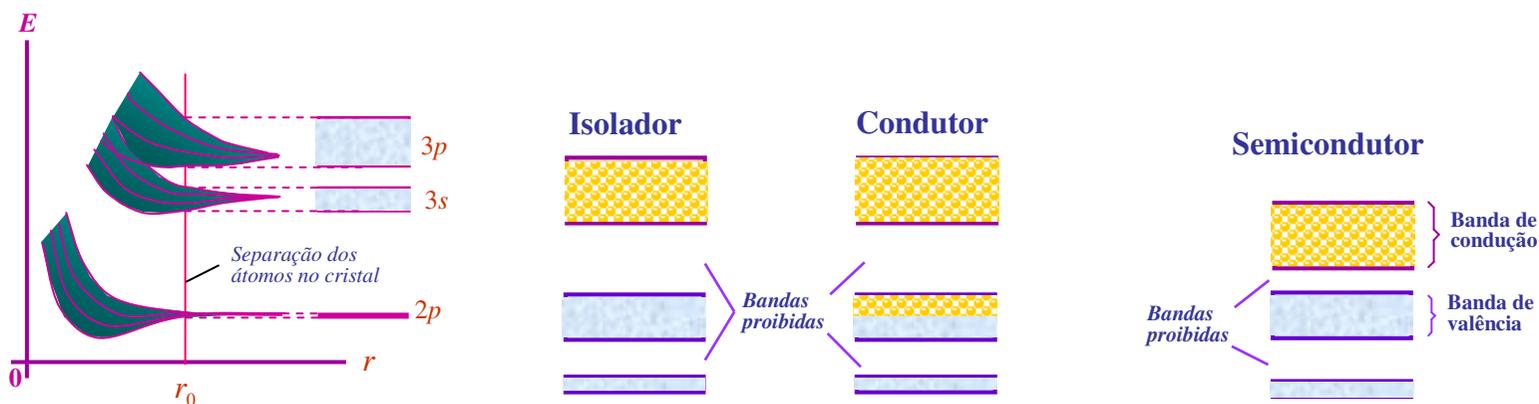


Bandas de energia

Bandas de energia

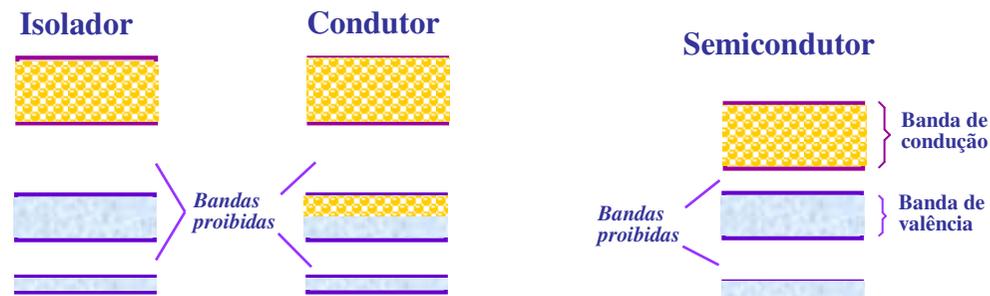
Num sistema constituído por vários átomos idênticos e suficientemente afastados, de forma que a interacção mutua é desprezável, todos os átomos possuem níveis de energia (discretos) semelhantes. À medida que a separação entre átomos diminui, as funções de onda, especialmente as associadas aos electrões mais afastados do núcleo (electrões de valência), começam a sobrepor-se (devido à interacção electromagnética) e os níveis de energia correspondentes alteram-se. Os estados de valência (estados dos electrões de valência), que anteriormente formavam um conjunto de níveis de energia discretos, formam agora bandas de energia contendo níveis muito pouco espaçados.

Num sólido, o numero de átomos por unidade de volume, N , é da ordem do número de Avogadro, o que permite tratar as bandas de energia como distribuições contínuas de níveis de energia. Este efeito só é significativo para os estados possíveis dos electrões de valência. Os estados associados aos electrões mais interiores são pouco afectados e os seus níveis de energia permanecem discretos.



Bandas de energia

A natureza da estrutura de bandas de energia determina se um material é bom ou mau condutor de corrente eléctrica. Nos **isoladores** e **semicondutores**, a zero absoluto, os electrões de valência preenchem por completo a última banda ocupada, que se designa por **banda de valência (BV)**. A banda imediatamente superior chama-se **banda de condução** e está completamente vazia a 0 K. Uma vez que na BV não há estados desocupados, não pode ocorrer deslocamento efectivo de carga eléctrica, mesmo sob a acção de um campo eléctrico aplicado, i.e., a 0 K é nula a corrente associada aos electrões na BV. Um electrão de valência para contribuir para o fluxo de carga eléctrica (corrente) tem de abandonar a BV e transitar para a BC. Isto só é possível se absorver uma quantidade de energia da ordem de 1 eV (valor relativamente grande - e raramente disponível - quando comparado com a energia térmica que a 293 K é ~25 meV). Nos **condutores**, a banda de maior energia não está totalmente preenchida e os electrões nesta banda, que se designa **banda de condução (BC)** podem transitar entre diferentes níveis de energia (o que requer quantidades ínfimas de energia), contribuindo para um fluxo de carga não nulo, sob a acção de um campo eléctrico externo.



Metais e semicondutores

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Prof. MARCELO POLACHINI

© Quimicatual (2000) - todos os direitos reservados

www.quimicatual.com.br

IA 1	CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS																VIIIA 18							
1	Hidrogênio 1,00784 (7) H																	Hélio 4,002602 (2) He						
2	Li 6,941 (2) Li	Be 9,012182 (3) Be																	Boro 10,811 (7) B	Carbono 12,0107 (8) C	Nitrogênio 14,0067 (2) N	Oxigênio 15,9994 (3) O	Fluor 18,9984032(5) F	Neônio 20,1797 (6) Ne
3	Na 22,989770 (2) Na	Magnésio 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
4	K 39,0983 (1) K	Ca 40,078 (4) Ca	Escândio 44,955910 (8) Sc	Ti 47,867 (1) Ti	V 50,9415 (1) V	Cr 51,9961 (6) Cr	Mn 54,938049 (9) Mn	Fe 55,845 (2) Fe	Co 58,933200 (9) Co	Ni 58,6934 (2) Ni	Cu 63,546 (3) Cu	Zn 65,39 (2) Zn	Ga 69,723 (1) Ga	Ge 72,64 (1) Ge	As 74,92160 (2) As	Se 78,96 (3) Se	Br 79,904 (1) Br	Kr 83,80 (1) Kr						
5	Rb 85,4678 (3) Rb	Sr 87,62 (1) Sr	Ítrio 88,90585 (2) Y	Zr 91,224 (2) Zr	Nb 92,90638 (2) Nb	Mo 95,94 (1) Mo	Tc [98] Tc	Ru 101,07 (2) Ru	Rh 102,90550 (2) Rh	Pd 106,42 (1) Pd	Ag 107,8682 (2) Ag	Cd 112,411 (8) Cd	In 114,818 (3) In	Sn 118,710 (7) Sn	Sb 121,760 (1) Sb	Te 127,60 (3) Te	I 126,90447 (3) I	Xe 131,293 (6) Xe						
6	Cs 132,90545 (2) Cs	Ba 137,327 (7) Ba	La 57 La	Hf 178,49 (2) Hf	Ta 180,9479 (1) Ta	W 183,84 (1) W	Re 186,207 (1) Re	Os 190,23 (3) Os	Ir 192,217 (3) Ir	Pt 195,078 (2) Pt	Au 196,96655 (2) Au	Hg 200,59 (2) Hg	Tl 204,3833 (2) Tl	Pb 207,2 (1) Pb	Bi 208,98038 (2) Bi	Po [209] Po	At [210] At	Rn [222] Rn						
7	Fr [223] Fr	Ra [226] Ra	Ac 89 Ac	Rf [261] Rf	Db [262] Db	Sg [263] Sg	Bh [264] Bh	Hs [265] Hs	Mt [266] Mt	Uun [269] Uun	Uuu [272] Uuu	Uub [277] Uub	Uuq [285] Uuq											

Mg Magnésio
24,305
Nome do Elemento
Massa Atômica
(relativa ao isótopo
¹²C = 12,000... u.)
Símbolo
Estado Físico
a 25°C e 1 atm
Sólido
Líquido
Gasoso
[227]
Número Atômico (Z)

Lantânio 138,9055 (2) La	Cério 140,116 (1) Ce	Praseodímio 140,90785 (2) Pr	Neodímio 144,24 (3) Nd	Promécio [145] Pm	Samário 150,36 (3) Sm	Európio 151,964 (1) Eu	Gadolínio 157,25 (3) Gd	Térbio 158,92534 (2) Tb	Disprósio 162,50 (3) Dy	Hólmio 164,93032 (2) Ho	Érbio 167,259 (3) Er	Túlio 168,93421 (2) Tm	Íterbio 173,04 (3) Yb	Lutécio 174,967 (1) Lu
Actínio [227] Ac	Tório 232,0381 (1) Th	Protactínio 231,03688 (2) Pa	Urânio 238,02891 (3) U	Netúnio [237] Np	Plutônio [244] Pu	America [243] Am	Cúrio [247] Cm	Berquélio [247] Bk	Califórnio [251] Cf	Einsteinólio [252] Es	Férmio [257] Fm	Mendelévio [258] Md	Nobélio [259] No	Laurêncio [262] Lr

 Hidrogênio
 Metais
 Semimetais
 Ametais
 Gases Nobres
 Lantanóides
 Actinóides

* 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)

Metais: modelo dos electrões livres

Boa parte dos elementos ocorrem na Natureza na forma de metais. Considere-se um metal típico, por exemplo, o sódio. Cada átomo de sódio tem um electrão de valência que está fracamente ligado ao átomo. Quando se forma um cristal de sódio, o electrão de valência desliga-se do átomo original a que pertence e torna-se, essencialmente, um electrão quase-livre, capaz de se deslocar através do cristal. É comum designar os electrões de valência com estas características por **electrões de condução**. A propriedade dos electrões de valência num metal se comportarem como electrões quase-livres e, portanto, de condução, é responsável pela elevada condutividade térmica e eléctrica dos metais (dai a designação de electrões de condução), e por outras propriedades características dos metais. É a propriedade dos electrões de valência se comportarem como electrões quase livre que distingue, principalmente, os metais dos cristais covalentes. Ou seja, 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): $\psi(x, y, z) = A \sin(n_x \pi x / L) \sin(n_y \pi y / L) \sin(n_z \pi z / L)$

Os valores possíveis de energia correspondentes são:

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

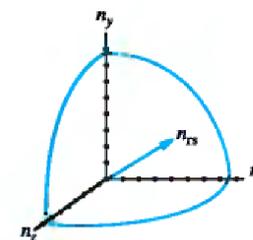
O número de estados possíveis numa esfera de raio $n_{rs} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$,

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

A densidade de estados, i.e.,

$$\text{o número de estados por unidade de energia é dada por: } g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{(2m)^{3/2} V}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}.$$

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.

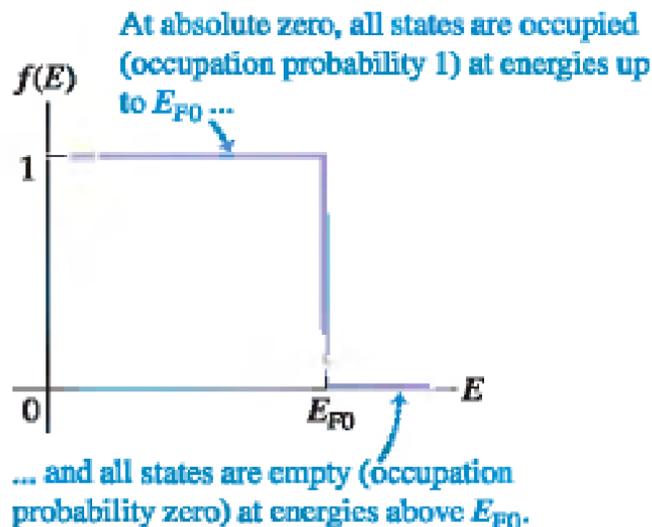


Estatística de Fermi-Dirac

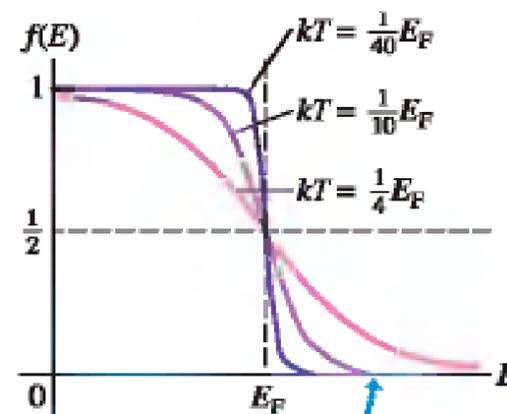
A estatística de Fermi-Dirac é uma estatística quântica que rege as partículas de spin semi-inteiro, os fermiões. Leva o nome de dois eminentes físicos: Enrico Fermi e Paul Adrien Maurice Dirac. Qualquer sistema a uma temperatura absoluta de zero graus kelvin encontra-se no estado fundamental. Se o sistema for de férmions, isto é, partículas com spin semi-inteiro, todos os estados abaixo do potencial (energia) de Fermi E_f estarão ocupados. Estatisticamente, todos os estados com energia E inferior à energia de Fermi estarão ocupados, probabilidade $f(E)=1$, e todos com energia superior estarão desocupados, probabilidade $f(E)=0$. Uma dada temperatura T , a probabilidade de um estado de energia E estar ocupado segue a distribuição de Fermi-Dirac:

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

42.24 The probability distribution for occupation of free-electron energy states at absolute zero.



42.25 Graphs of the Fermi-Dirac distribution function for various values of kT , assuming that the Fermi energy E_F is independent of the temperature T .



As T increases, more and more of the electrons are excited to states with energy $E > E_F$.

Conhecida a probabilidade $f(E)$ de um estado com energia E estar ocupado, pode-se determinar a energia desse estado:

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

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: $E_{med} = \frac{3}{5} E_{F_0}$ (ver livro de texto).

Se os electrões se comportassem como um gás ideal a sua energia cinética média e a velocidade, à temperatura T , seriam dadas por: $E_{med,T} = \frac{3}{2} k_B T$ e $v_{med,T} = \sqrt{2E_{med,T} / m_e}$.

Semicondutores e dispositivos

Temas a abordar

- Semicondutores intrínsecos
- Semicondutores extrínsecos
- Condutividade em semicondutores
- Propriedades ópticas (revisão)
- Processos de emissão e absorção de radiação (revisão)
- Semicondutores directos e indirectos
- Homojunções e heterojunções semicondutoras
- Junções p-n
- Característica corrente-tensão ($I-V$) de uma Junção $p-n$
- Díodo rectificador, díodo zenner, díodo túnel, díodo de Schottky e contactos óhmicos
- Células fotovoltaicas
- LEDs e lasers de díodo
- Transístores bipolares, de efeito de campo, MOSFETs e circuitos integrados

Ver os objectivos de aprendizagem descritos no início do capítulo 42 do manual recomendado.

Semicondutores intrínsecos

À temperatura do zero absoluto, os materiais semicondutores puros comportam-se como isoladores perfeitos (todos os electrões de valência tomam parte na ligação covalente) e, portanto, não há electrões livre para contribuírem para a corrente eléctrica. Contudo, à medida que a temperatura aumenta, parte dos electrões de valência adquirem energia suficiente para escaparem aos respectivos átomos e tornam-se electrões livres, deixando um “buraco” na correspondente ligação covalente. A vaga deixada na banda de valência (BV) designa-se por **vazio** ou **lacuna**. Por cada electrão (n) transferido da BV para a banda de condução (BC), cria-se na primeira (BV) um vazio (p); num semiconductor puro, por cada electrão livre na BC existe um vazio na BV, i.e., sempre que um electrão deixa a banda de valência gera-se um **par electrão-vazio**. Entretanto, um electrão livre na BC pode perder a sua energia e regressar à BV: este processo designa-se por **recombinação**.

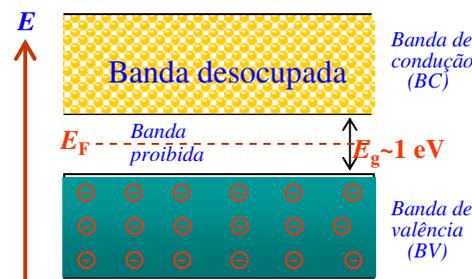
A probabilidade de um electrão ocupar um nível de energia E , é dada pela distribuição de Fermi-Dirac:

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

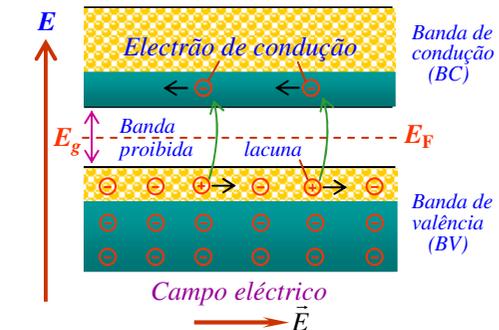
onde F identifica o nível de energia com probabilidade de ocupação igual a $\frac{1}{2}$ (50%), que se designa por **nível de Fermi**. Num SC intrínseco, o nível de Fermi situa-se sensivelmente a meio da banda proibida que separa a banda de valência da banda de condução.

15-09-2009

Semiconductor intrínseco a 0 K



Semiconductor intrínseco ($T > 0$ K)



Semicondutores intrínsecos

Num semicondutor intrínseco em equilíbrio, o nº de electrões livres (n) iguala o nº de vazios (p); à temperatura T , tem-se: $n_i=p_i\propto\exp(-E_g/2k_B T)$; para o silício e para o germânio (a 300 K), $n_i=p_i=1.45\times 10^{10}\text{ cm}^{-3}$ e $2.4\times 10^{13}\text{ cm}^{-3}$, respectivamente.

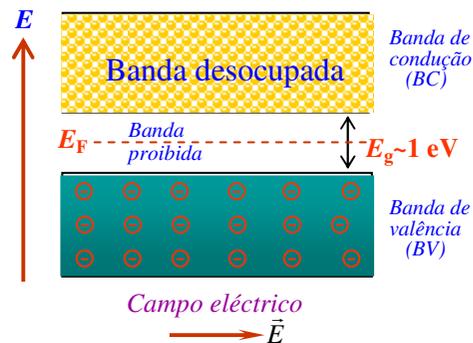
Quer o electrão, quer o vazio, na ausência de um campo eléctrico, *deslocam-se* aleatoriamente entre os átomos do semicondutor (SC), e a corrente eléctrica efectiva é nula. Contudo, quando uma diferença de potencial eléctrico (tensão) é aplicada entre dois pontos do material SC, os electrões livres (na BC) movem-se, agora, ordenadamente, na direcção do polo positivo, dando origem a uma corrente eléctrica: corrente de electrões. Por seu lado, um estado desocupado na BV (que pode ser preenchido por electrões de valência de outros átomos, transferindo-se o vazio para outro átomo, sem significativa variação de energia), sob a acção de um campo eléctrico, comporta-se como um portador de carga positiva, deslocando-se na direcção do polo negativo da fonte de tensão: corrente de vazios/lacunas. A corrente total no sc é, pois, a soma destas duas componentes.

As funções de onda associadas aos estados nas bandas de condução e de valência são caracterizadas pelos valores próprios de energia e pelos respectivos vectores de onda, k_n e k_p (as quantidades de movimento dos portadores de carga são $p_n=\hbar k_n$ e $p_p=\hbar k_p$, respectivamente).

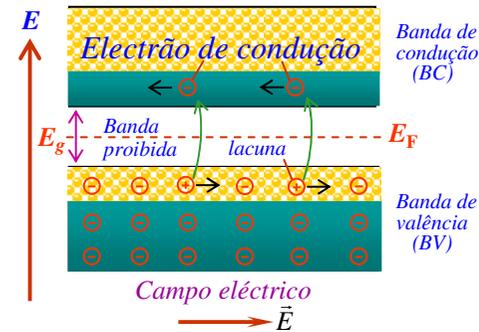
A transição de electrões entre as bandas de condução e de valência, como qualquer outro processo físico, tem de satisfazer duas leis fundamentais: *i) conservação da energia* e *ii) conservação da quantidade de movimento*.

Semicondutores extrínsecos

Semicondutor intrínseco a 0 K



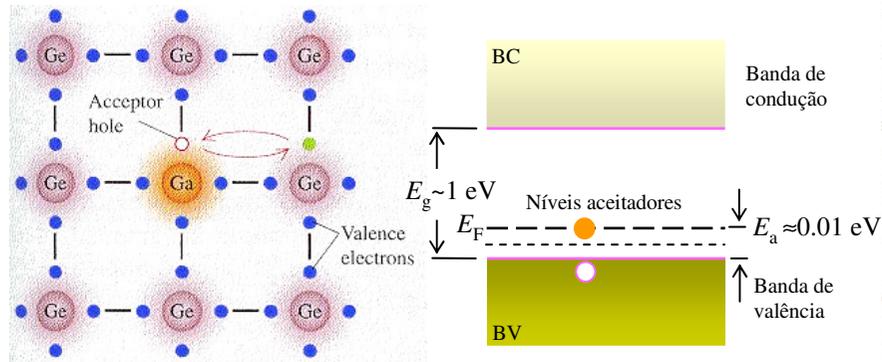
Semicondutor intrínseco ($T > 0 \text{ K}$)



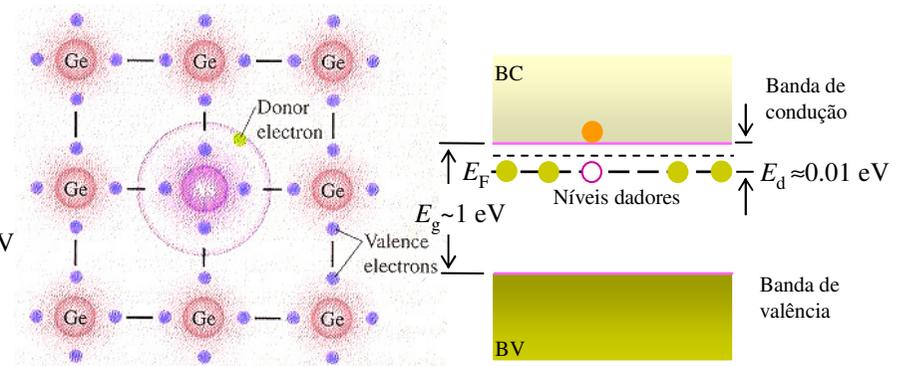
Os materiais semicondutores não são bons condutores de corrente eléctrica, devido ao nº reduzido de electrões livres na banda de condução e de vazios na banda de valência. Para terem interesse comercial os materiais SC devem ser modificados de forma a aumentar o número de portadores livres (electrões na BC e vazios na BV), de modo a alterar a sua **condutibilidade**, e permitir a construção de diferentes dispositivos electrónicos e optoelectrónicos. Tal efeito é conseguido substituindo alguns átomos do material SC original por elementos de valência inferior ou superior e de tamanho semelhante ao do constituinte base. 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 semicondutor obtido diz-se de **tipo p**; quando a impureza possui uma valência superior, o SC designa-se de **tipo n**.

Semicondutores extrínsecos

Semicondutores tipo-p



Semicondutores tipo-n



À temperatura ambiente, a presença no SC de impurezas de valência inferior, **impurezas aceitadoras/receptoras** (em geral, elementos do 3º grupo da tabela periódica), aumenta o nº de vazios na BV, tornando a componente da corrente devida às lacunas maior; elementos de valência superior, **impurezas dadoras** (geralmente, elementos do 5º grupo da tabela periódica), dão origem a semicondutores em que o nº de electrões livres na BC é substancialmente maior que o nº de lacunas na BV, fazendo, neste caso, com que a componente da corrente devida aos electrões livres seja superior à componente devida às lacunas. Deste modo, a condutibilidade de um sc intrínseco é significativamente alterada pela substituição de uma pequena fracção de átomos base por elementos do 3º ou do 5º grupos da tabela periódica, tornando os sc muito mais interessantes do ponto de vista tecnológico.

Condutividade em semicondutores

A dopagem de um semicondutor não só aumenta a sua condutibilidade, como permite criar um material em que os portadores de carga são, maioritariamente, electrões (n) ou lacunas (p), de acordo com o tipo de impureza. A concentração de dopantes necessária para alterar de forma significativa a condutividade de um semicondutor, quando comparada com a concentração dos átomos nativos do semicondutor, é muito pequena. Por exemplo, a condutibilidade do germânio, a 30 °C, aumenta cerca de 12 vezes, se substituirmos 1 em cada 10^8 átomos de Ge por um átomo de As (elemento com cinco electrões de valência).

A concentração de portadores também pode ser alterada, fazendo incidir no material radiação electromagnética e/ou variando a temperatura do material. A radiação incidente altera a condutibilidade eléctrica do material, pois os fotões absorvidos geram pares electrão-lacuna.

O processo inverso, **recombinação radiativa**, em que electrão e lacuna se aniquilam dando origem a um fotão, tem como efeito a diminuição do nº de portadores de carga livres. Contudo, nem todas as recombinações electrão-lacuna são radiativas, isto é, dão origem à emissão de luz: **recombinações não-radiativas**.

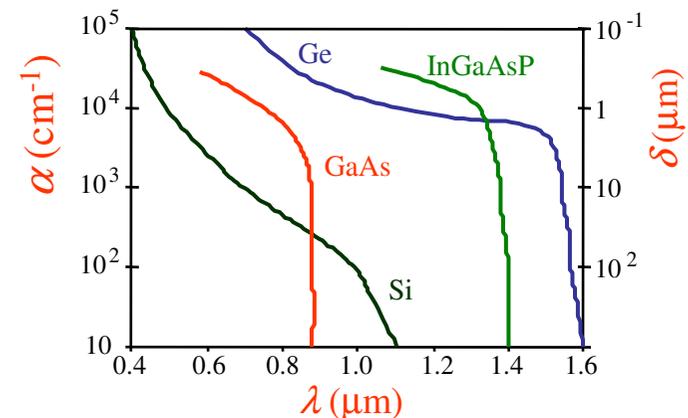
As recombinações não-radiativas traduzem-se numa variação da temperatura do cristal devidos à geração/aniquilação de modos de vibração da rede cristalina (**fonões**). O **fonão** corresponde ao *quantum* de energia térmica da rede cristalina.

Estas alterações da condutibilidade podem ser monitorizadas através de eléctrodos ligados à amostra, detectando a variação da resistência do material: em ambos os fenómenos de recombinação são empregues em detectores ópticos e/ou térmicos.

Propriedades ópticas dos semicondutores

Do ponto de vista electromagnético um material é completamente caracterizado pelas respectivas permitividade eléctrica, ϵ , e permeabilidade magnética, μ . (Rever equações de Maxwell.) As propriedades ópticas de um material são definidas pelo **índice de refração**, n_r , e pelo **coeficiente de absorção**, α . O **índice de refração**, n_r , é definido como a razão entre a velocidade da radiação no vácuo, c , e a velocidade de fase da radiação no material, v_f : $n_r=c/v_f$; (nos semicondutores com mais interesse em optoelectrónica $n_r=3-4$). É de referir que o índice de refração é, em geral, função do comprimento de onda da radiação: fenómeno da **dispersão**. O **coeficiente de absorção**, α , está relacionado com a taxa de variação espacial da intensidade da radiação no material, $dI/dx=-\alpha I(x)$, onde $I(x)$ representa a intensidade da radiação na região de coordenada x , i.e., $I(x)=I_0e^{-\alpha x}$ (I_0 representa a intensidade de radiação incidente na superfície no material). A Figura mostra a dependência do coeficiente de absorção no comprimento de onda de radiação correspondente à porção óptica do espectro electromagnética (0.4 μm – 1.6 μm) para alguns *cristais* semicondutores muito usados em electrónica e optoelectrónica.

Representa-se também o **coeficiente de penetração**, δ , que corresponde ao inverso do coeficiente de absorção, $\delta=1/\alpha$: δ é numericamente igual à espessura de material necessária para absorver aproximadamente 63% da radiação incidente perpendicularmente na superfície do material: $I(x=\delta)=I_0e^{-1}$.

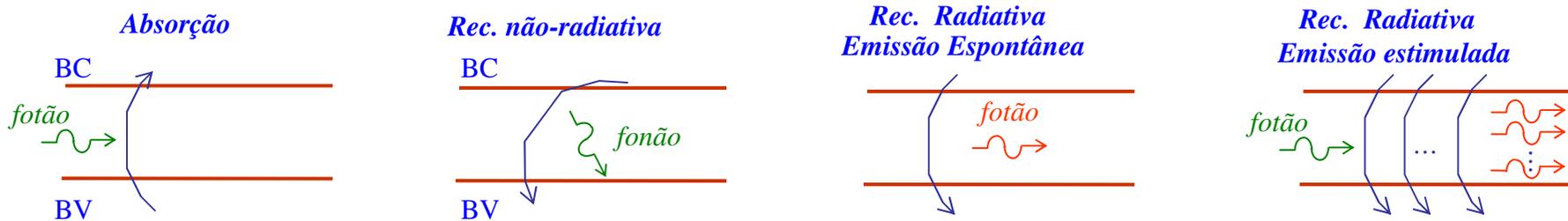


Processos de emissão e absorção de radiação

Designa-se genericamente por **luminescência**, a emissão de luz por um corpo, motivada por qualquer causa que não seja elevação de temperatura. Há várias *formas* de luminescência, dependendo da fonte de excitação: electroluminescência, fotoluminescência, luminescência catódica, fluorescência, fosforescência.

Electroluminescência: emissão de luz por certas substancias quando sob a acção de um campo eléctrico.

Processos de Absorção, Emissão Espontânea e Emissão Estimulada em Semicondutores



Emissão Espontânea: fenómeno de recombinação radiativa com características aleatórias, i.e., a direcção e a fase dos fotões gerados é incoerente (**Díodos Emissores de Luz, LEDs**).

Emissão Estimulada: fenómeno de recombinação radiativa induzido pela densidade de potência luminosa de c.d.o. $\lambda \sim hc/E_g$ existente num dado ponto do cristal, num processo em que cada fotão incidente dá origem a um segundo fotão, sem que o primeiro seja absorvido ou as suas propriedades alteradas, resultando em **amplificação da radiação incidente** (**Lasers, Díodos Lasers, amplificadores ópticos**).

Num laser, a radiação *excitadora* e a radiação produzida por emissão estimulada têm: a mesma energia (i.e., o mesmo comprimento de onda); a mesma direcção de propagação; a mesma fase; e a mesma polarização (os campos eléctricos dos dois fotões oscilam no mesmo plano) Porque a radiação *excitadora* e a estimulada têm as mesmas características, a radiação produzida diz-se **coerente**.

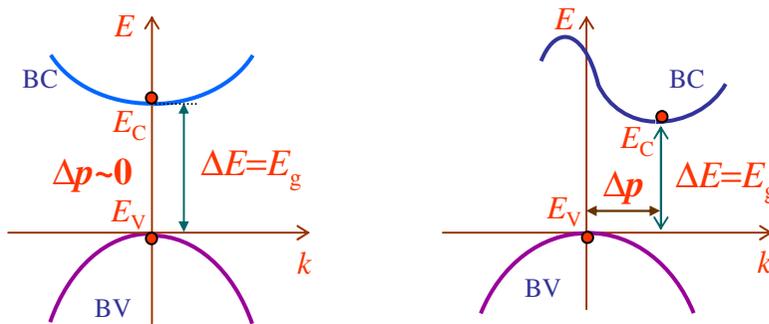
Semicondutores directos e indirectos

As funções de onda associadas aos estados nas bandas de condução e de valência são caracterizadas pelos valores próprios de energia e pelos respectivos vectores de onda, k_n e k_p (as quantidades de movimento dos portadores de carga são $p_n = \hbar k_n$ e $p_p = \hbar k_p$, respectivamente; n=electrões e p=lacunas).

A transição de electrões entre as bandas de condução e de valência, como qualquer outro processo físico, tem de satisfazer duas leis fundamentais: *i) conservação da energia* e *ii) conservação da quantidade de movimento*.

Nos semicondutores de **banda proibida directa**, o máximo de energia da banda de valência e o mínimo de energia da banda de condução ocorrem ao mesmo valor do vector de onda, i.e., $k_n = k_p$ (a quantidade de movimento dos portadores nos máximos/mínimos das respectivas bandas é a mesma). Num semiconductor de banda proibida indirecta, as transições entre estados de energias próximos do máximo de energia da banda de valência (E_V) e estados de energia próximos do mínimo de energia da banda de condução (E_C) induzidas por absorção de um fóton verificam a conservação da quantidade de movimento, dado que a quantidade de movimento do fóton é muito menor dos que a de qualquer dos portadores de carga (electrões ou lacunas).

Semiconductor directo Semiconductor indirecto



A transição de um electrão da BV para a BC num SCI requer, para além de uma quantidade de energia ($\geq E_g$), uma alteração da quantidade de movimento do electrão de $\Delta p = \hbar(k_n - k_p)$.

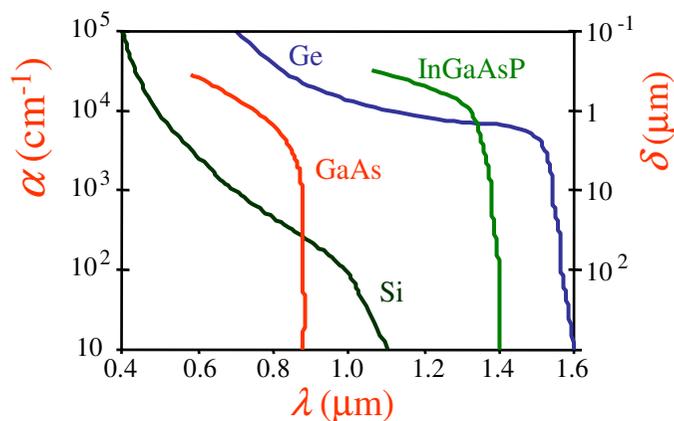
Propriedades ópticas dos semicondutores

Em geral, o coeficiente de absorção α de um material depende, fortemente, do comprimento de onda (c.d.o., λ) da radiação incidente.

Os materiais SCs cujo coeficiente de absorção diminui bruscamente para comprimentos de onda superiores a $\lambda_g = hc/E_g$ dizem-se **semicondutores de banda proibida directa** (exemplos: GaAs, InP, InGaAs, InGaAlAs, InGaAsP).

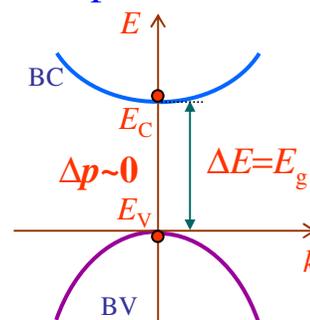
Nos semicondutores de banda proibida directa a transição de electrões da BV para a BC em resultado da absorção de radiação electromagnética só é permitida se a energia do fóton correspondente for $\geq E_g$: se $E_g \geq E_{\text{fóton}}$ o fóton não é absorvido.

O silício, por exemplo, é um semicondutores de **banda proibida indirecta**: o coeficiente de absorção α varia gradualmente com o comprimento de onda (ver figura abaixo). Tantos nos SCs de banda proibida directa e de banda proibida indirecta a absorção de radiação só ocorre se $E_{\text{fóton}} \geq E_g$.

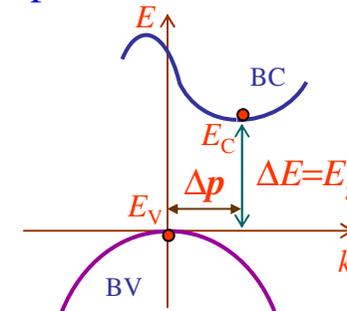


15-09-2009

Semicondutor de banda proibida directa



Semicondutor de banda proibida indirecta



Semicondutores directos e indirectos

Nos SCs directos, a recombinação não-radiativa é significativamente inferior à componente radiativa, permitindo obter fontes ópticas de elevada eficiência; os emissores ópticos mais eficientes são baseados em ligas semicondutoras de banda proibida directa (GaAs, InP, InGaAs, InGaAlAs, InGaAsP, ...).

No caso de semicondutores de banda proibida indirecta, o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorrem a diferentes valores do vector de onda dos portadores nas respectivas bandas, i.e., $k_n \neq k_p$ (a quantidade de movimento dos portadores nos máximos/mínimos das respectivas bandas é diferente), pelo que a conservação de quantidade de movimento exige a intervenção de uma terceira partícula (fonão) nos processos de geração e recombinação de portadores (a quantidade de movimento associada ao fóton, $p = \hbar k$, é muito menor quando comparada com a variação de momento linear necessária).

Os semicondutores de banda indirecta são os semicondutores muito utilizados em dispositivos electrónicos. Em optoelectrónica, os semicondutores indirectos são usados, essencialmente, como detectores (fotodetectores): o Si é usado para detecção de radiação de c.d.o. até 1.1 μm , e o germânio para radiação de c.d.o. superior a 1.3 μm .

As ligas SCs de banda proibida directa são muito usadas em fotodetectores, maioritariamente na região espectral 1.3 – 1.6 μm (região onde as fibras ópticas apresentam baixas perdas e dispersão). Fotodetectores rápidos operando a comprimentos de onda iguais ou superiores a 1.3 μm , empregam InGaAs (ou outros materiais III-V) e não silício ou germânio.

Homojunções e heterojunções semicondutoras

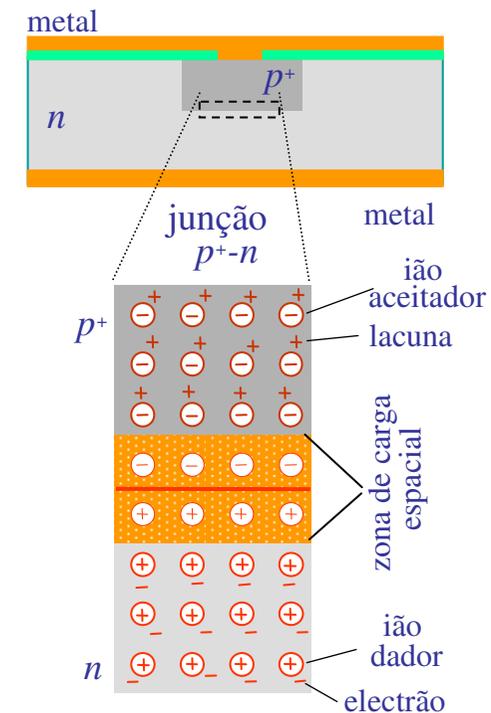
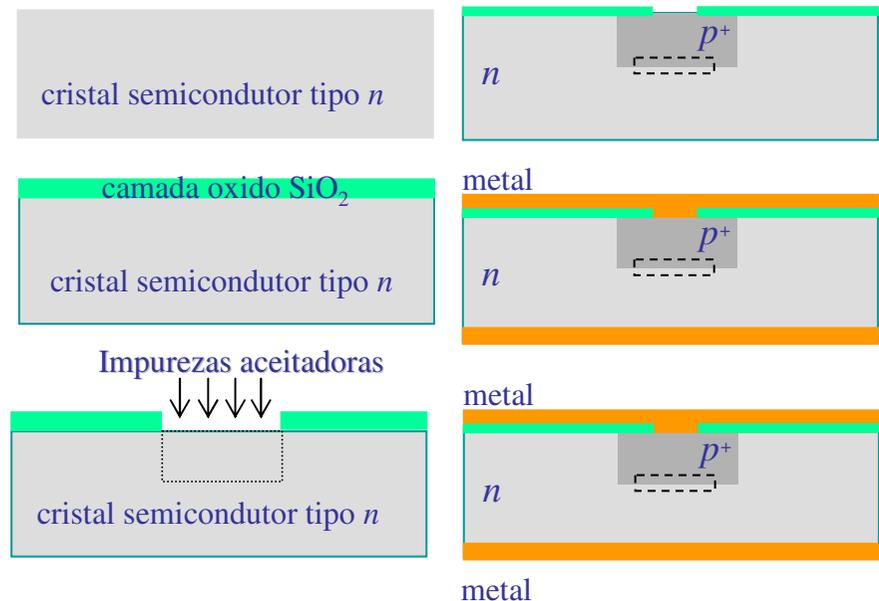
Partindo de um substrato do tipo n cuja superfície foi oxidada (face com uma fina camada de sílica, SiO_2), no qual é seleccionada uma região a ser dopada com impurezas aceitadoras através de um processo fotolitográfico, seguido da remoção de sílica na zona seleccionada. À medida que prossegue a dopagem com impurezas do tipo p (elemento que origina uma concentração elevada de lacunas quase-livres), na região localizada no material n (onde existe uma concentração elevada de electrões quase-livres), ocorre forte **difusão** e **recombinação** dos portadores livres na zona da junção. A figura da página seguinte representa, de forma esquemática, a junção p^+-n (o sinal + indica que a concentração de átomos aceitadores no lado p é superior à concentração de átomos dadores no lado n). Na figura, são identificados, apenas, os iões dopantes (aceitadores ou p; dadores ou n) e os resultantes portadores quase-livres (lacunas; electrões). Os átomos das impurezas (fixos na rede cristalina) do lado p e do lado n na vizinhança de junção perdem, respectivamente, lacunas (que se difundem para o lado n) e electrões (que se difundem para o lado p), originando uma região localizada de densidade de carga não nula: região espacial de carga ou zona de depleção. Desta distribuição de carga resulta uma barreira de potencial e, portanto, um campo eléctrico. O campo eléctrico assim criado provoca, por sua vez, o deslocamento de electrões (minoritários) do lado p para o lado n e de vazios (minoritários) do lado n para o lado p. Em equilíbrio, as correntes devidas à difusão dos portadores livres majoritários são anuladas pelas correntes de arrastamento dos portadores minoritários induzidas pelo campo eléctrico. O nível de Fermi é constante ao longo da junção em equilíbrio, sendo a nula corrente efectiva através da junção. Se tal não acontecesse, os electrões de um lado da junção teriam uma energia média superior aos electrões do outro lado, havendo transferência de electrões até se igualarem os níveis de Fermi.

Fabricação de um homojunção $p-n$

Uma **homojunção** corresponde à região de confluência de duas porções de um mesmo cristal semiconductor com propriedades eléctricas distintas. O exemplo clássico é a zona fronteira entre regiões do tipo p e do tipo n num mesmo cristal semiconductor, designada por **junção p-n**. **Notar que o cristal semiconductor, a menos das impurezas, é o mesmo.** Quando a junção é entre dois cristais semicondutores diferentes, por exemplo o Ge e o Si, diz-se que se trata de uma **heterojunção**.

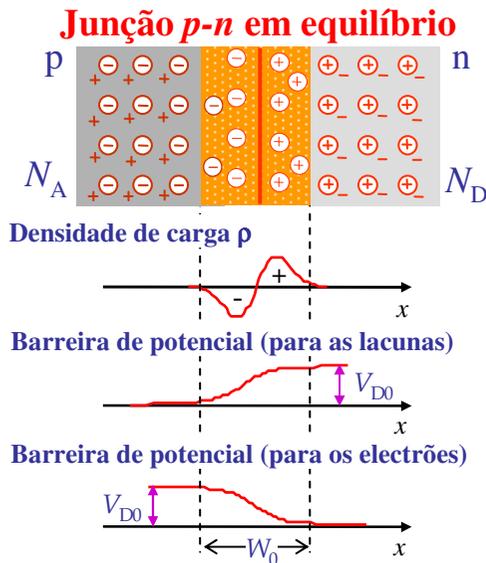
Uma junção p-n é obtida dopando, de forma selectiva, o cristal semiconductor (normalmente referido como substrato), criando, neste substrato, regiões com características de condução eléctrica muito diferentes. Pode-se afirmar que a dopagem selectiva é a base de toda a microelectrónica/electrónica-integrada. Quase todos os componentes electrónicos e optoelectrónicos incorporam uma ou mais junções p-n.

Fabricação de um homojunção p^+-n



Junções p-n

Uma **junção p-n** é obtida dopando, de forma selectiva, um cristal semiconductor **único** tipo p (n), normalmente referido como substrato, com impurezas de substituição do tipo n - átomos dadores - (tipo p - átomos aceitadores), criando regiões com características de condução eléctrica muito diferentes.



A ddp criada pela difusão de lacunas e de electrões das regiões p e n , respectivamente, actua como uma barreira de potencial para os portadores majoritários (vazios no lado p e electrões no lado n). A probabilidade destes atravessarem a barreira é proporcional ao factor de Boltzmann ($\exp[-eV_{D0}/k_B T]$), i.e., a intensidade de corrente I_D devida à difusão dos portadores majoritários é proporcional a $\exp[-eV_{D0}/k_B T]$. Contudo, a mesma ddp actua como uma queda de potencial para os portadores minoritários, promovendo a sua passagem através da barreira (vazios do lado n para o lado p e electrões da região p para a região n), dando origem à corrente de arrastamento, I_A . Em equilíbrio, $I_D + I_A = 0$.

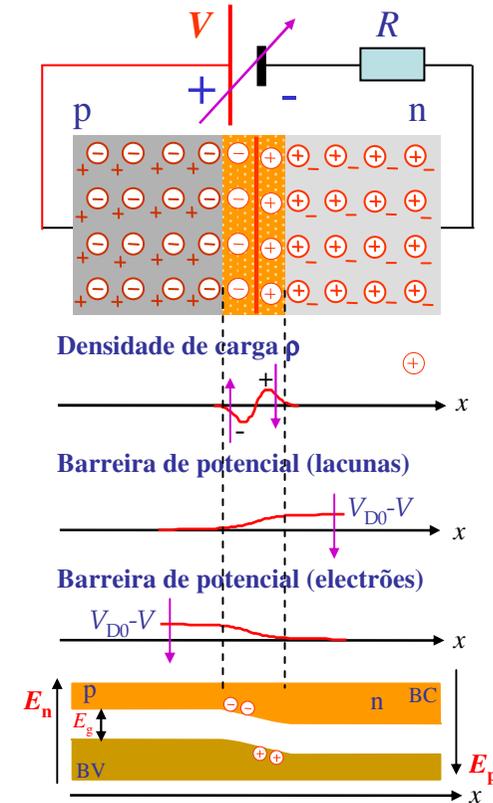
$$V_{D0} = \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{N_A \cdot N_D}{n_i^2} \right] \quad W_0 = \sqrt{\frac{2\epsilon \cdot V_{D0}}{e} \left(\frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right)}$$

Se a junção $p-n$ for **polarizada directamente**, i.e., se se aplicar uma diferença de potencial entre as regiões p e n , em que o lado p corresponde à região de maior potencial, há injeção, através da junção, de lacunas do lado p para o lado n e de electrões do lado n para o lado p . A concentração p_n de lacunas no lado n sobe relativamente ao valor de equilíbrio térmico p_{n0} . De forma análoga, a concentração n_p de electrões no lado p sobe relativamente ao valor de equilíbrio térmico n_{p0} . Como consequência, a densidade espacial de carga diminui, reduzindo a ddp (e do campo eléctrico) entre os lados p e n da junção, o que corresponde a um decréscimo da barreira de potencial. Esta transferência de portadores através da junção (vazios do lado p para o lado n , e electrões da região n para a região p), leva a que a intensidade de corrente devida à difusão se torna dominante, isto é, verifica-se que $I_D \gg I_A$.

Junções p-n polarizada directamente

Se a junção *p-n* for **polarizada directamente**, i.e., se se aplicar uma diferença de potencial entre as regiões *p* e *n*, em que o lado *p* corresponde à região de maior potencial, há injeção, através da junção, de lacunas do lado *p* para o lado *n* e de electrões do lado *n* para o lado *p*. A concentração p_n de lacunas no lado *n* sobe relativamente ao valor de equilíbrio térmico p_{n0} . De forma análoga, a concentração n_p de electrões no lado *p* sobe relativamente ao valor de equilíbrio térmico n_{p0} . Como consequência, a densidade espacial de carga diminui, reduzindo a ddp (e do campo eléctrico) entre os lados *p* e *n* da junção, o que corresponde a um decréscimo da barreira de potencial. Como resultado desta transferência de portadores através da junção (vazios do lado *p* para o lado *n*, e electrões da região *n* para a região *p*), a intensidade de corrente devida à difusão torna-se dominante ($I_D \gg I_A$).

(E_n representa a energia dos electrões e E_p indica a energia dos vazios. Notar que não existem vazios na BC.)

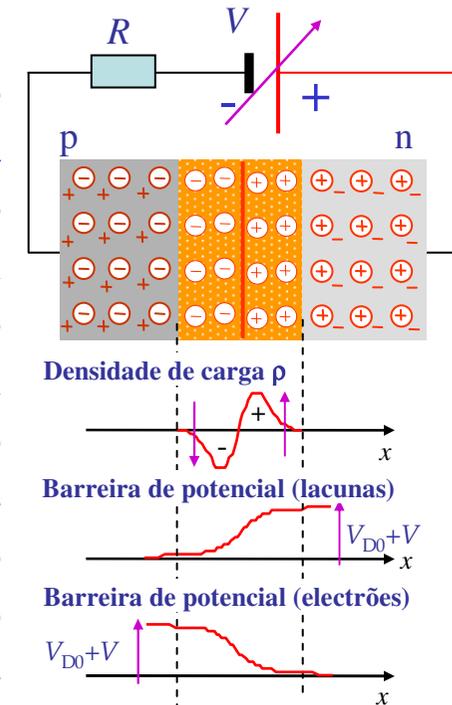


A corrente de arrastamento (devida ao campo eléctrico) mantém-se praticamente inalterável. A corrente de difusão é proporcional a $\exp[-e(V_{D0}-V)/k_B T]$, onde e representa a carga do electrão, e V a tensão aplicada. Para junções em silício, $V_{D0} \sim 0.7$ V; para o germânio, $V_{D0} \sim 0.3$ V. Quando a tensão aplicada V contrabalançar a barreira de potencial V_{D0} , a corrente total através da junção é limitada pelos outros elementos do circuito. Na prática, quando $V = V_{D0}$, considera-se que a corrente na junção é independente da tensão aplicada, sendo limitada pelos outros elementos do circuito em que esta se insere (no caso da figura, a resistência R), e que a ddp entre os terminais da junção mantém-se $\cong V_{D0}$.

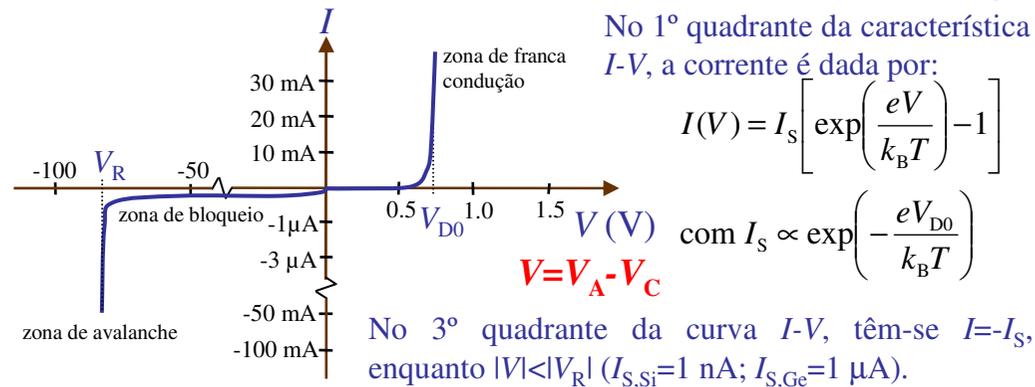
Junções p-n polarizada inversamente

Se a junção p-n for **polarizada inversamente**, i.e., se se aplicar uma ddp entre as regiões p e n, em que o lado p corresponde à região de menor potencial, os electrões livres do lado n são atraídos para o polo positivo da fonte, deixando lacunas no seu lugar, o que levará à expansão da região espacial de carga positiva no lado n. Ao mesmo tempo, os vazios do lado p são atraídos para o polo negativo da fonte, originando o aumento da região espacial de carga negativa no lado p. A concentração de lacunas no lado n, p_n , desce, relativamente ao valor de equilíbrio térmico p_{n0} e, de forma análoga, a concentração de electrões no lado p, n_p , diminui relativamente ao valor de equilíbrio térmico n_{p0} . O que também faz com que o volume da região espacial de carga cresça, originando o aumento da barreira de potencial entre os lados p e n da junção (e do campo eléctrico), o que diminui o número de portadores livres na vizinhança da junção e a corrente devida à difusão dos portadores livres através da junção, rompendo-se o equilíbrio entre a corrente de difusão e a corrente de arrastamento: $I_D < I_A$.

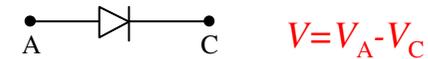
A corrente na junção é, quase exclusivamente, devida à corrente de arrastamento, que é proporcional à concentração dos portadores minoritários e, portanto, não varia com a tensão aplicada. (O número de portadores minoritários é, praticamente, independente da tensão aplicada.) O valor da corrente através da junção polarizada inversamente designa-se por **corrente inversa** ou **corrente de fuga** (I_S). Em junções de silício, $I_S \sim \text{nA}$; para o germânio, $I_S \sim \text{mA}$. Há, contudo, um valor de tensão, **tensão de ruptura da junção**, a partir do qual a intensidade da corrente inversa é limitada, apenas, pelos outros elementos do circuito em que a junção se insere, sendo, praticamente, independente da tensão inversa aplicada. A ruptura pode ocorrer devido ao **processo de avalanche** ou ao **efeito de Zener**.



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



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



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

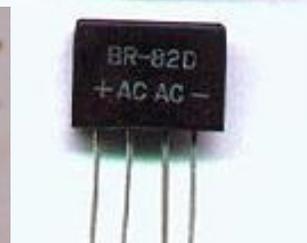
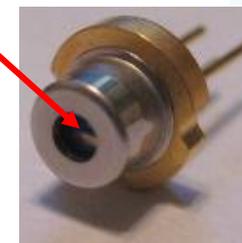
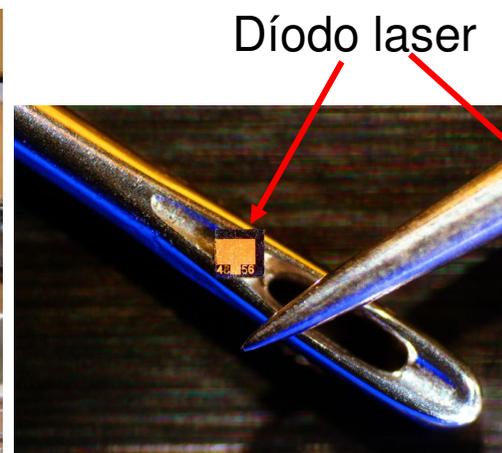
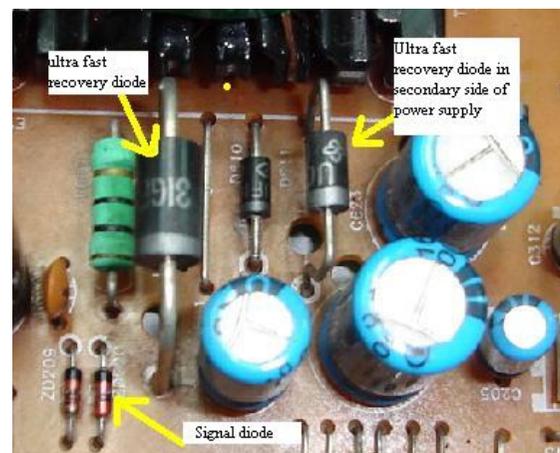
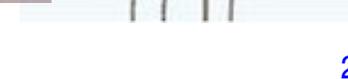
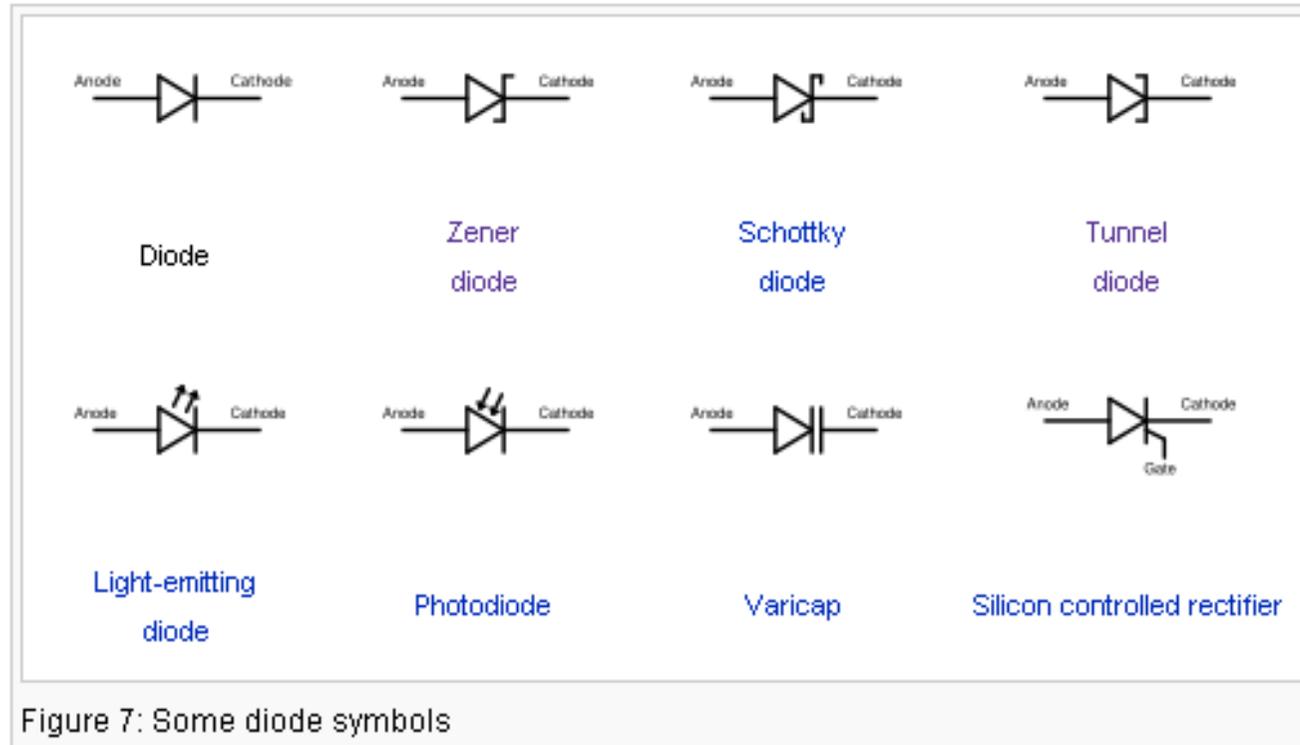
A seta indica o sentido da corrente directa. Em condução um díodo apresenta uma queda de tensão entre os seus terminais, que no caso de díodos de silício é $V_D \sim 0.7 \text{ V}$.

Para cada junção, há um valor de tensão inversa a partir do qual a intensidade da corrente inversa aumenta rapidamente, tornando-se, praticamente, independente da tensão aplicada: **tensão de ruptura da junção**. A ruptura pode ocorrer devido ao **processo de avalanche** ou ao **efeito de Zener**.

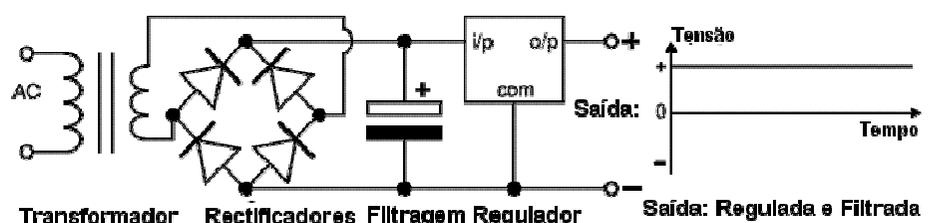
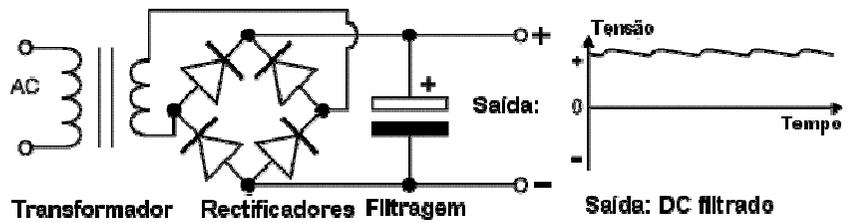
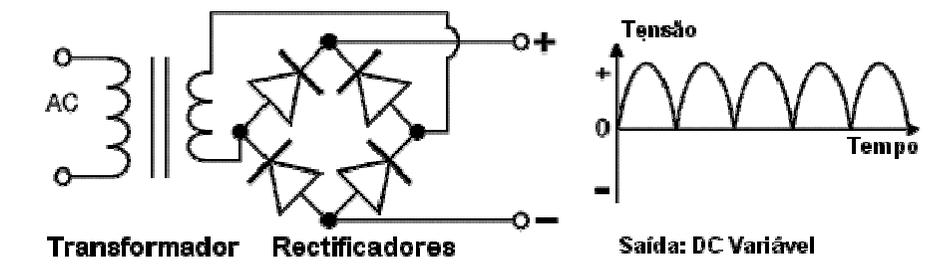
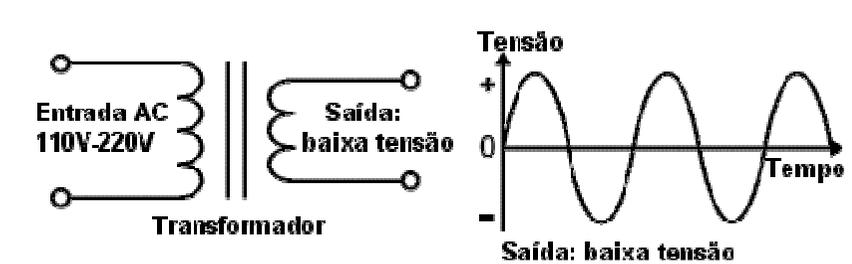
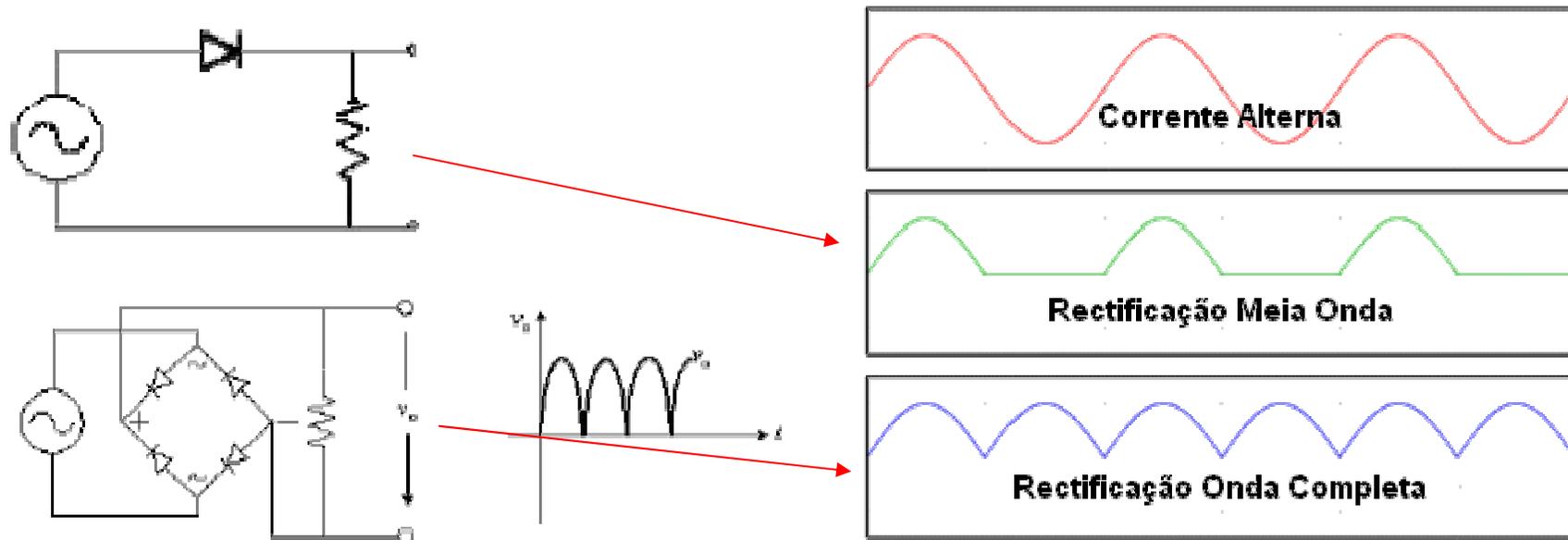
Efeito de avalanche: à medida que a tensão inversa cresce, embora o número de portadores minoritários não varie de forma significativa sob a acção do campo eléctrico crescente, a energia dos portadores aumenta e pode tornar-se suficiente para produzir na zona de depleção novos pares electrão-vazio os quais vão aumentar o valor da corrente. O processo de multiplicação de portadores é semelhante ao efeito de uma avalanche. Atingido o valor da tensão que desencadeia o efeito de avalanche, a tensão mantém-se praticamente constante, mesmo que a corrente varie significativamente.

Efeito de Zener: há junções p - n em que o campo eléctrico na região de depleção é suficientemente intenso para provocar a transição de electrões da banda de valência para a banda de condução. (O efeito é uma demonstração prática do efeito quântico – efeito de túnel.) O efeito de Zener é dominante nos díodos cuja tensão de ruptura é inferior a seis volts, e o efeito de avalanche naqueles em que a ruptura se verifica acima de seis volts.

Díodos



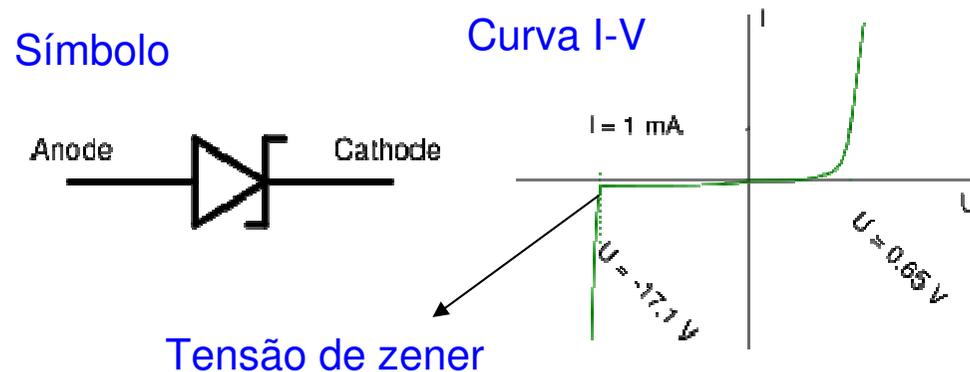
Rectificação de meia onda e de onda completa



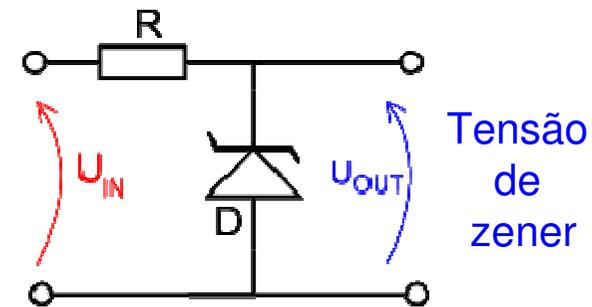
Díodos Zener e de túnel

Díodo Zener

Os díodos **especialmente** fabricados para operar na região de ruptura, independentemente do efeito usado, são designados de **díodos zener**. Nos díodos zener baseados no efeito de avalanche, a zona de transição é mais gradual do que nos díodos empregando o efeito de Zener.

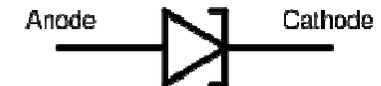


Regulador de tensão com diodo zener

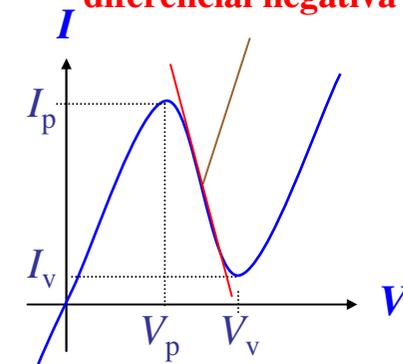


Díodo Túnel

Numa junção $p-n$ com concentração de aceitadores e dadores muito elevada ($N_A, N_D \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$), a espessura da zona de depleção é da ordem de $\sim 5 \text{ nm}$. Neste caso, entra em jogo o **efeito de túnel**. Os electrões têm, agora, elevada probabilidade de transitar directamente da **banda de condução do lado n** para a **banda de valência do lado p** . Nos díodos túnel a corrente directa começa por crescer com a tensão, até atingir **um máximo local**, decrescendo em seguida até atingir **um mínimo local**, a partir do qual aumenta exponencialmente e de forma idêntica à da junção $p-n$ moderadamente dopada; **a corrente inversa aumenta linearmente com a tensão**.



Região de resistência diferencial negativa



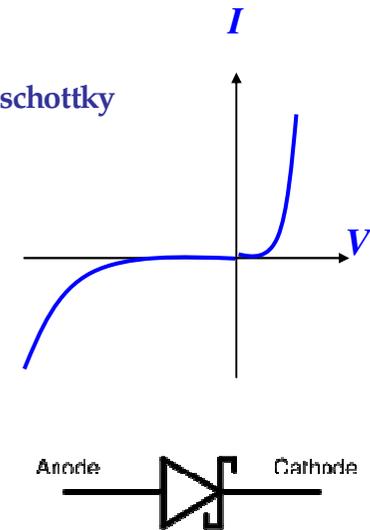
Barreiras de Schottky e Contactos Óhmicos

Em geral, o contacto entre um metal e um semiconductor é **não óhmico**, isto é, a característica corrente-tensão I-V não é linear. Normalmente, o contacto entre um metal e um semiconductor exhibe um comportamento semelhante ao de uma junção *p-n* (ver figura ao lado).

O contacto semiconductor-metal com as características da figura designa-se por contacto ou barreira de Schottky e o dispositivo correspondente designa-se **díodo schottky**.

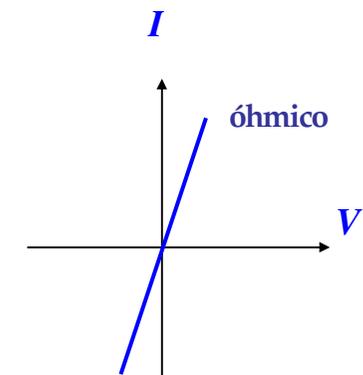
A queda de tensão, quando em condução, nestes díodos é cerca de metade da queda de tensão (diferença de potencial) de uma junção *p-n*.

Em geral, os díodos schottky são muito mais rápidos do que o díodo *p-n* porque no processo de condução só intervêm os portadores majoritários (não há lugar à recombinação dos portadores minoritários).



Contactos óhmicos semiconductor-metal

Para uma junção *p-n*, por exemplo, ter aplicação prática, é necessário fazer a sua ligação com um circuito exterior, i.e., obter duas junções metal-semiconductor (uma no lado *n* e outra no lado *p*). Estas junções não devem alterar ou mascarar as propriedades do dispositivo SC em apreço, isto é, o contacto (junção) metal-semiconductor deve ter uma característica corrente-tensão linear, i.e., deve ser óhmica.



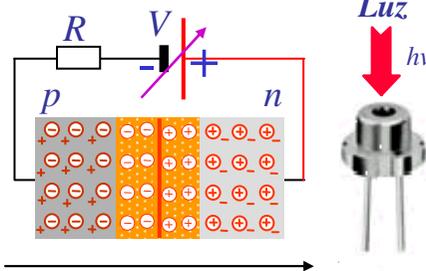
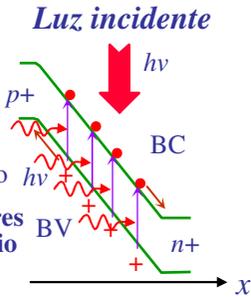
Outros dispositivos baseados em Junções p-n

Fotodíodo

BV: banda de valência

BC: banda de condução

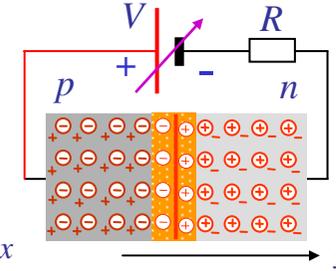
Formação de pares electrão-vazio



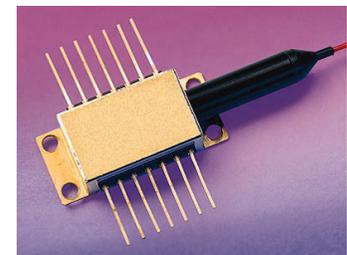
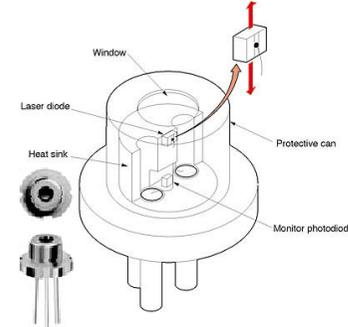
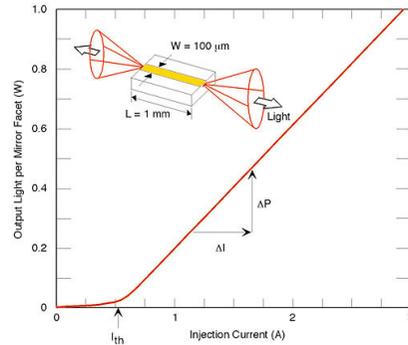
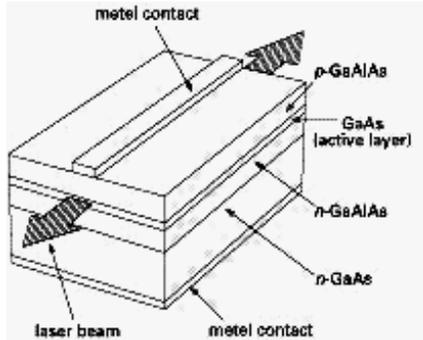
Díodo Emissor de Luz (LED)



Recombinação electrão-vazio

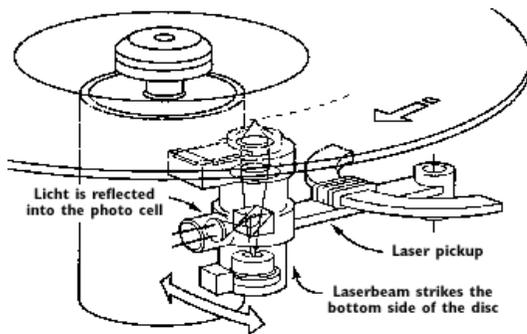


Díodo Laser

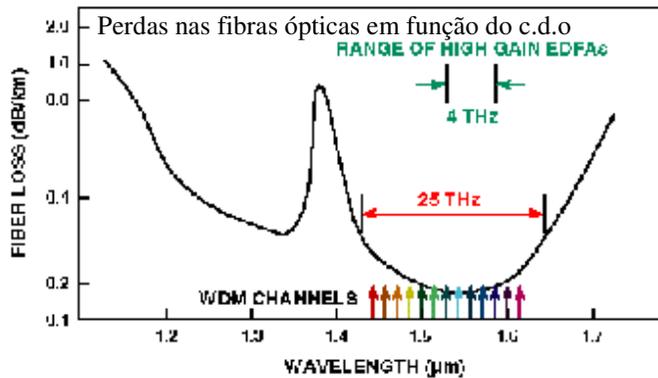


Aplicações em Optoelectrónica

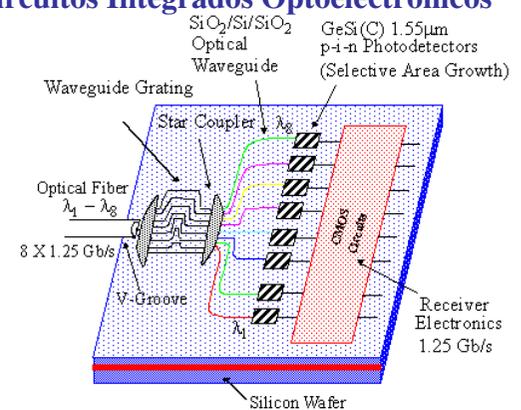
Díodos Laser para leitores de CD



Díodos Laser para Telecomunicações por fibra Óptica



Circuitos Integrados Optoelectrónicos



Transístores e Aplicações

Transístores

O transístor bipolar é o transístor mais importante do ponto de vista histórico e, também, o de utilização mais corrente. No entanto, convém também, desde já, referir os transístores de efeito de campo (FET, “Field Effect Transistor”), nomeadamente, os transístores FET de junção unipolar, os transístores MOSFET (“Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor”), e os CMOS (“complementary MOSFET”), os quais são muito usados na electrónica integrada de alta densidade.

O transístor bipolar foi inventado em 1947 por John Bardeen, Walter Brattain e William Shockley, todos na altura investigadores nos “Bell Telephone Laboratories”, EUA (ver página seguinte). Pela sua invenção estes investigadores receberam o prémio Nobel da Física em 1956. Cedo se percebeu que o transístor revolucionaria a Electrónica e, por arrastamento, toda a tecnologia, essencialmente porque possibilitava realizar as operações electrónicas básicas de amplificação e de comutação de uma forma fiável e barata. Além disso, o facto de o transístor poder ter dimensões muito reduzidas (hoje em dia a tecnologia de fabrico permite construir transístores com uma área inferior ao micrómetro quadrado) possibilita a integração de milhões de unidades numa única pastilha de silício, sendo assim possível construir circuitos integrados de grande complexidade e capazes de efectuarem operações elaboradas como no caso dos microprocessadores.

Transístores

O material semiconductor mais usado na fabricação de transístores é o silício. Contudo, o primeiro transístor foi fabricado em germânio. O silício é preferível, essencialmente, porque possibilita o funcionamento a temperaturas mais elevadas (175 °C, quando comparado com os ~75 °C dos transístores de germânio) e também porque apresenta correntes de fuga menores. O transístor bipolar é formado por duas junções $p-n$ em série, podendo apresentar as configurações $p-n-p$ e $n-p-n$ (ver página seguinte). Os transístores $n-p-n$ são os mais comuns, basicamente, porque a mobilidade dos electrões é muito superior à das lacunas, isto é, os electrões movem-se mais facilmente ao longo da estrutura cristalina, o que traz vantagens significativas no processamento de sinais de alta frequência. E são, também, mais adequados à produção em massa. No entanto, deve-se referir que, em várias situações, é muito útil ter os dois tipos de transístores num circuito.

O **transístor de junção bipolar** é um dos componentes mais importantes na Electrónica. É um dispositivo com três terminais. Num elemento com três terminais é possível usar a tensão entre dois dos terminais para controlar o fluxo de corrente no terceiro terminal, i.e., obter uma fonte controlável. O transístor permite a amplificação e comutação de sinais, tendo substituído as válvulas termo-iónicas na maior parte das aplicações. A figura da página seguinte mostra, de forma esquemática, um transístor bipolar $p-n-p$. Este transístor é formado por duas junções $p-n$ que partilham a região do tipo n (muito fina e não representada à escala). Neste aspecto, o dispositivo corresponde à sanduíche de um material do tipo n , entre duas regiões do tipo p . Existe também a estrutura complementar ($n-p-n$). Dependendo da polarização de cada junções (directa ou inversa), o transístor pode operar no modo activo/linear, estar em corte ou em saturação.

O transístor e o circuito integrado

Antes do transístor

Válvula de vácuo

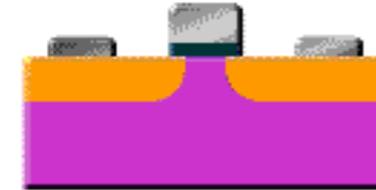


Dopar
semicondutores

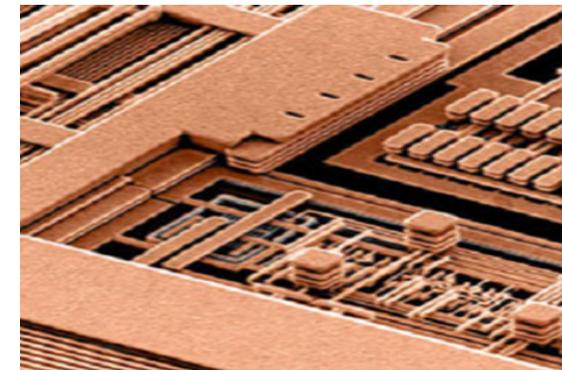
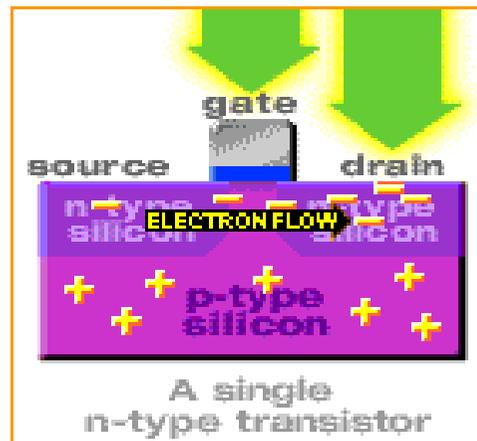
Primeiro transístor



Circuito integrado



Esquema do transístor

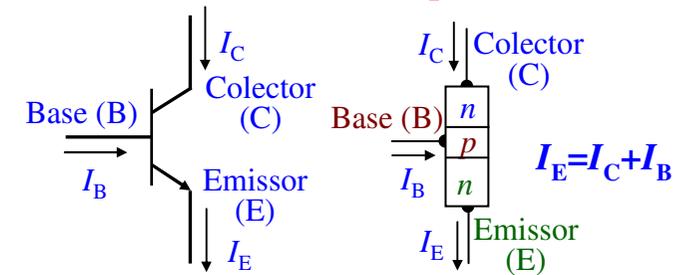


O Primeiro Transistor, 1947

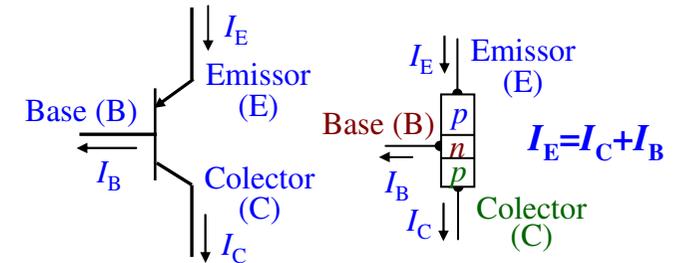
O Primeiro Transistor, 1947



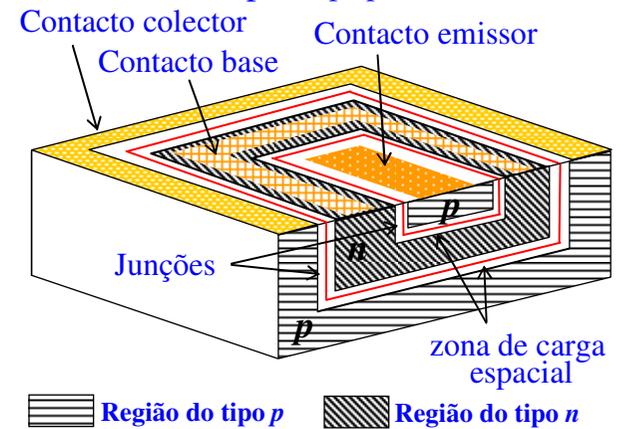
Símbolo do transistor *n-p-n*



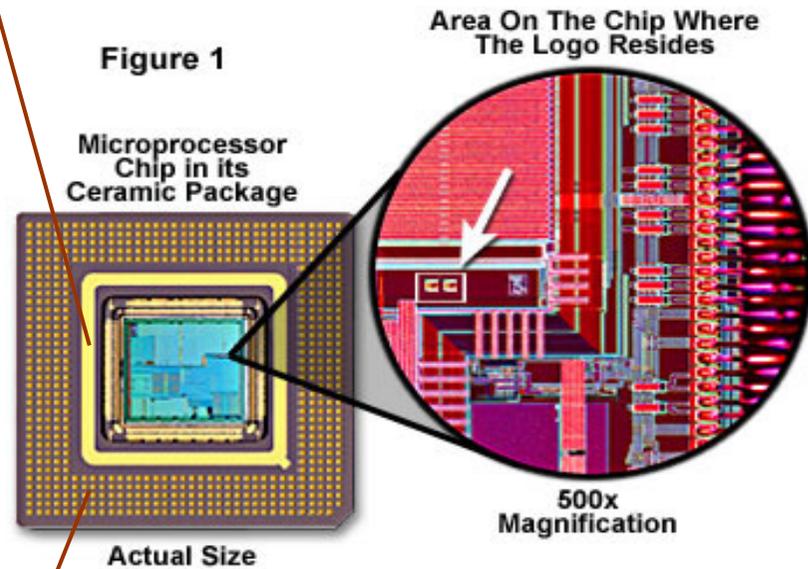
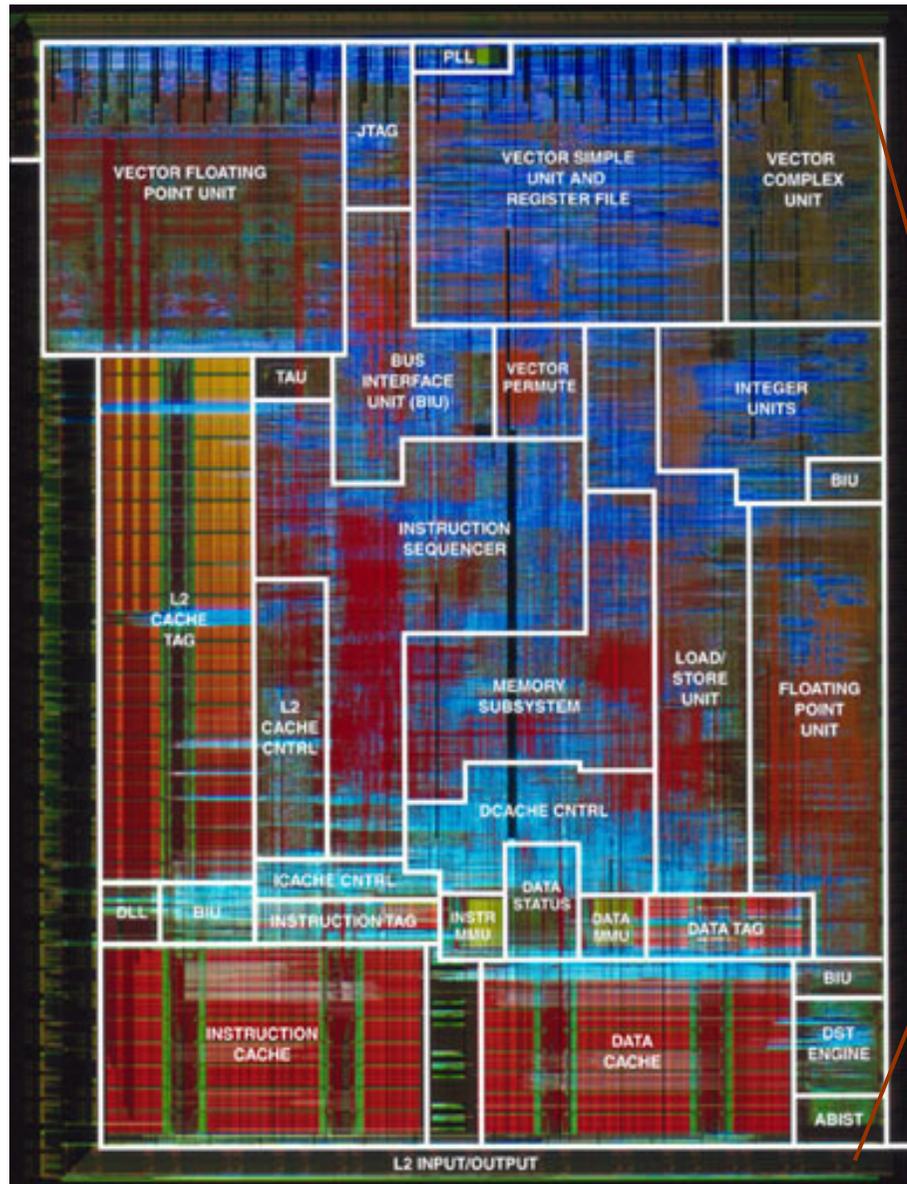
Símbolo do transistor *p-n-p*



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



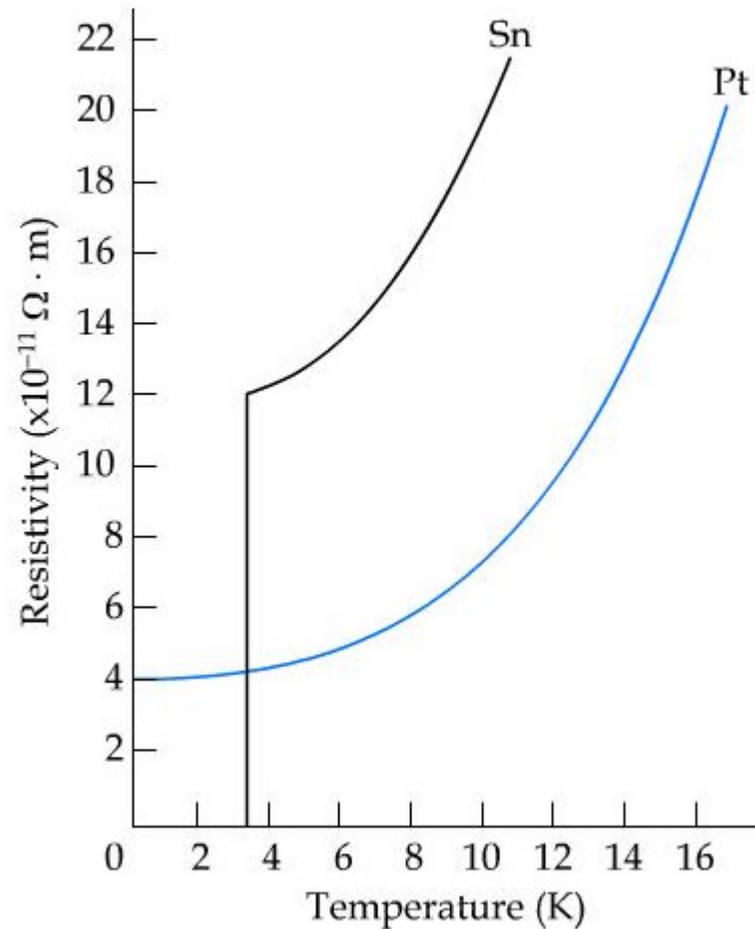
Circuitos integrados



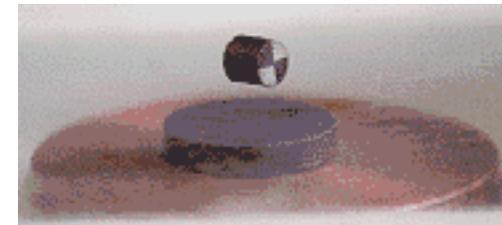
Supercondutividade

Superconductores

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

Curiosidades

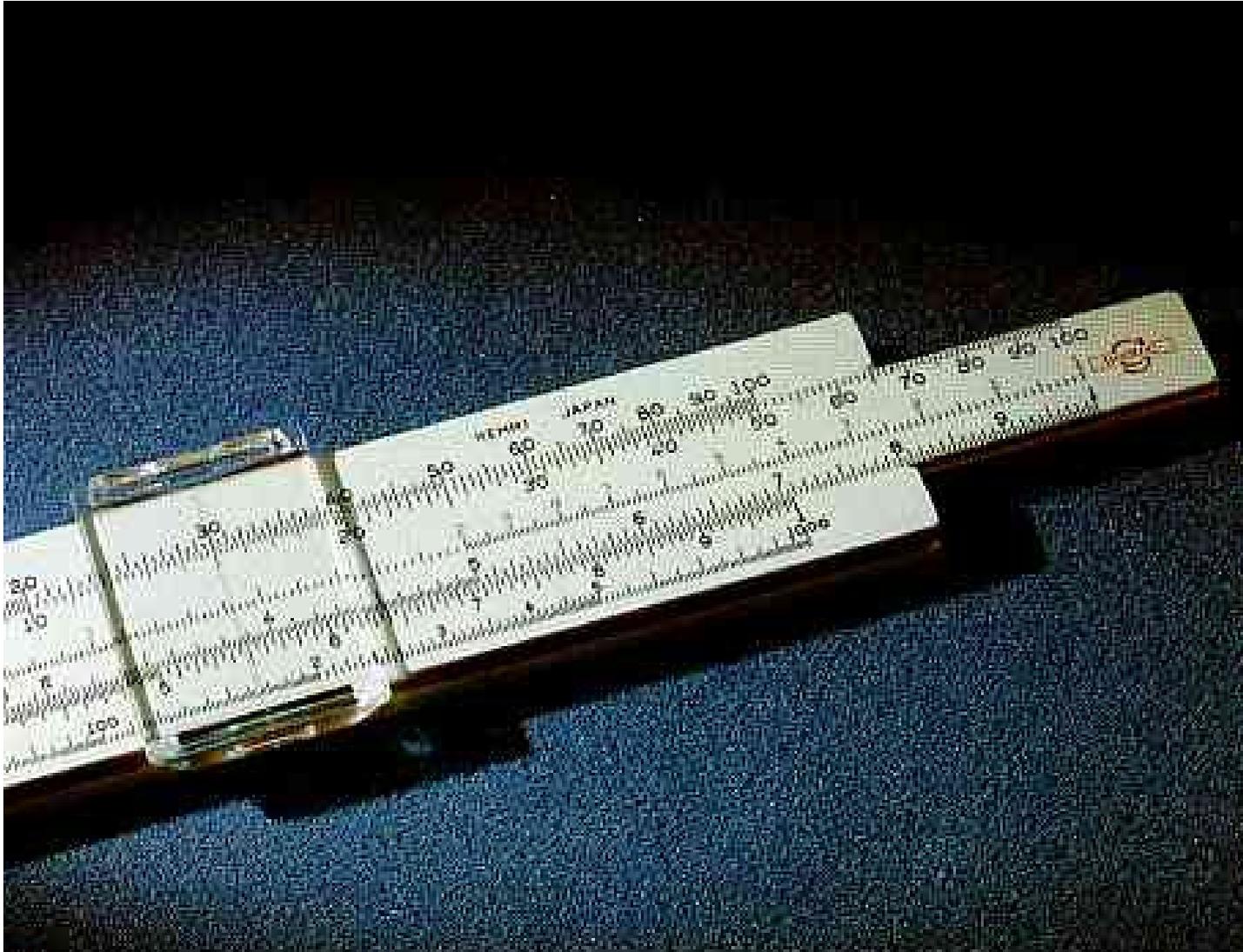
Primeiros *computadores*

Ábaco (875 d. C.)



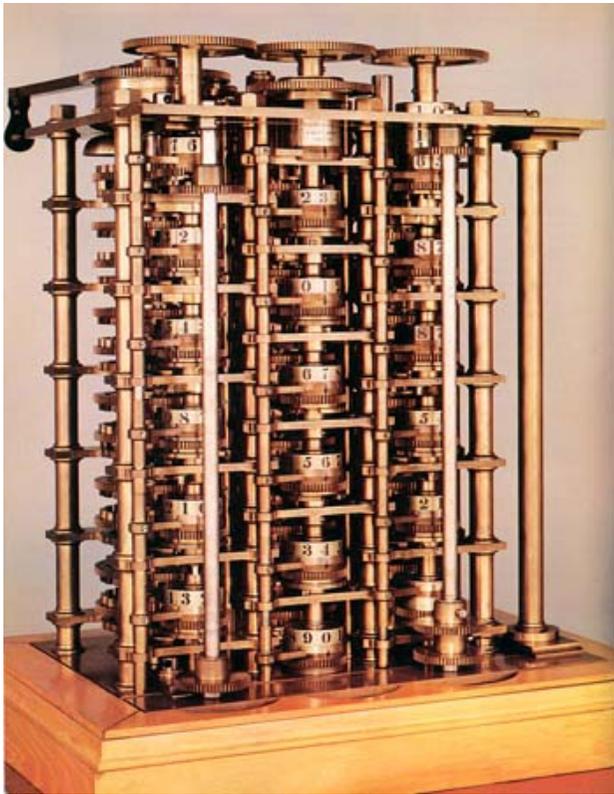
Primeiros computadores

Régua de cálculo (1600 d.C.)

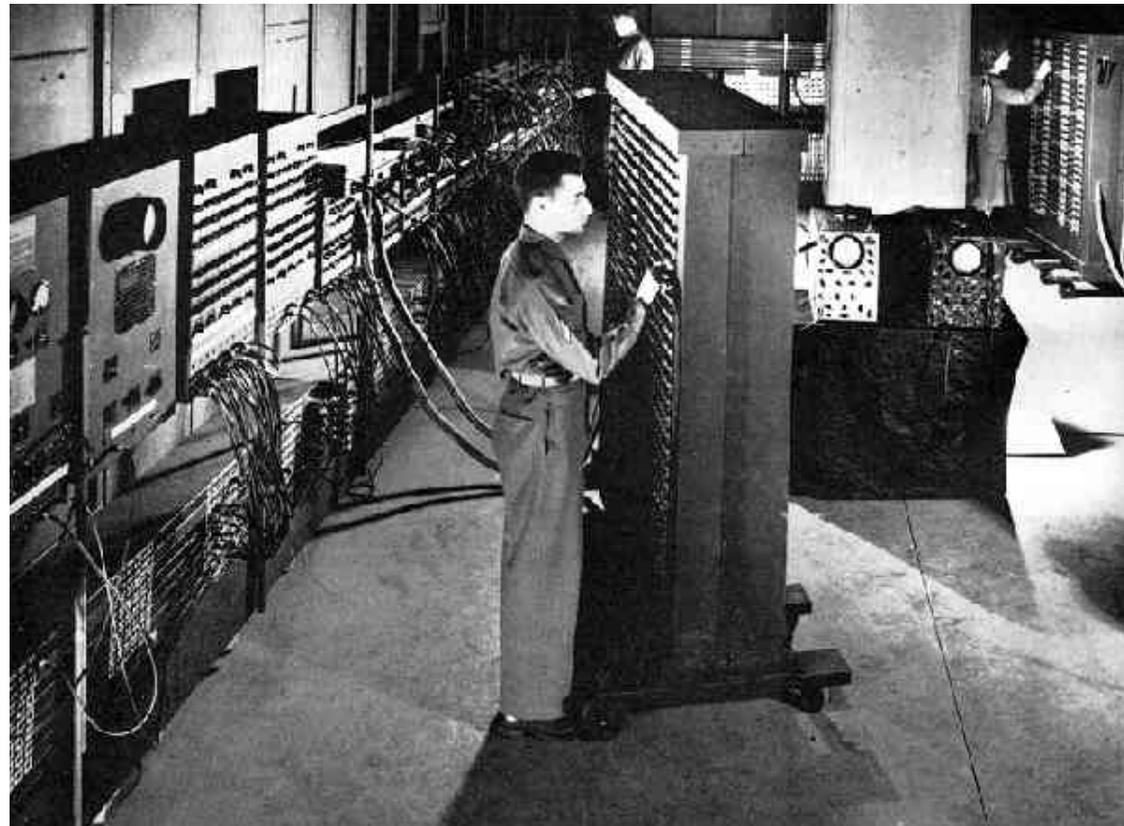


Primeiros computadores

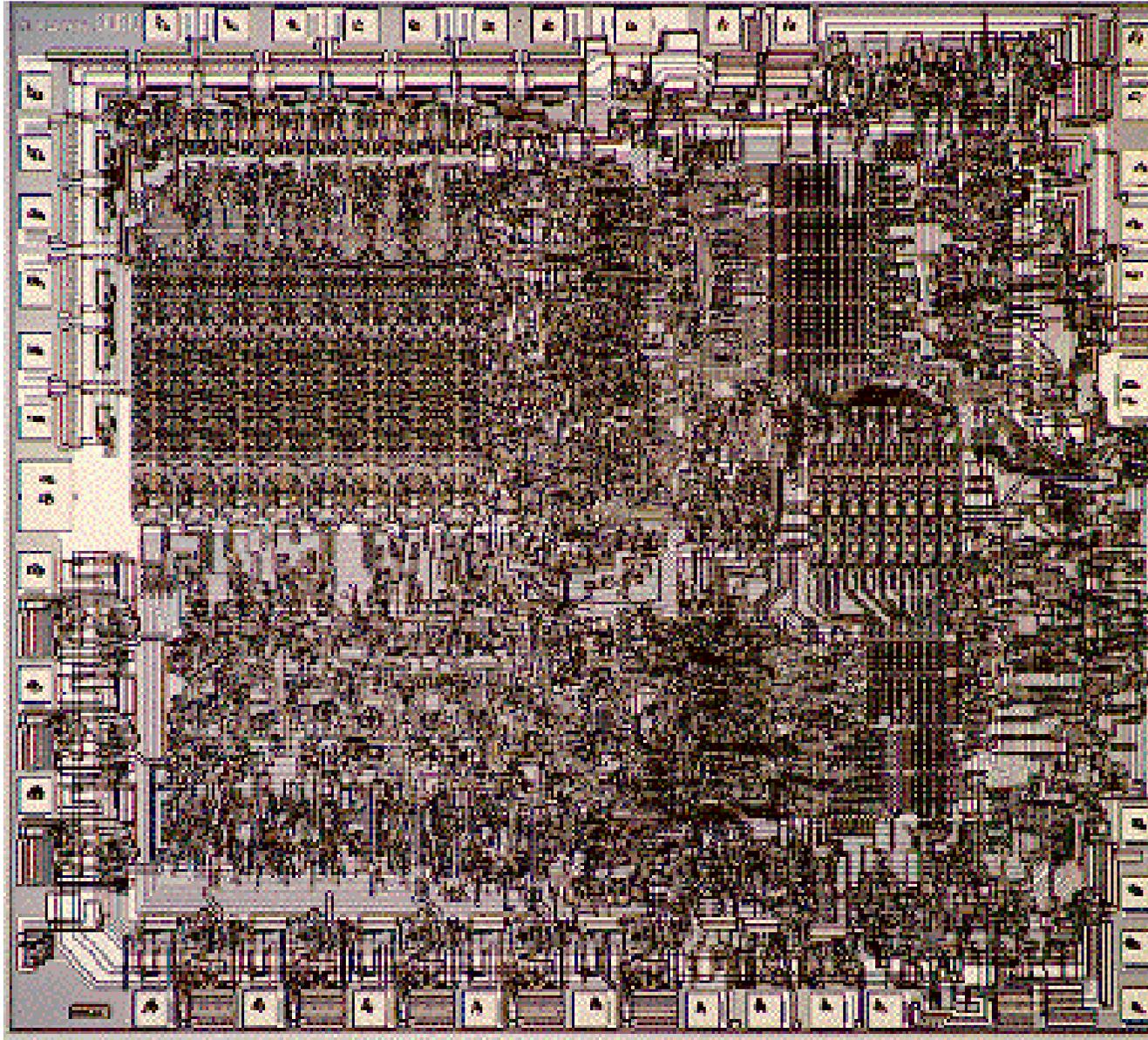
Calculadora multi-funcional –
Babbage (1822)



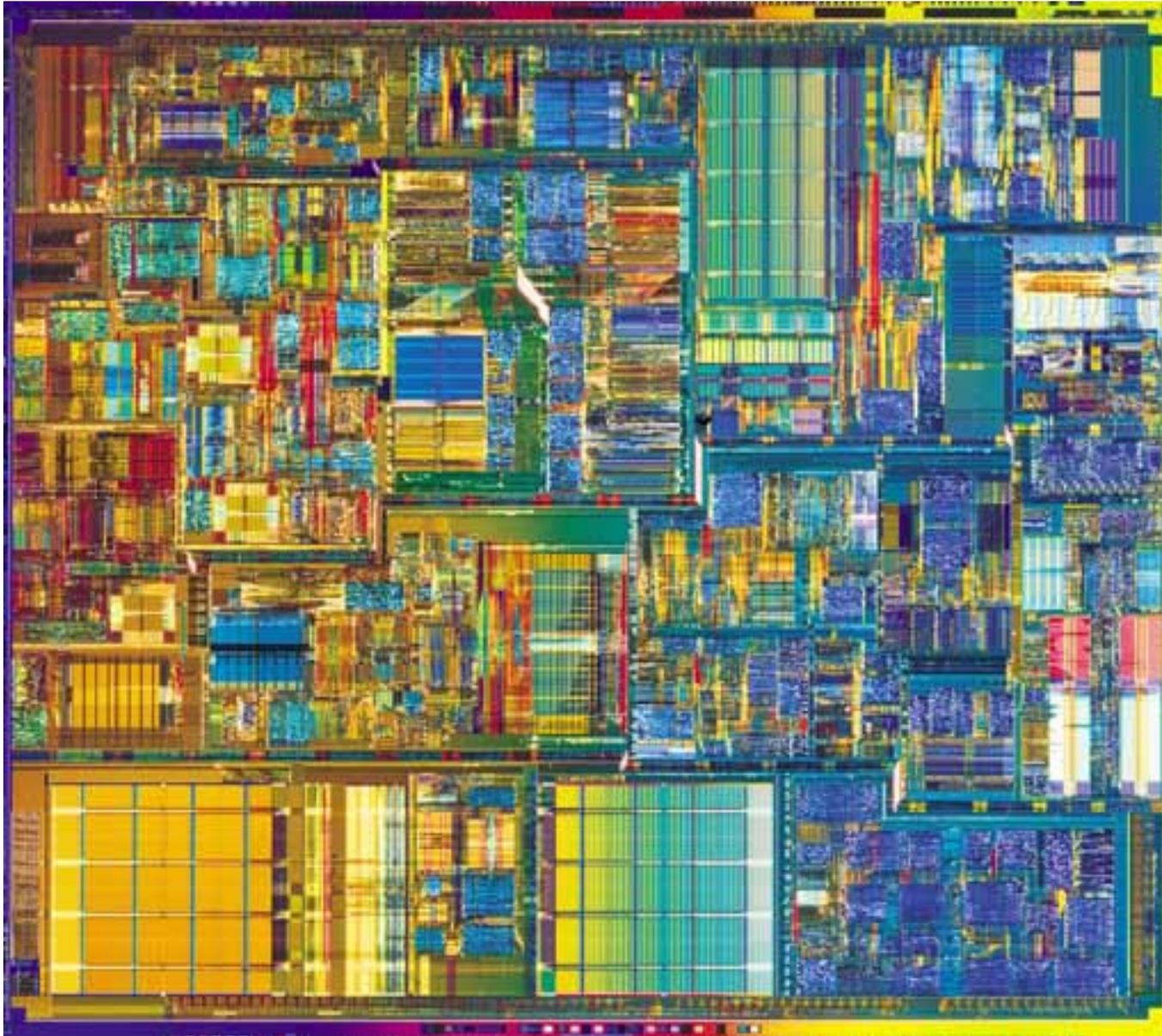
ENIAC - U.S. Army (1946)



Microprocessor Intel: 1971



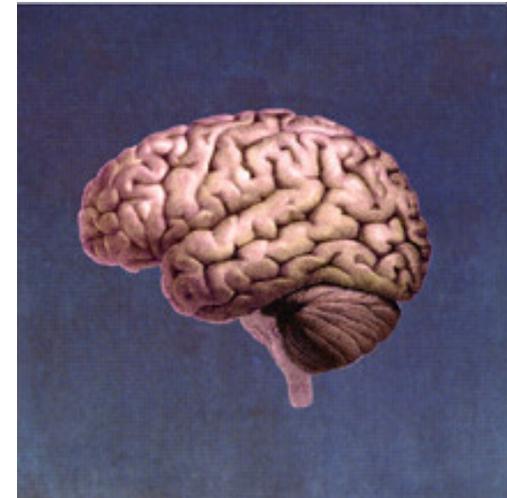
Microprocessor Intel: 2000



Cérebro

De 100 milhões a 100 mil milhões de milhões instruções por segundo (MIPS)

A lei de Moore prevê que os computadores atingirão o poder de cálculo do cérebro antes de 2017!

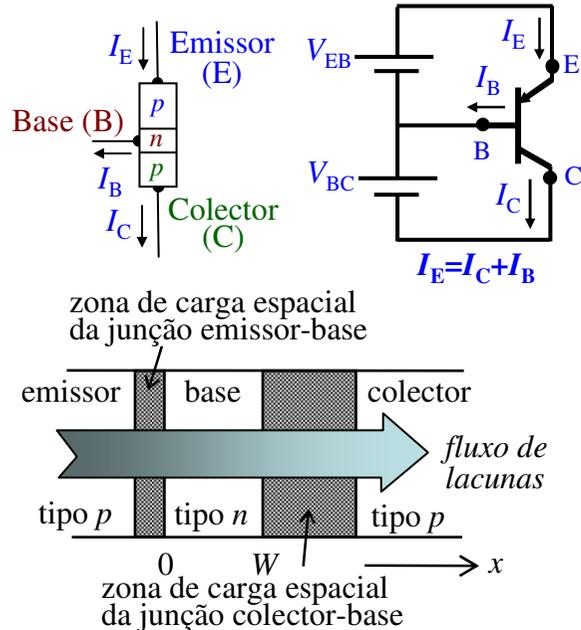


Princípio de Funcionamento do Transístor Bipolar *pnp*

Tendo em conta que a estrutura de um transístor bipolar corresponde a duas junções *pn* “em série”, com a região *n* em comum. (Aconselha-se a consulta das notas sobre junções *pn* e do guia do 3º trabalho.) Uma vez que o transístor *npn* é tratado no guia do 5º trabalho, analisa-se aqui, apenas, o funcionamento do transístor *pnp*. No entanto, todas as considerações são válidas para transístores *npn*, trocando, apenas, o papel dos electrões e das lacunas, e invertendo as polaridades das ddp e os sentidos de corrente.

A região de material SC comum às duas junções *p-n* é chamada **base**. As outras duas regiões são designadas **emissor** e **colector**. Embora estas duas últimas regiões tenham condutividade do mesmo tipo, têm, normalmente, propriedades físicas e eléctricas diferentes, resultantes de graus de dopagem diferentes. As dimensões são, também, geralmente diferentes. A junção entre o emissor e a base é designada por **junção emissor-base (JEB)**; a outra é designada **junção colector-base (JCB)**.

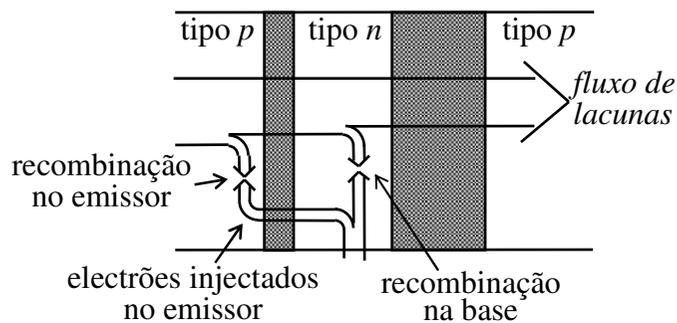
Quando o transístor *pnp* é utilizado como elemento de controlo ou como amplificador, a junção emissor-base está polarizada directamente, e a junção colector-base está polarizada inversamente. Nestas circunstâncias, diz-se que o transístor está a operar na região activa/linear ou modo activo/linear.



No modo activo, a operação do transístor *pnp* pode ser entendido em termos do fluxo de portadores minoritários (na base) através da fina zona da base entre as duas junções. Quando a junção EB está polarizada directamente (ver figura), são injectadas lacunas na base (onde são portadores minoritários) vindas do emissor (onde são portadores maioritários) - **corrente do emissor** - tal como num díodo de junção *pn* polarizado directamente. Ao contrário do que acontece no díodo, onde a grande maioria destas lacunas se recombinam com os electrões existentes na região *n*, no transístor a quase totalidade das lacunas vindas do emissor consegue atingir a junção CB, que em operação normal está polarizada inversamente (ver figura).

A corrente do emissor depende fortemente da ddp na junção emissor-base pelas mesmas razões que a corrente directa de um díodo depende fortemente da sua ddp; reduções pequenas da altura da barreira de potencial da junção fazem com que um número elevado de portadores maioritários esteja disponível para injeção, de forma que a concentração de portadores nos extremos da zona de carga espacial cresce exponencialmente com a ddp directa na junção.

Princípio de Funcionamento do Transístor Bipolar *pnp*



Ao atingirem a zona espacial de carga da junção colector-base (CB), as lacunas são arrastadas, pelo campo eléctrico existente na junção CB, para o colector, que está a um potencial inferior ao da base: **corrente do colector**. Como no modo activo a junção colector-base está polarizada inversamente não há injeção de portadores negativos da base para o emissor e de lacunas do emissor para a base, e as lacunas provenientes da base dominam a corrente do colector. A pequena fracção de lacunas vindas do emissor que não chega à junção colector-base, recombina-se com os electrões de condução (majoritários) da base, que são repostos pela fonte de polarização da junção emissor-base: **corrente da base**.

Normalmente, a corrente de base é muito inferior à corrente do colector, que é, portanto, praticamente igual à corrente do emissor. A corrente de base é necessária para compensar a recombinação que ocorre na base e para manter a injeção dos portadores majoritários da base em direcção ao emissor. A corrente de base é, em geral, muito pequena, dado a base ser uma região muito estreita e o tempo de vida dos portadores ser longo devido à pouca dopagem. Acresce ainda que o emissor é bastante mais dopado que a base, minimizando assim a injeção inversa para o emissor. A corrente que flui no trajecto emissor-colector (normal às junções) está sob o controlo directo da ddp na junção EB e é, praticamente, independente da ddp na junção CB.

A **corrente no colector** é independente da ddp na junção CB, pelas mesmas razões que a corrente inversa de um díodo é independente da ddp inversa (desde que seja algumas vezes superior a $k_B T/e$). A barreira de potencial na junção CB é suficientemente elevada para bloquear inteiramente o fluxo de portadores das regiões em que são majoritários para as regiões em que são minoritários, enquanto o campo eléctrico associado 'varre' os portadores para fora das regiões em que estão em minoria. A taxa a que os portadores minoritários são 'varridos' depende apenas da taxa com que os portadores minoritários chegam ao limite da região da base do lado do colector, e é independente da intensidade do campo. Assim, não existe dependência da corrente na ddp inversa.

Verifica-se, como no caso do díodo polarizado directamente, que a corrente no colector é controlada, directamente, pela polarização da junção emissor-base, i.e., pela ddp entre o emissor e a base. Contudo, a falta de acoplamento entre a corrente de colector e a ddp colector-base é, apenas, uma aproximação. Os modelos físicos mais completos incluem a dependência da largura da base na ddp colector-base, já que a largura da zona de carga espacial da junção CB depende da sua ddp. À medida que a zona de carga espacial aumenta, com o aumento da ddp inversa, a largura da base diminui.

A designação transístor bipolar é resulta da presença simultânea dos dois tipos de portadores de carga.

Condutividade em semicondutores

A dopagem de um semicondutor não só aumenta a sua condutibilidade, como permite criar um material em que os portadores de carga são, maioritariamente, electrões (n) ou lacunas (p), de acordo com o tipo de impureza. A concentração de dopantes necessária para alterar de forma significativa a condutividade de um semicondutor, quando comparada com a concentração dos átomos nativos do semicondutor, é muito pequena. Por exemplo, a condutibilidade do germânio, a 30 °C, aumenta cerca de 12 vezes, se substituirmos 1 em cada 10^8 átomos de Ge por um átomo de As (elemento com cinco electrões de valência).

Mobilidade eléctrica

Em primeira aproximação, a velocidade de arrastamento v dos portadores de carga num material é directamente proporcional ao campo eléctrico aplicado E . A constante de proporcionalidade chama-se **mobilidade eléctrica do portador de carga**, μ . Num semicondutor tem-se: $v_n = -\mu_n E$, para os electrões, e $v_p = -\mu_p E$, para os vazios. Em geral, os valores das mobilidades μ_n e μ_p são muito diferentes.

A **densidade de corrente** J ($=I/A$ [A/m²]) num semicondutor, em resultado da aplicação de um campo eléctrico, é dada por:

$$J = J_n + J_p = e(n\mu_n + p\mu_p)E = \sigma E,$$

onde $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$ representa a condutividade eléctrica do semicondutor. Num semicondutor intrínseco temos $n_n = p_p = n_i$; num semicondutor extrínseco tipo n (p), a concentração de electrões (vazios) na BC (BV) é superior à concentração de vazios (electrões) na BV (BC). Num semicondutor tipo n , os electrões são os **portadores majoritários** (os vazios são minoritários); num semicondutor tipo p , os vazios são os **portadores majoritários** (e os electrões são os portadoras minoritários).

Condutividade em semicondutores

A **densidade de corrente** J ($=I/A$ [A/m^2]) num semicondutor, em resultado da aplicação de um campo eléctrico, é dada por: $J=J_n+J_p=e(n\mu_n + p\mu_p)E=\sigma E$,

onde $\sigma=e(n\mu_n + p\mu_p)$ representa a condutividade eléctrica do semicondutor. Num semicondutor intrínseco temos $n_n=p_p=n_i$; num semicondutor extrínseco tipo n (p), a concentração de electrões (vazios) na BC (BV) é superior à concentração de vazios (electrões) na BV (BC). Num semicondutor tipo n , os electrões são os **portadores majoritários** (os vazios são minoritários); num semicondutor tipo p , os vazios são os **portadores majoritários** (e os electrões são os portadoras minoritários).

A concentração de portadores também pode ser alterada, fazendo incidir no material radiação electromagnética e/ou variando a temperatura do material. A radiação incidente altera a condutibilidade eléctrica do material, pois os fotões absorvidos geram pares electrão-lacuna. O processo inverso, **recombinação radiativa**, em que electrão e lacuna se aniquilam dando origem a um fotão, tem como efeito a diminuição do nº de portadores de carga livres.

Contudo, nem todas as recombinações electrão-lacuna são radiativas, isto é, dão origem à emissão de luz: **recombinações não-radiativas**. As recombinações não-radiativas traduzem-se numa variação da temperatura do cristal devidos à geração/aniquilação de modos de vibração da rede cristalina (**fonões**). O **fonão** corresponde ao *quantum* de energia térmica da rede cristalina.

Estas alterações da condutibilidade podem ser monitorada através de eléctrodos ligados à amostra, detectando a variação da resistência do material: ambos os fenómenos de recombinação são empregues em detectores ópticos e/ou térmicos.

Física nuclear

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Prof. MARCELO POLACHINI

© Quimicatual (2000) - todos os direitos reservados

www.quimicatual.com.br

IA 1	CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS																VIIIA 18							
1	Hidrogênio 1,00784 (7) H																	Hélio 4,002602 (2) He						
2	Li 6,941 (2) Li	Be 9,012182 (3) Be																	Boro 10,811 (7) B	Carbono 12,0107 (8) C	Nitrogênio 14,0067 (2) N	Oxigênio 15,9994 (3) O	Fluor 18,9984032(5) F	Neônio 20,1797 (6) Ne
3	Na 22,989770 (2) Na	Magnésio 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	Árgônio 39,948 (1) Ar						
4	K 39,0983 (1) K	Ca 40,078 (4) Ca	Escândio 44,955910 (8) Sc	Tiânio 47,867 (1) Ti	Vanádio 50,9415 (1) V	Cromo 51,9961 (6) Cr	Manganês 54,938049 (9) Mn	Ferro 55,845 (2) Fe	Cobalto 58,933200 (9) Co	Níquel 58,6934 (2) Ni	Cobre 63,546 (3) Cu	Zinco 65,39 (2) Zn	Gálio 69,723 (1) Ga	Germânio 72,64 (1) Ge	Arsênio 74,92160 (2) As	Selênio 78,96 (3) Se	Bromo 79,904 (1) Br	Criptônio 83,80 (1) Kr						
5	Rb 85,4678 (3) Rb	Estrôncio 87,62 (1) Sr	Ítrio 88,90585 (2) Y	Zircônio 91,224 (2) Zr	Nióbio 92,90638 (2) Nb	Molibdênio 95,94 (1) Mo	Tecnécio [98] Tc	Rutênio 101,07 (2) Ru	Ródio 102,90550 (2) Rh	Paládio 106,42 (1) Pd	Prata 107,8682 (2) Ag	Cádmio 112,411 (8) Cd	Índio 114,818 (3) In	Estanho 118,710 (7) Sn	Antimônio 121,760 (1) Sb	Telúrio 127,60 (3) Te	Iodo 126,90447 (3) I	Xenônio 131,293 (6) Xe						
6	Cs 132,90545 (2) Cs	Bário 137,327 (7) Ba	Lantânio 138,90549 (2) La	Háfnio 178,49 (2) Hf	Tântalo 180,9479 (1) Ta	Tungstênio 183,84 (1) W	Rênio 186,207 (1) Re	Osmio 190,23 (3) Os	Írídio 192,222 (3) Ir	Platina 195,078 (2) Pt	Ouro 196,96655 (2) Au	Mercurio 200,59 (2) Hg	Tálio 204,3833 (2) Tl	Chumbo 207,2 (1) Pb	Bismuto 208,98038 (2) Bi	Polônio [209] Po	Astato [210] At	Rádônio [222] Rn						
7	Fr [223] Fr	Rádio [226] Ra	Actínio [227] Ac	Rutherfordio [261] Rf	Dúbnio [262] Db	Seabórgio [263] Sg	Bóhrio [264] Bh	Hássio [265] Hs	Mitnério [266] Mt	Ununílio [269] Uun	Ununílio [272] Uuu	Ununílio [277] Uub		Ununquádio [285] Uuq										

Magnésio
24,305

Nome do Elemento
Massa Atômica
(relativa ao isótopo
¹²C = 12,000... u)

Símbolo
Estado Físico
a 25°C e 1 atm

Sólido
Líquido
Gasoso
[estado físico]

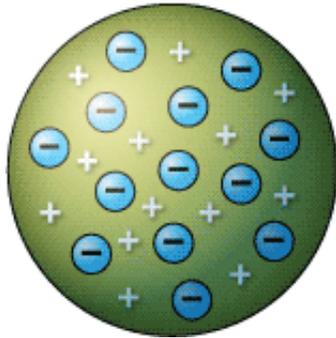
Número Atômico (Z)

Lantânio 138,9055 (2) La	Cério 140,116 (1) Ce	Praseodímio 140,90785 (2) Pr	Neodímio 144,24 (3) Nd	Promécio [145] Pm	Samário 150,36 (3) Sm	Európio 151,964 (1) Eu	Gadolínio 157,25 (3) Gd	Térbio 158,92534 (2) Tb	Disprósio 162,50 (3) Dy	Hólmio 164,93032 (2) Ho	Érbio 167,259 (3) Er	Túlio 168,93421 (2) Tm	Íterbio 173,04 (3) Yb	Lutécio 174,967 (1) Lu
Actínio [227] Ac	Tório 232,0381 (1) Th	Protactínio 231,03588 (2) Pa	Urânio 238,02891 (3) U	Netúnio [237] Np	Plutônio [244] Pu	America [243] Am	Cúrio [247] Cm	Berquílio [247] Bk	Califórnio [251] Cf	Einstênio [252] Es	Férmio [257] Fm	Mendelévio [258] Md	Nobélio [259] No	Laurêncio [262] Lr

 Hidrogênio
 Metais
 Semimetais
 Ametais
 Gases Nobres
 Lantanóides
 Actinóides

* 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)

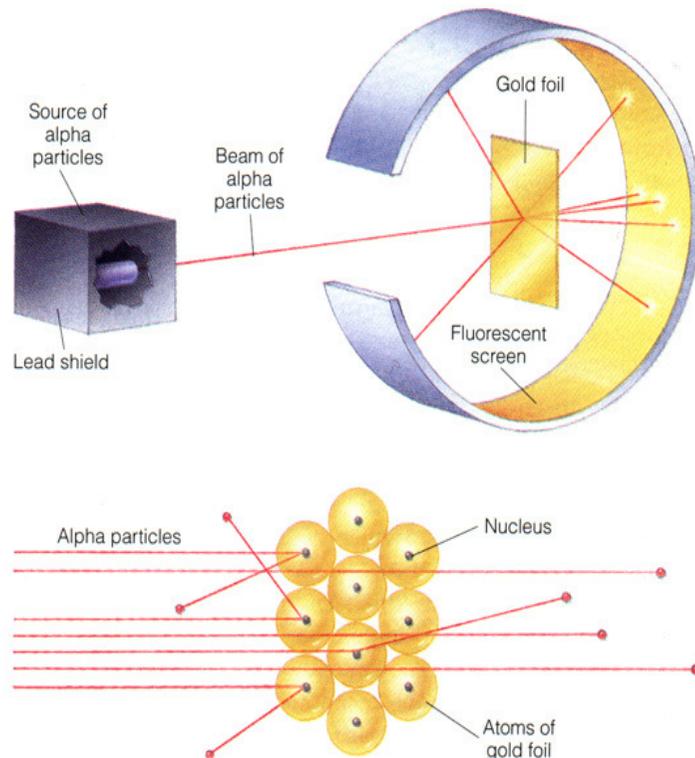
Revisão: Modelos do átomo e experiência de Rutherford



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



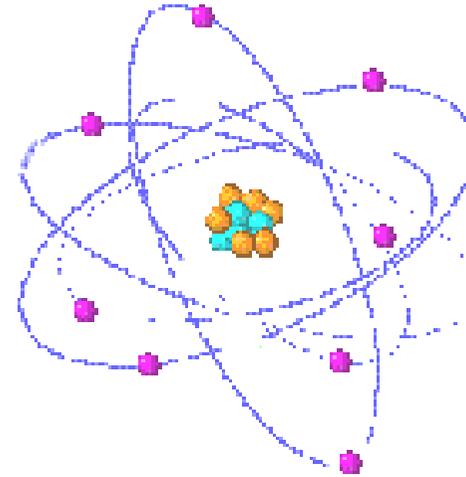
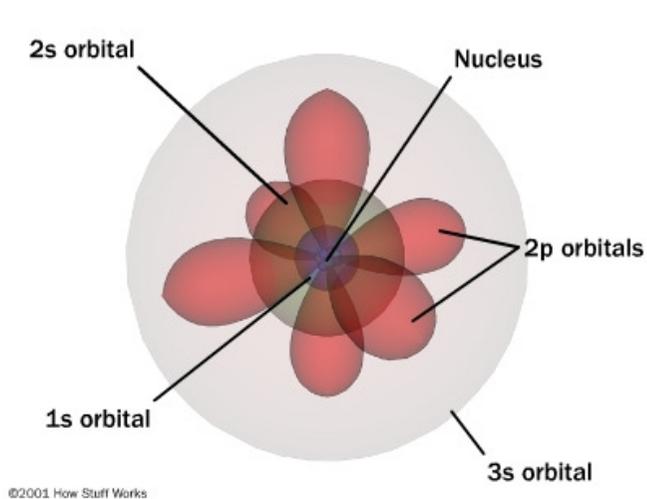
O espalhamento de electrões pelo núcleo permite obter informação sobre a sua dimensão e distribuição de carga (o electrão é uma partícula *pontual*, podendo penetrar no núcleo) - Hofstadter, R., et al., Phys. Rev. 92, 978 (1953).

$$r_{\text{nucl}} = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m},$$

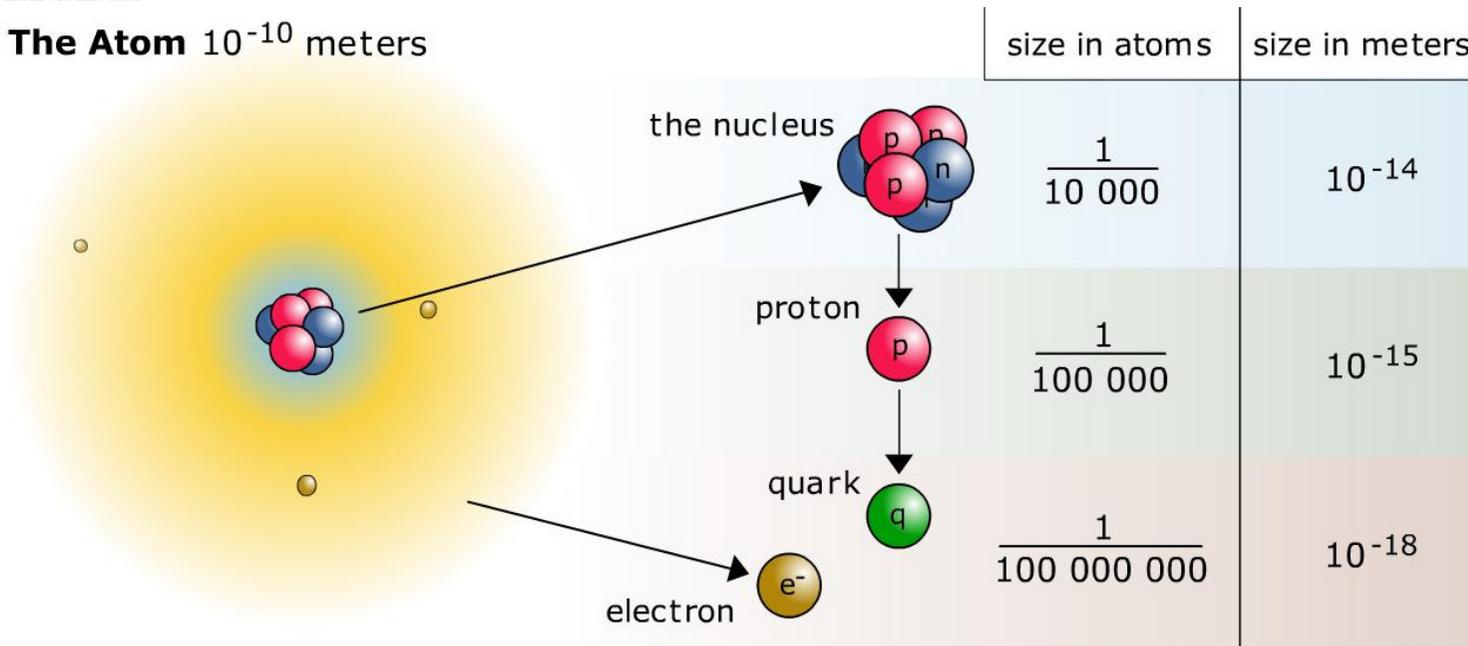
$A \equiv$ número de massa,

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

Modelo *actual* do átomo



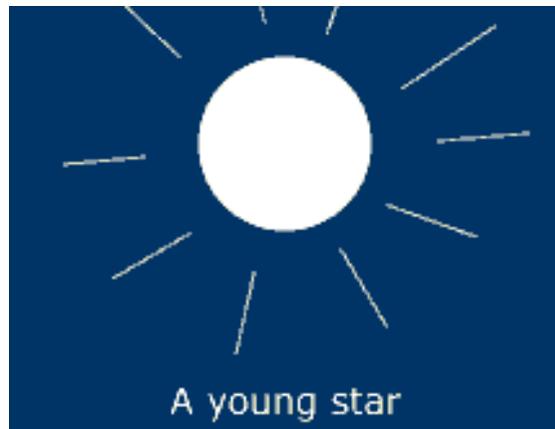
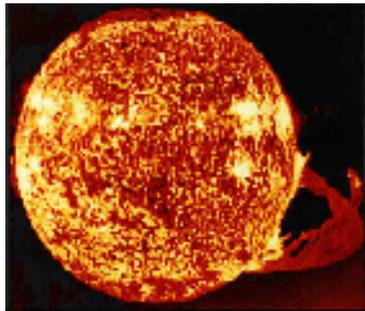
The Atom 10^{-10} meters



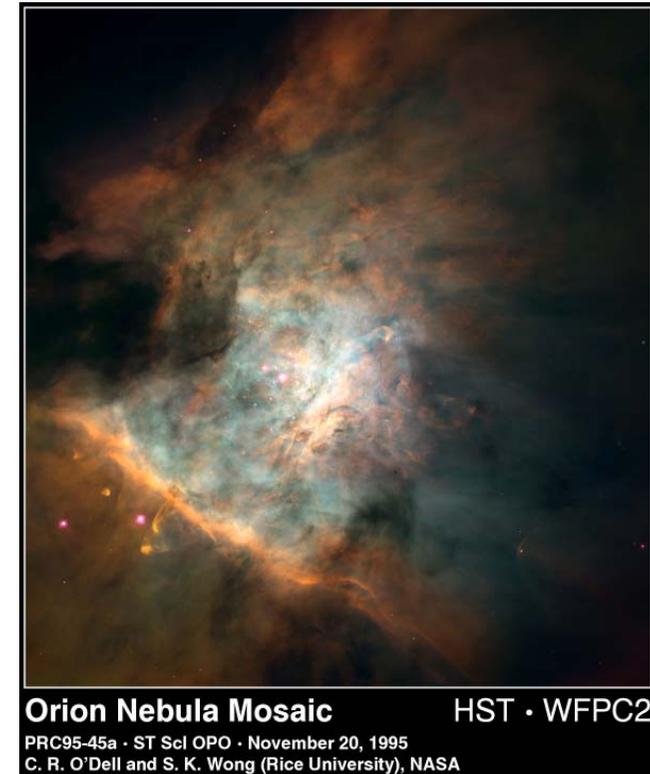
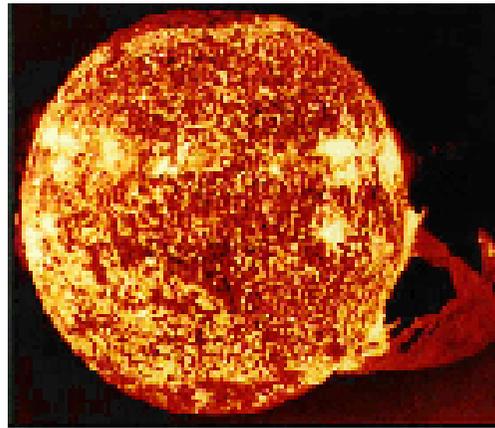
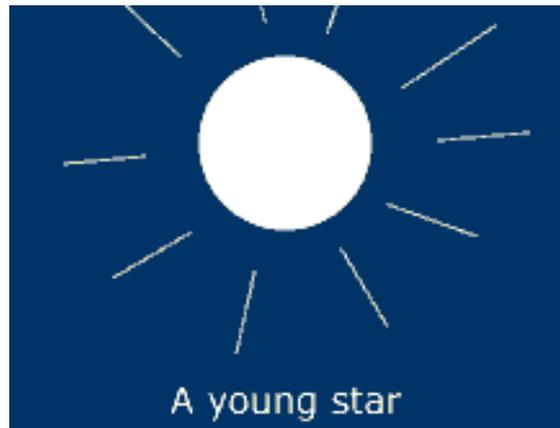
$$r_{\text{nucl}} = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m}, \quad A \equiv \text{número de massa}, \quad \rho_{\text{nucl}} \approx 2,3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$$

15-09-2009

Onde são produzidos os átomos?



Mas como e onde se formaram os átomos?



Há vários processos astrofísicos que se julga serem os responsáveis pela nucleosíntese. A maioria destes ocorrem na matéria quente dentro das estrelas. Os sucessivos processos de fusão nuclear que ocorrem dentro das estrelas são conhecidos como queima de hidrogénio (via a cadeia próton-próton) ou o ciclo CNO, a fusão do hélio , a combustão do carbono , a combustão do

neón , a combustão do oxigénio e a combustão do silício . Estes processos podem criar elementos como o ferro ou o níquel na região em que os isótopos têm a energia de ligação por nucleão mais elevada. Os elementos mais pesados podem-se formar dentro das estrelas pelo processo de captura de neutrões conhecido como processo-S ou na periferia explosiva, como o das supernovas mediante vários processos. Alguns dos mais importantes são o processo-R que provoca as capturas rápidas de neutrões, o processo rp que provoca as capturas rápidas de prótons e o processo p (algumas vezes conhecido como *processo gama*) que provoca a foto-desintegração dos núcleos existentes.

Onde e como são *feitos* os átomos?

A **nucleo-síntese** é o processo de criação de novos núcleos atômicos a partir dos núcleos pré-existentes (protões e neutrões) para chegar a gerar o restante dos elementos da [tabela periódica](#). Os núcleos primogénitos pré-existentes se formaram a partir do [plasma de quarks-gluons](#) do [Big Bang](#) quando o universo se esfriou abaixo dos dez milhões de graus. A este processo chama-se nucleogénese, a geração de núcleos no Universo. A consequente nucleosíntese dos elementos (incluindo todo o carbono, todo o oxigénio, etc.) ocorre principalmente no interior das [estrelas](#) por [fusão](#) ou [fissão nuclear](#).

A [nucleo-síntese do Big Bang](#) ocorreu nos primeiros três minutos do Universo e é responsável pelas relações de abundância do H-1 ([prótio](#)), H-2 ([deutério](#)), He-3 e He-4, no Universo [1]. Ainda que o He-4 continue sendo produzido por outros mecanismos (como a fusão estelar e a decaimento alfa) e certas quantidades de H-1 sejam produzidas por cissões e certos tipos de decaimento radioactivo ([emissão de protões](#) e [emissão de neutrões](#)). Grande parte da massa destes isótopos no Universo e todas as quantidades insignificantes de He-3 e deutério produzidas por processos raros (como a [decomposição de racimos](#)), se pensa que são produzidas no [Big Bang](#). Os núcleos destes elementos, junto com alguns de Li-7 se crê que se formaram quando o Universo tinha entre 100 e 300 segundos, depois de que o plasma [quark-gluón](#) primogénito se congelara para formar protões e neutrões.

Devido ao período tão curto em que ocorreu a nucleosíntese do Big Bang antes de ser parada pela expansão e o esfriamento, não se pôde formar nenhum elemento mais pesado que o [lítio](#). Os elementos formados durante este período estavam em estado de plasma e não se puderam esfriar ao estado de átomos neutros até muito depois.

Onde e como são *feitos* os átomos?

A nucleo-síntese estelar ocorre nas estrelas durante o processo de evolução estelar. É responsável pela geração da maior parte dos elementos leves e medianos e de uma minoria dos elementos pesados por processos de fusão nuclear a partir do H e do He. De particular importância é o carbono, porque sua formação a partir do He é "gargalo" no processo completo. O carbono é também o elemento principal utilizado na produção de neutrões livres nas estrelas, dando base ao processo s que provoca a absorção lenta de neutrões para produzir elementos mais pesados que o ferro e o níquel (Fe-57 e Ni-62). O carbono e outros elementos formados por este processo são também fundamentais para a vida.

Os produtos da nucleo-síntese estelar se distribuem geralmente no Universo como nebulosas planetárias ou através de vento solar. A primeira prova directa de que a nucleo-síntese ocorre nas estrelas foi a detecção de tecnécio na atmosfera de uma gigante vermelha em princípios dos anos 1950.^[2] Como o tecnécio é radioactivo, com uma vida média muito menor que a idade das estrelas, sua abundância tem que reflectir sua criação nessa estrela durante seu tempo de vida.

Menos dramáticas mas igualmente convincentes são as grandes sobre-abundâncias de certos elementos estáveis específicos numa atmosfera estelar. Um caso historicamente importante foi a observação de abundâncias de bário entre 20-50 vezes maior que nas estrelas não desenvolvidas, que é a prova da existência do processo s dentro dessa estrela. Provas mais recentes centram-se na composição isotópica ou na poeira de estrelas, em grãos sólidos condensados dos gases de estrelas individuais que tenham sido extraídos de meteoritos.

A poeira de estrelas é um componente da poeira interestelar. As composições isotópicas medidas demonstram muitos aspectos da nucleo-síntese dentro das estrelas desde que as massas de poeira estelar se condensam.

Onde e como são *feitos* os átomos?

A nucleossíntese de supernovas produz os elementos mais pesados que o ferro mediante uma intensa sequência de reacções nucleares que tipicamente duraram apenas uns segundos durante a explosão do coração da supernova. Nas periferias explosivas de supernovas, os elementos entre o silício e o níquel se sintetizam por fusão rápida. Também dentro as supernovas podem ocorrer processos de nucleo-síntese, como o processo r, no qual se produzem muitos isótopos ricos em neutrões de elementos mais pesados que o níquel por absorção rápida de neutrões livres lançados durante as explosões. É a responsável pelo nosso conjunto natural de elementos radioactivos, como o Urânio e o Tório, como muitos dos isótopos ricos em neutrões de cada elemento pesado.

O processo rp implica na absorção rápida de protões livres, assim como neutrões, mas o papel que exerce é menos seguro. A nucleo-síntese explosiva ocorre demasiado rápida para que a decomposição radioactiva incremente o número de neutrões, de tal maneira que muitas abundâncias de isótopos têm o mesmo número de protões e neutrões ao ser sintetizados. Como o Ti-44, Cr-48, Fe-52 e Ni-56, todos eles se decompõe depois da explosão para criar isóbaros abundantes estáveis em cada massa atómica. Muitas decomposições estão acompanhadas pela emissão de feixes de raios gama que permitem identificar o isótopo que acaba de ser criado na explosão.

A prova mais convincente da nucleo-síntese explosiva em supernovas ocorreu em 1987 quando se detectaram os feixes de raios gama emergindo da supernova 1987A. Os feixes de raios gama identificam o Co-56 e o Co-57, cuja vida média radioactiva limita sua idade em torno de um ano, provando que o Fe-56 e o Fe-57 se criaram a partir de pais radioactivos. Este feito de astronomia nuclear foi previsto em 1969^[4] como um caminho para confirmar a nucleo-síntese explosiva dos elementos e que as previsões desempenham um papel importante nos planos para o êxito do Observatório de Raios Gama Compton da NASA.

Outras provas da nucleo-síntese explosiva se encontram nos grãos de poeira estelar que condensados no interior das supernovas se expandiram e se seguiram. Em particular, o Ti-44 radioactivo foi medido para ser muito abundante dentro dos grãos da poeira de estrelas das supernovas no momento que se condensaram durante a expansão das supernovas,^[5] confirmando uma previsão de 1975 para identificar a poeira de estrelas de supernovas. Outras relações não usuais de isótopos nestes grânulos revelam aspectos específicos da nucleo-síntese explosiva.

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 nêutrons),

massa do núcleo: $m_{\text{nuc}} \approx A \cdot u$, $1 \text{ u} = 1.66 \times 10^{-27}$ kg, $\rho_{\text{nuc}} = \frac{m_{\text{nuc}}}{V_{\text{nuc}}} \approx 2,3 \times 10^{17}$ kg/m³

Table 43.1 Compositions of Some Common Nuclides

Nucleus	Mass Number (Total Number of Nucleons), A	Atomic Number (Number of Protons), Z	Neutron Number, $N = A - Z$
${}^1_1\text{H}$	1	1	0
${}^2_1\text{D}$	2	1	1
${}^3_1\text{T}$	3	1	2
${}^4_2\text{He}$	4	2	2
${}^6_3\text{Li}$	6	3	3
${}^7_3\text{Li}$	7	3	4
${}^9_4\text{Be}$	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

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 (${}^1_1\text{H}$)	1	0	1.007825	1
Deuterium (${}^2_1\text{H}$)	1	1	2.014102	2
Tritium (${}^3_1\text{H}$)	1	2	3.016049	3
Helium (${}^3_2\text{He}$)	2	1	3.016029	3
Helium (${}^4_2\text{He}$)	2	2	4.002603	4
Lithium (${}^6_3\text{Li}$)	3	3	6.015122	6
Lithium (${}^7_3\text{Li}$)	3	4	7.016004	7
Beryllium (${}^9_4\text{Be}$)	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).

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

Isótopo: átomos que têm o mesmo número atômico (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») | **Estar atento às notícias sobre o Irã/nuclear.**

Spin nuclear e momentos magnéticos

Assim como os electrões, os prótons e os neutrões são partículas de spin $\frac{1}{2}$.

A magnitude do momento angular de spin $|\vec{S}| = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}\hbar = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$, com $S_z = \pm \frac{1}{2}$.

O valor do momento angular total do núcleo é $|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$, com $J_z = m_j\hbar$.

Se o número de nucleões A for par, j é um inteiro; se for ímpar j é um semi-inteiro.

Todos os núcleos em que Z e N são pares têm $\vec{J}=0$.

O magnetão nuclear é $\mu_n = \frac{e\hbar}{2m_p} \approx 5.05 \times 10^{-27}$ J/T. As componentes z dos momentos

magnéticos de spin do próton e do neutrão são: $|\mu_{sz}|_p = 2.7928\mu_n$ e $|\mu_{sz}|_n = 1.9130\mu_n$,

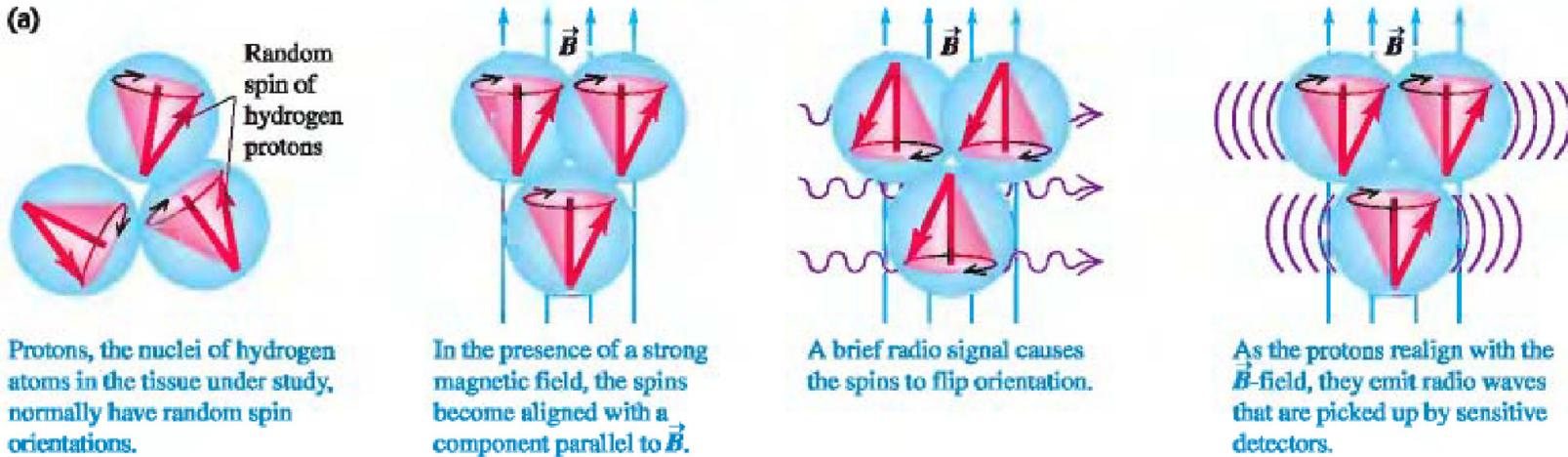
respectivamente. \Rightarrow o neutrão e o próton não são partículas elementares (são constituídos por quarks).

Quando um núcleo é colocado numa região onde existe um campo magnético \vec{B} , a energia de interacção é: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B$, que está quantizada (níveis de energia).

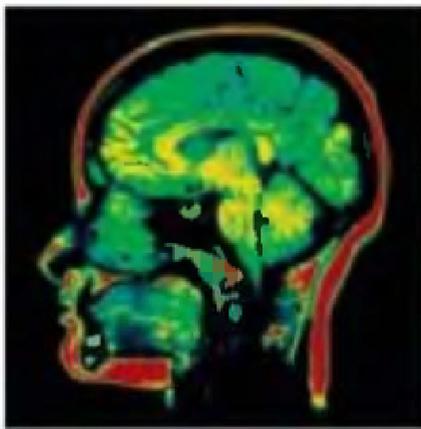
Ressonância magnética nuclear e MRI

43.1 Magnetic resonance imaging (MRI).

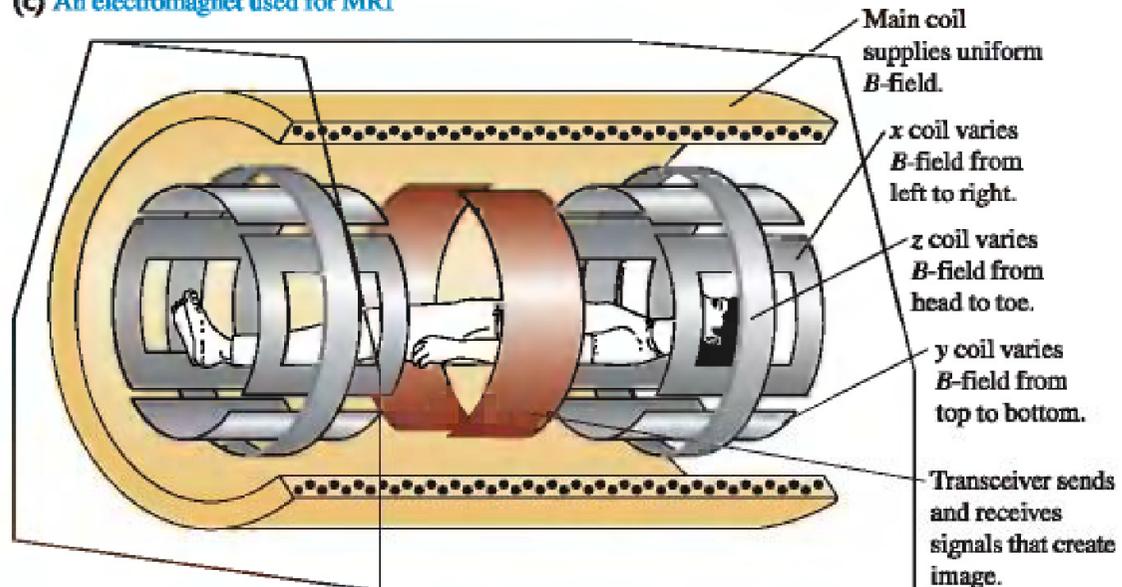
(a)



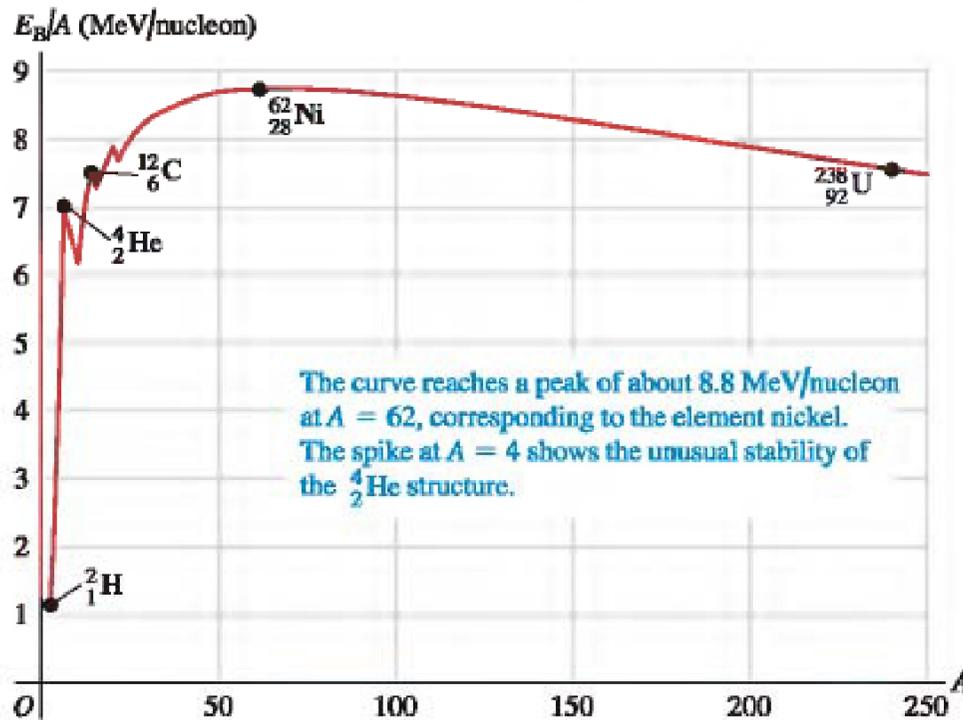
(b) Since \vec{B} has a different value at different locations in the tissue, the radio waves from different locations have different frequencies. This makes it possible to construct an image.



(c) An electromagnet used for MRI



Energia de ligação e *massa* de residual



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

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

Massa residual

$$\Delta m = \frac{E_B}{c^2}, \quad E = \Delta m \cdot c^2$$

Energia de ligação por nucleão

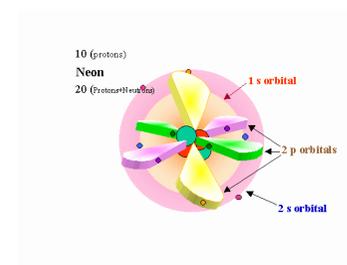
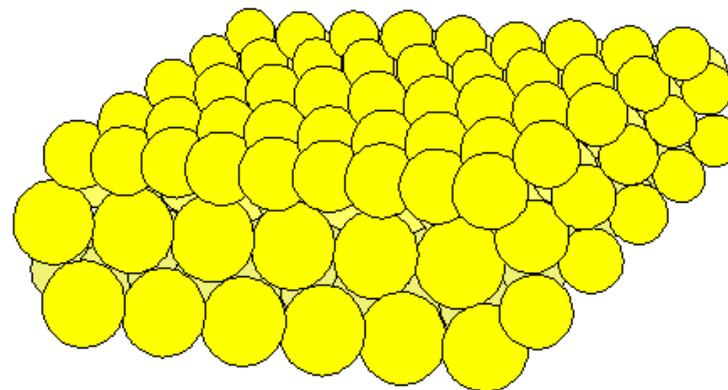
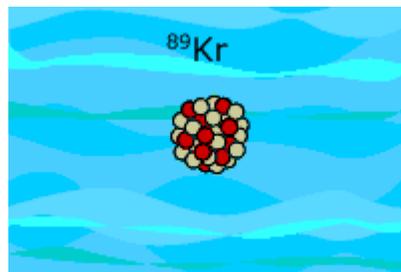
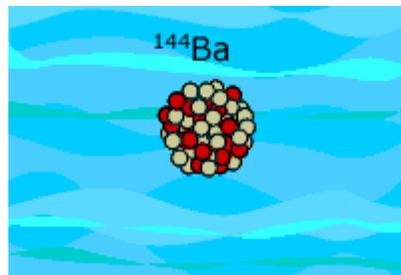
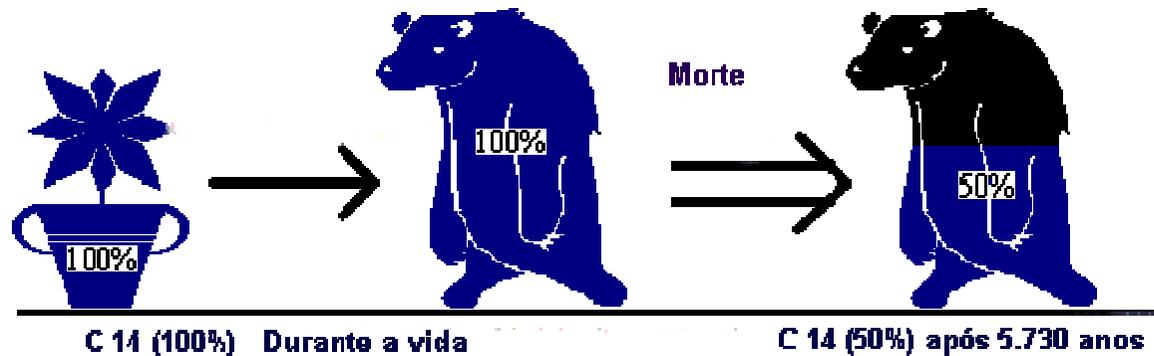
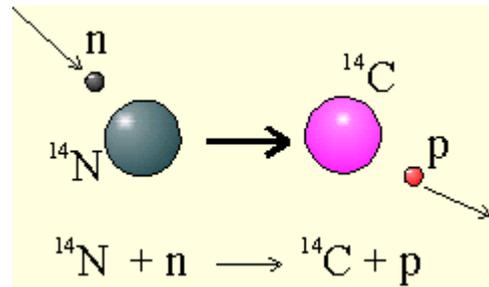
$$E_{B/N} = \frac{E_B}{A}$$

Força nucleares: forças de origem não-electrostática que se exercem entre os nucleões (protões e neutrões) e asseguram a coesão do núcleo atómico; é uma força de curto alcance – limitada 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.

Estabilidade nuclear e radioactividade

Há cerca de 2500 nuclídeos conhecidos, sendo apenas cerca de 300 estáveis

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.



Radioactividade natural

O carbono 14, potássio 40, por exemplo, tornam-nos radioactivos.

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 forma designados pelos nomes alfa, beta e gama.

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).

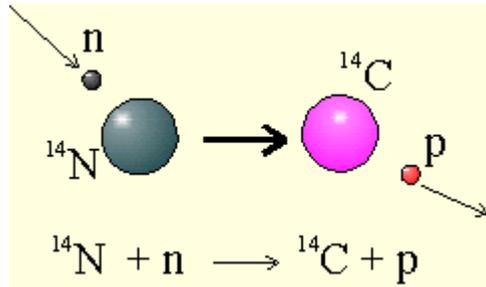
**Beta Than The Rest: C-14
Radioactive Deay**

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



Ver rádón.

Decaimento do carbono 14



Beta Than The Rest: C-14 Radioactive Deay

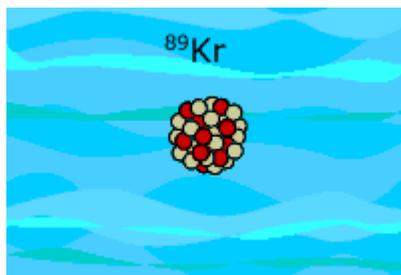
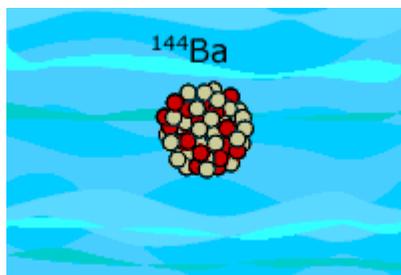
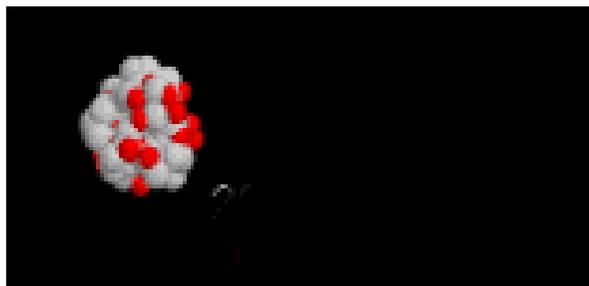
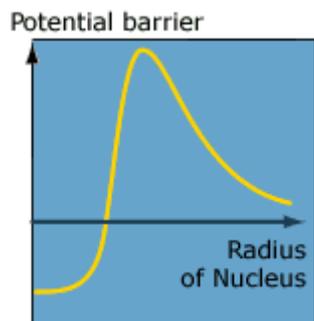
**By: Tom Diab
Science Department
Saline High School**

Decaimentos alfa, beta e gama

Num decaimento radioactivo podem ocorrer simultaneamente emissão de partículas alfa e de raios gama, por exemplo.

**Beta Than The Rest: C-14
Radioactive Decay**

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



Profundidade de penetração



papel

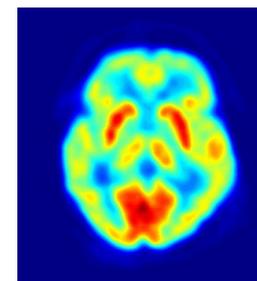
madeira

chumbo

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 fótons gama que se propagam em direcções opostas, sendo detectados e usados para formar imagens 3D da região em análise.

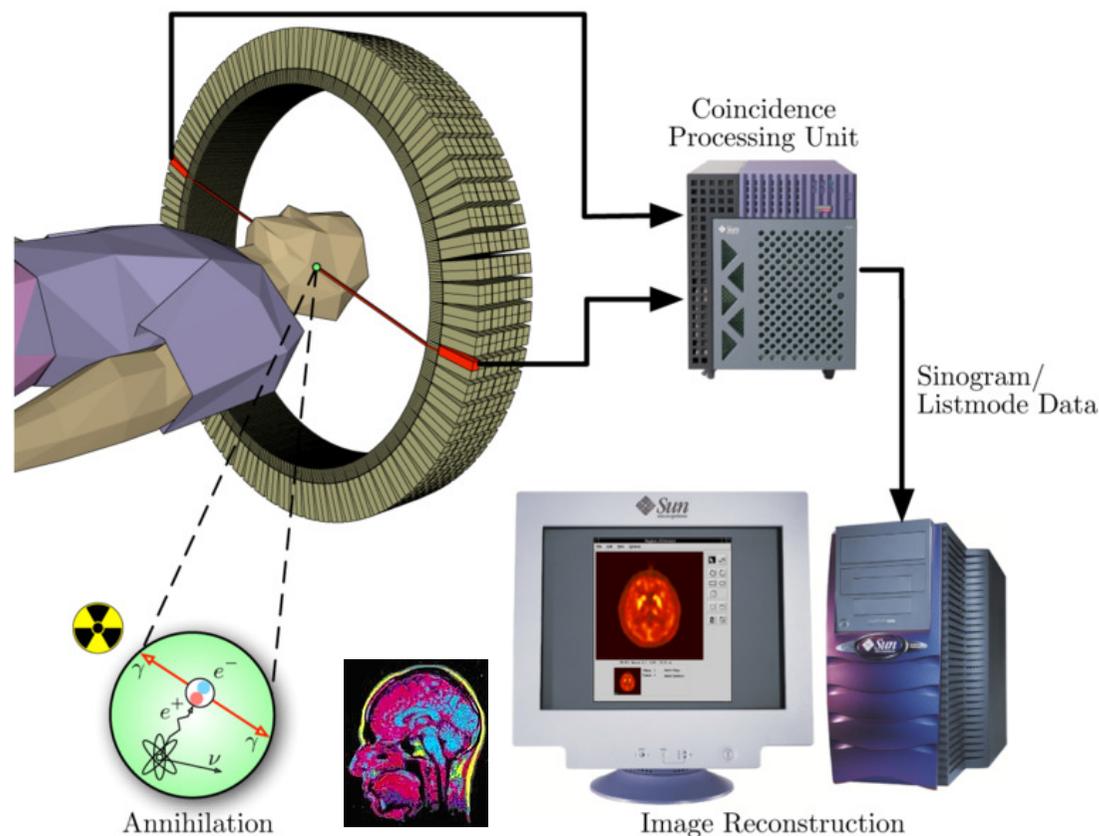
Imagem PET



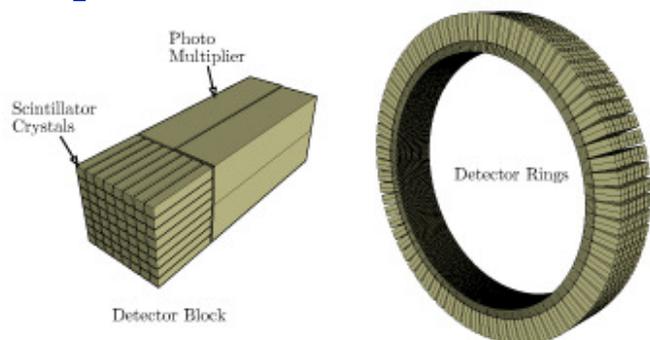
Equipamento PET



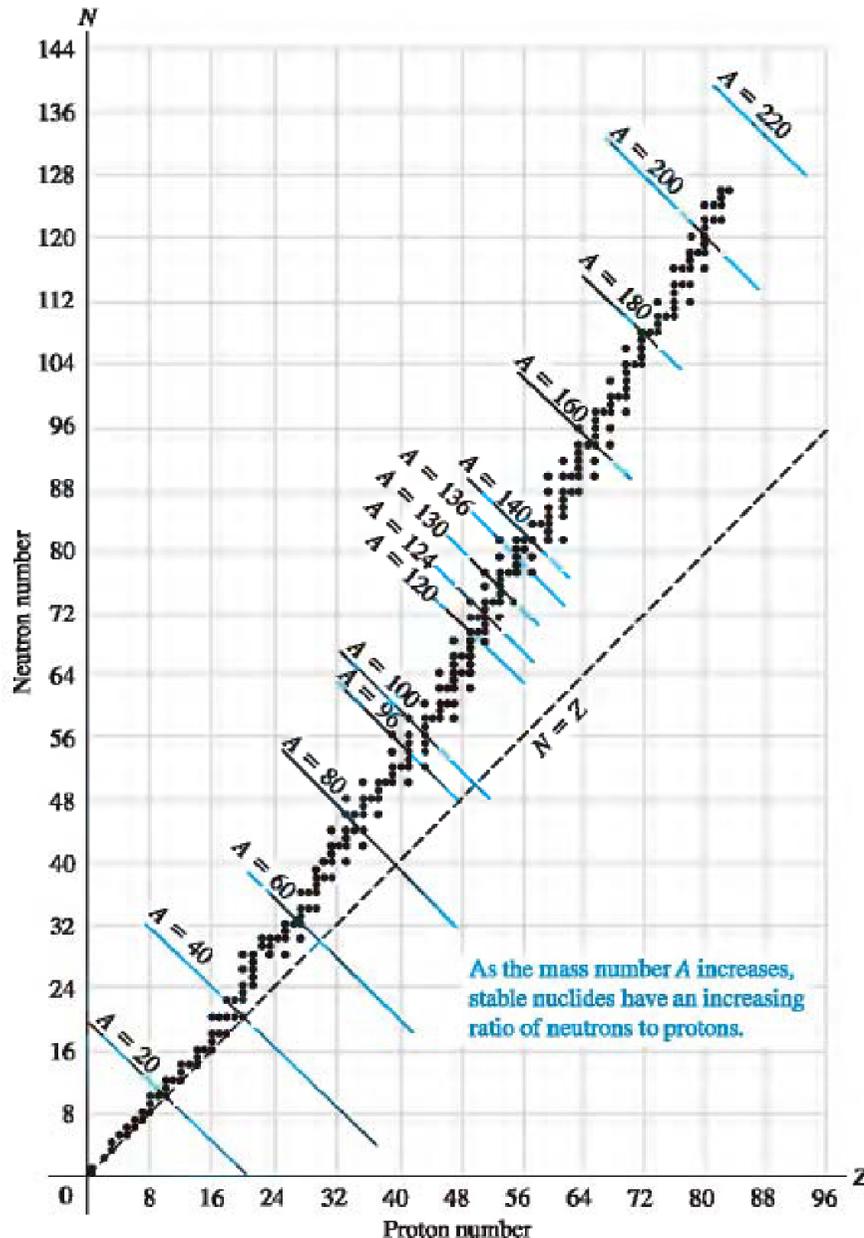
Esquema do processo de aquisição de imagens PET



Esquema do detector PET



Estabilidade nuclear e radioactividade



43.4 Segrè chart showing neutron number and proton number for stable nuclides.

Verifica-se que os núcleos com número de neutrões ou de protões igual a 2, 8, 20, 28, 50, 82, ou 126, são excepcionalmente estáveis. (Ainda não foram observados nuclídeos com $Z=126$.)

Estes números são chamados números mágicos. Nuclídeos em que Z é um número mágico têm um número acima da média de isótopos estáveis.

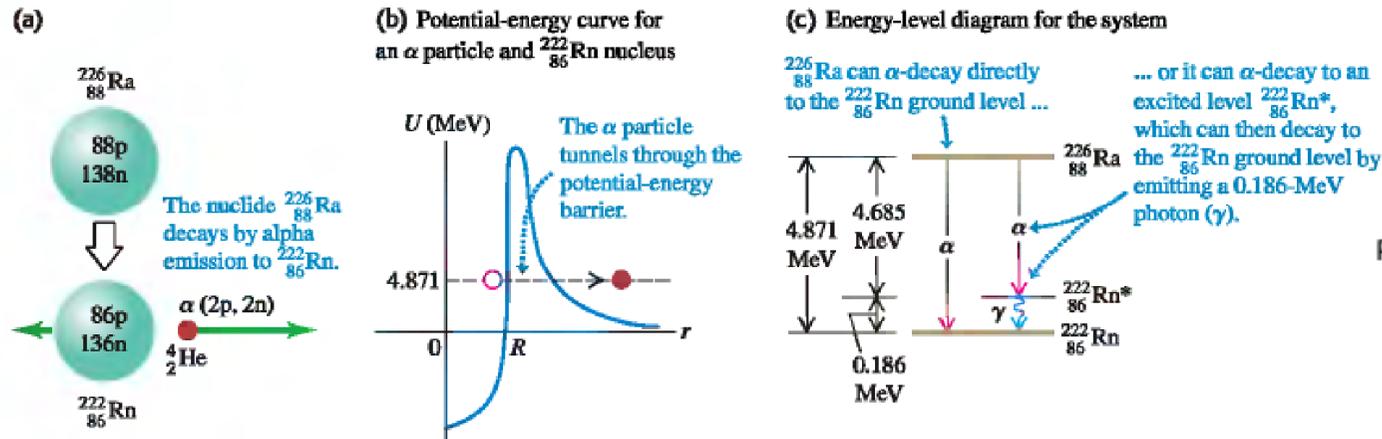
Existem vários nuclídeos com números mágicos duplos, para os quais Z e N são mágicos. Estes nuclídeos têm energias de ligação por nucleão substancialmente mais elevadas do que os seus vizinhos. Todos têm momento angular orbital igual a zero.

Há quatro nuclídeos estáveis com Z e N ambos ímpares: ${}^2_1\text{H}$ ${}^6_3\text{Li}$ ${}^{10}_5\text{B}$ ${}^{14}_7\text{N}$

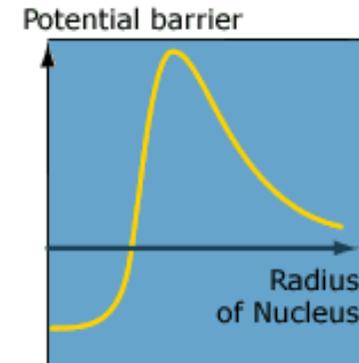
Um núcleo é instável se é demasiado grande.

Decaimento alfa

43.6 Alpha decay of the unstable radium nuclide $^{226}_{88}\text{Ra}$.



alpha decay is possible whenever the mass of the original neutral atom is greater than the sum of the masses of the final neutral atom and the neutral helium-4 atom.



Example 43.5 Alpha decay of radium

You are given the following neutral atomic masses:

$$^{226}_{88}\text{Ra}: 226.025403 \text{ u}$$

$$^{222}_{86}\text{Rn}: 222.017571 \text{ u}$$

Show that alpha emission is energetically possible and that the calculated kinetic energy of the emitted α particle agrees with the experimentally measured value of 4.78 MeV.

EXECUTE: From Table 43.2, the mass of the ^4_2He atom is 4.002603 u. The difference in mass between the original nucleus and the decay products is

$$226.025403 \text{ u} - (222.017571 \text{ u} + 4.002603 \text{ u}) = +0.005229 \text{ u}$$

15-09-2009

Since this is positive, alpha decay is energetically possible. The energy equivalent of 0.005229 u is

$$E = (0.005229 \text{ u})(931.5 \text{ MeV/u}) = 4.871 \text{ MeV}$$

Thus we expect the decay products to emerge with total kinetic energy 4.871 MeV. Momentum is also conserved; if the parent nucleus is at rest, the daughter and the α particle have momenta of equal magnitude p but opposite direction. Kinetic energy is $K = p^2/2m$: Since p is the same for the two particles, the kinetic energy divides inversely as their masses. The α particle gets $222/(222 + 4)$ of the total, or 4.78 MeV, equal to the observed α -particle energy.

Decaimento beta-

Há três tipos de decaimento beta: beta menos, beta mais, e captura de electrão.

Beta- é um electrão: envolve a transformação de um neutrão num protão e num electrão, e numa terceira partícula chamada anti-neutrino (que também é uma partícula de spin $\frac{1}{2}$).

Um neutrão livre tem apenas 15 minutos de vida, decaindo num protão, num electrão e num anti-neutrino (anti-partícula do neutrino).

A velocidade de uma partícula beta resultante deste tipo de decaimento pode atingir cerca de 99.95% da velocidade da luz no vácuo. O espectro de energias de emissão é contínuo.



Beta-minus decay usually occurs with nuclides for which the neutron-to-proton ratio N/Z is too large for stability. In β^- decay, N decreases by 1, Z increases by 1 and A doesn't change. You can use conservation of mass-energy to show that

beta-minus decay can occur whenever the mass of the original neutral atom is larger than that of the final atom.

Decaimento beta+ e captura de electrão

We have noted that β^- decay occurs with nuclides that have too large a neutron-to-proton ratio N/Z . Nuclides for which N/Z is too *small* for stability can emit a *positron*, the electron's antiparticle, which is identical to the electron but with positive charge. (We mentioned the positron in connection with positronium in Section 38.5, and we will discuss it in more detail in Chapter 44.) The basic process, called *beta-plus decay* (β^+), is



where β^+ is a positron and ν_e is the electron neutrino.

Beta-plus decay can occur whenever the mass of the original neutral atom is at least two electron masses larger than that of the final atom;

you can show this using conservation of mass-energy.

The third type of beta decay is *electron capture*. There are a few nuclides for which β^+ emission is not energetically possible but in which an orbital electron (usually in the *K* shell) can combine with a proton in the nucleus to form a neutron and a neutrino. The neutron remains in the nucleus and the neutrino is emitted. The basic process is



You can use conservation of mass-energy to show that

electron capture can occur whenever the mass of the original neutral atom is larger than that of the final atom.

In all types of beta decay, A remains constant. However, in beta-plus decay and electron capture, N increases by 1 and Z decreases by 1 as the neutron-proton ratio increases toward a more stable value. The reaction of Eq. (43.15) also helps to explain the formation of a neutron star, mentioned in Example 43.1.

Decaimento gama

Não é só a energia do átomos que está quantizada. A energia do movimento interno do núcleo também está quantizada.

Um núcleo típico possui um conjunto de níveis de energia, incluindo um estado fundamental (o estado de menor energia) e vários estados excitados.

As energias de excitação de um núcleo são da ordem de 1 MeV (comparar com os alguns eV necessários para excitar um átomo).

Durante as transformações físicas e químicas ordinárias, um núcleo permanece no estado fundamental.

Quando um núcleo é colocado num estado excitado (por colisão com uma partícula de alta energia ou por transformação radioactiva) pode decair para o estado fundamental emitindo um ou mais fotões gama – raios gama – com energias típicas entre 10 keV e 5 MeV.

Este processo designa-se decaimento gama.

CAUTION γ decay vs. α and β decay In both α and β decay, the Z value of a nucleus changes and the nucleus of one element becomes the nucleus of a different element. In γ decay, the element does *not* change; the nucleus merely goes from an excited state to a less excited state. ■

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 - o número de decaimentos durante o intervalo dt . A taxa de decaimento ou actividade da espécime é $-dN(t)/dt$. Quanto maior for o número de núclídeos na amostra maior é a taxa de decaimento, i.e., a actividade é

proporcional a $N(t)$: $-\frac{dN(t)}{dt} = \lambda N(t)$, onde λ é a constante de decaimento da espécime

(nuclídeo em questão) - pode ser interpretada como a probabilidade por unidade de tempo de um nuclídeo decair. 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 nuclídeos que ainda

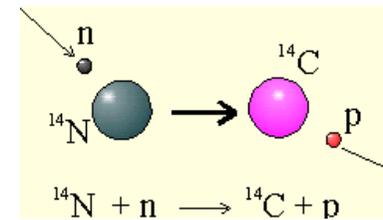
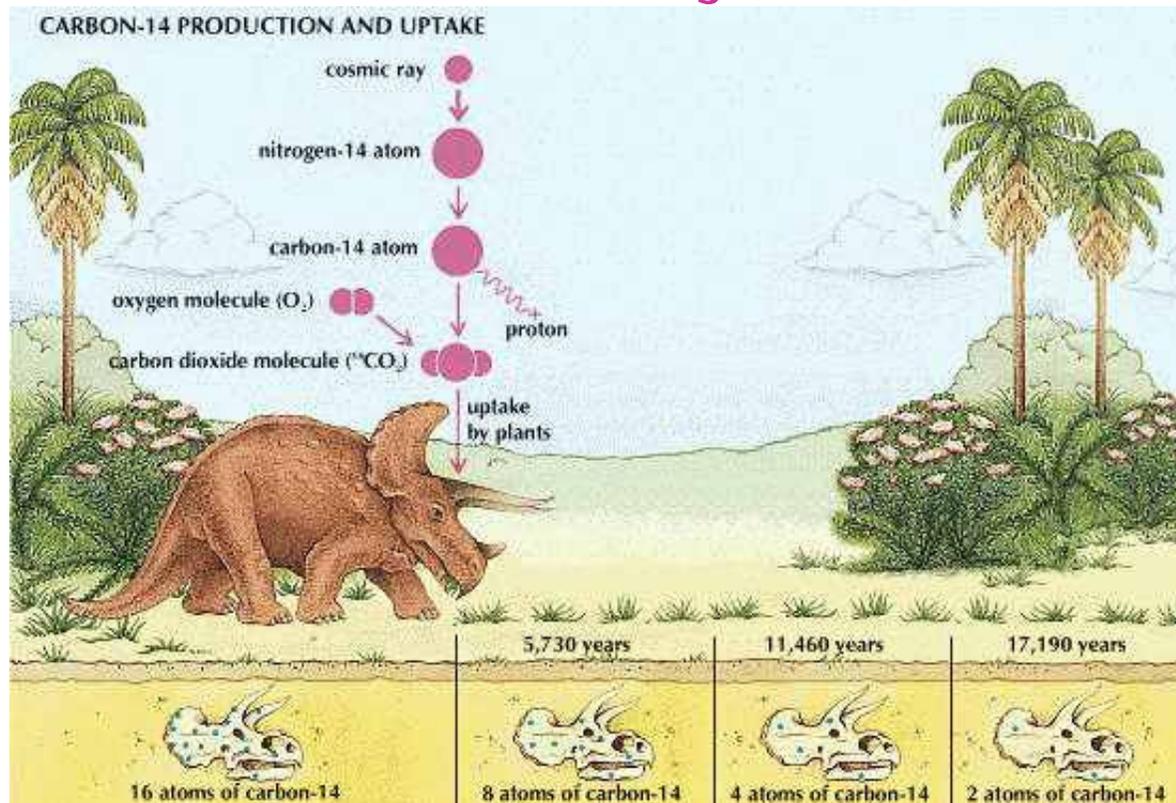
não decaíram passe a metade: $N(t = T_{1/2}) / N_0 = \frac{1}{2} \Leftrightarrow T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$. O tempo médio de vida T_{med}

é geralmente chamado tempo de vida de um nuclídeo ou de uma partícula instável e está

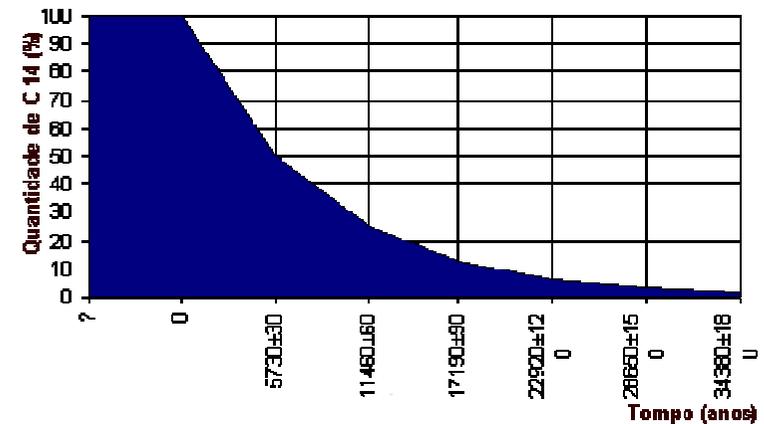
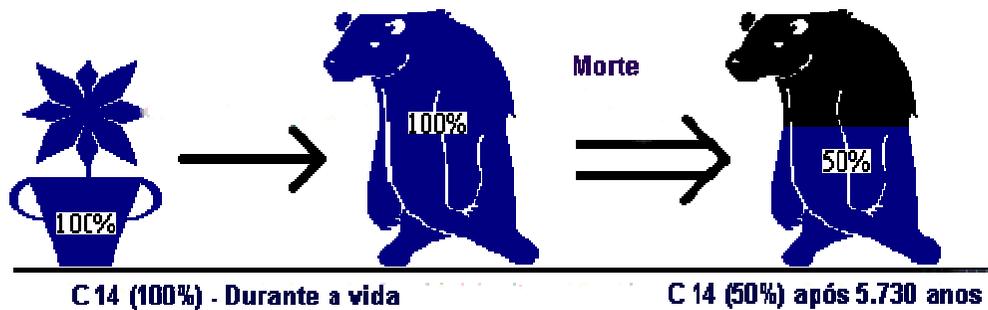
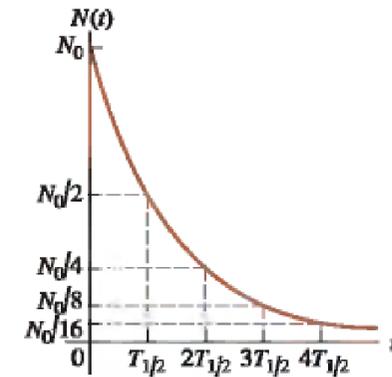
relacionado com o tempo de meia vida da forma: $T_{\text{med}} = \frac{1}{\lambda} = \frac{T_{1/2}}{\ln 2} \approx \frac{T_{1/2}}{0.693}$.

A unidade SI de decaimento é o becquerel (Bq), 1 Bq = 1 decaimento por segundo.
1 curie (Ci) = 3.70×10^{10} Bq.

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.



Carbono 14 e 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 .

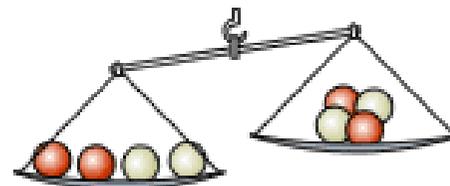
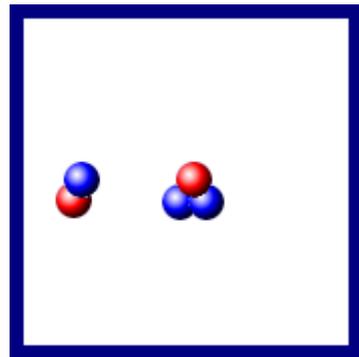
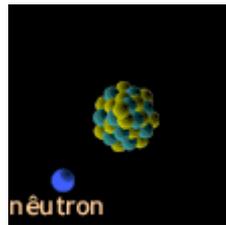
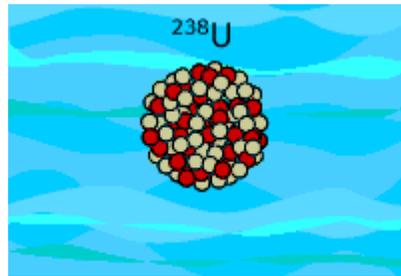
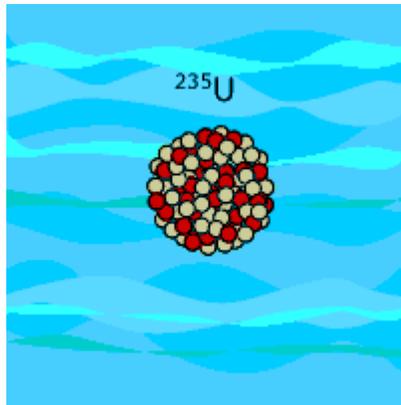
(b) Assuming that the activity per gram of carbon in the specimen when it died was 0.255 Bq/g = $(0.255 \text{ s}^{-1} \cdot \text{g}^{-1})(3600 \text{ s/h}) = 918 \text{ h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$, the activity of 500 mg of carbon then was $(0.500 \text{ g}) \times (918 \text{ h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}) = 459 \text{ h}^{-1}$. 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 :

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

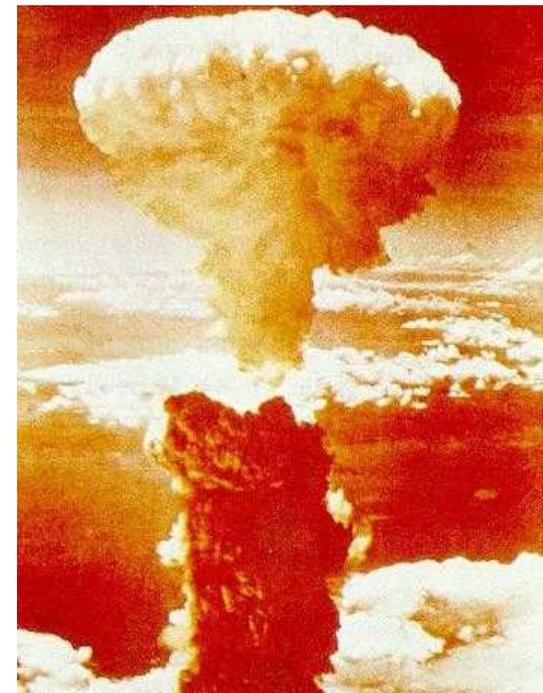
EVALUATE: After 8020 y the ^{14}C activity has decreased from 459 to 174 decays per hour. The specimen died and stopped taking CO_2 out of the air about 8000 years ago.

Radioactividade artificial



2 protons + 2 neutrons Helium nucleus

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



NUCLEAR TELEFISSION

By: Tom Diab
Science Department
Saline High School

Efeitos biológicos da radiação

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

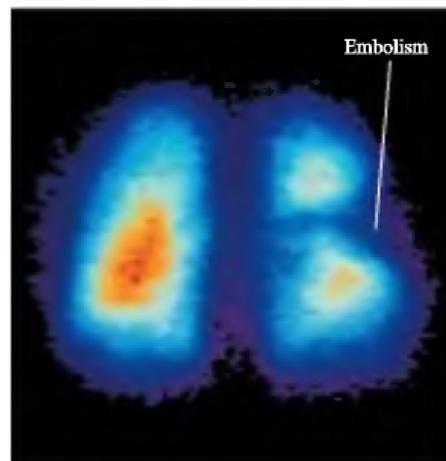
Radiation	RBE (Sv/Gy or rem/rad)
X rays and γ rays	1
Electrons	1.0–1.5
Slow neutrons	3–5
Protons	10
α particles	20
Heavy ions	20

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

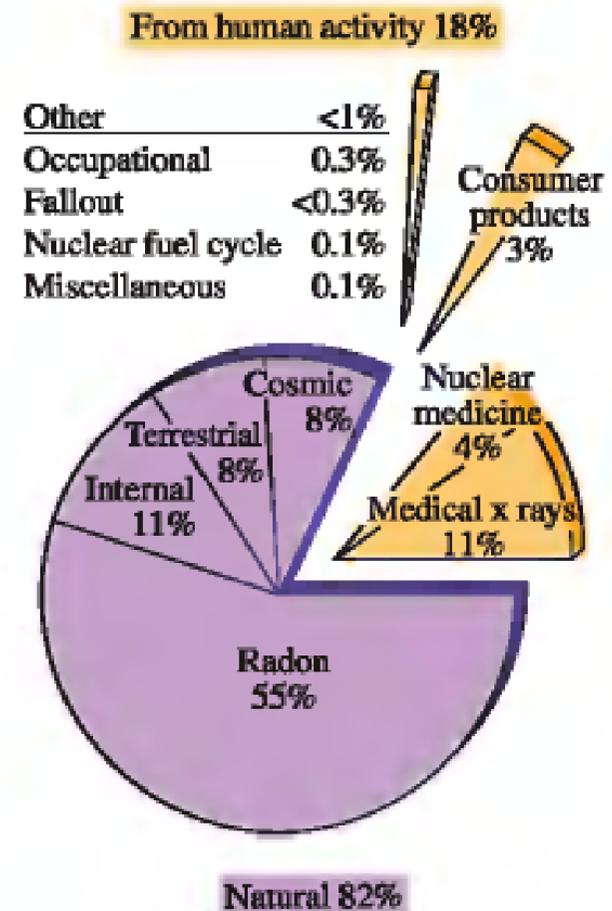
$$\text{Equivalent dose (Sv)} = \text{RBE} \times \text{Absorbed dose (Gy)}$$

relative biological effectiveness (RBE),

43.11 This colored scintigram shows where a chemical containing radioactive ^{99m}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 ^{99m}Tc , which shows that the chemical was able to pass into this lung through the bloodstream. 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.



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

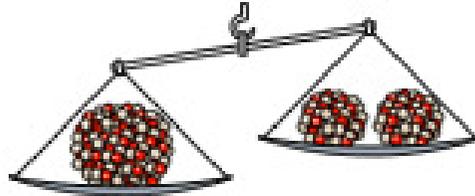


Energia nuclear

- Fissão do átomo

NUCLEAR TELEFISSION

By: Tom Diab
Science Department
Saline High School

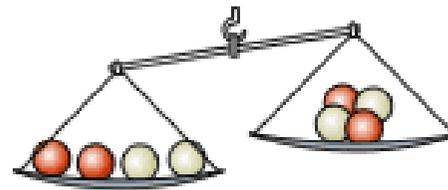
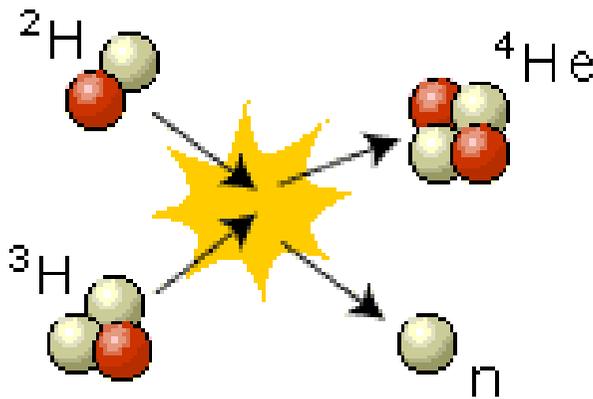


$$E = \Delta m \cdot c^2$$

A origem da matéria

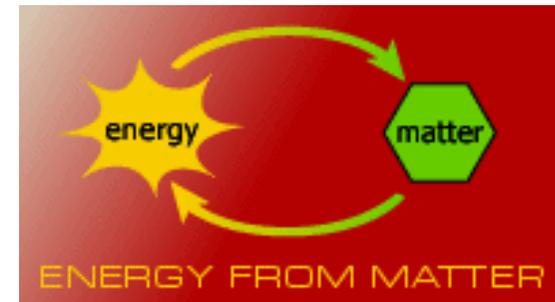


- Fusão do átomo

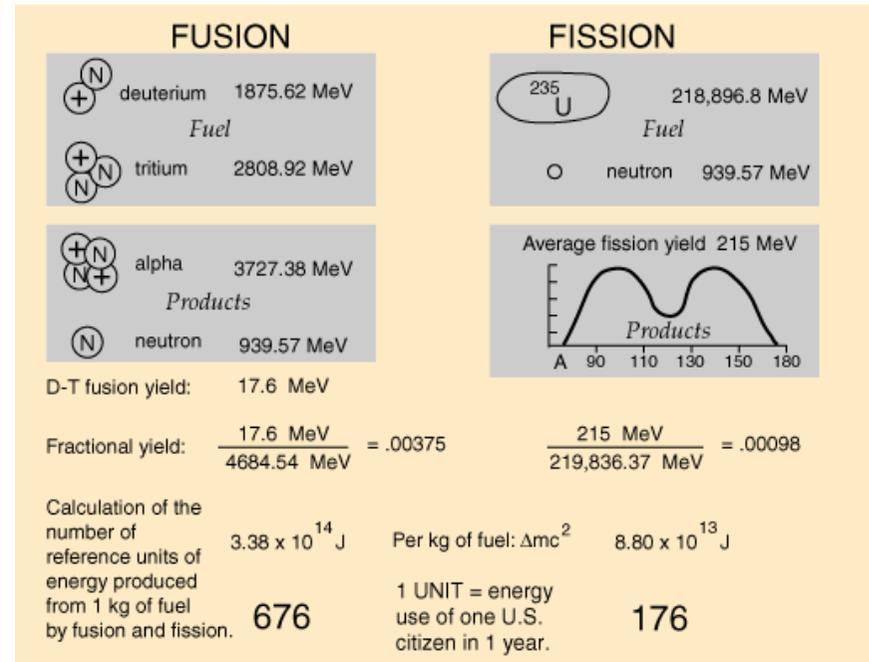
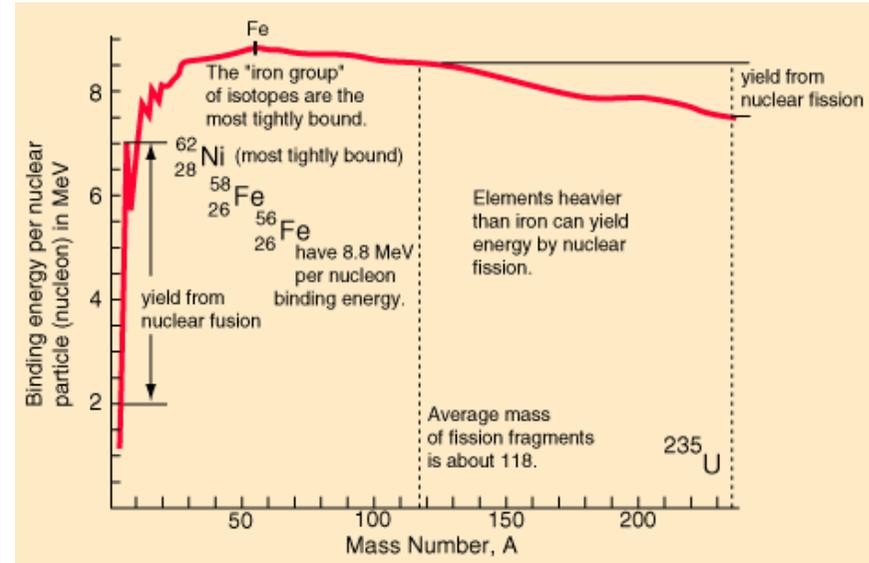
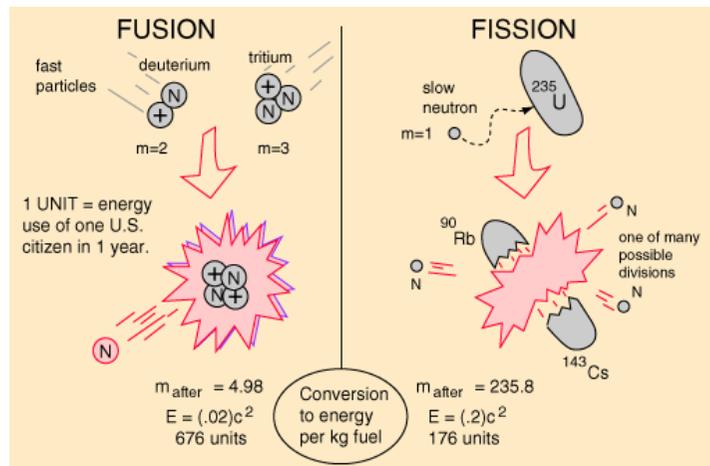
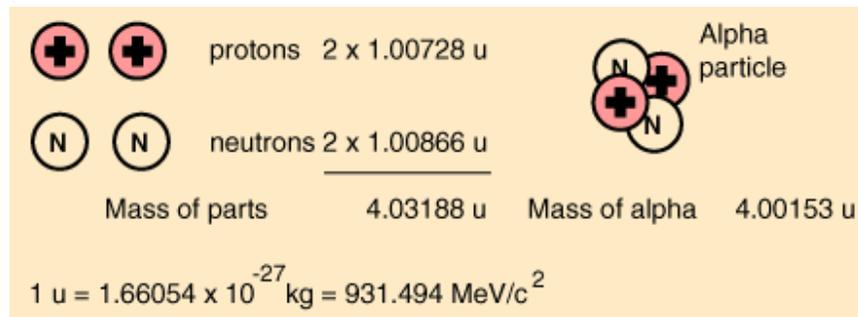
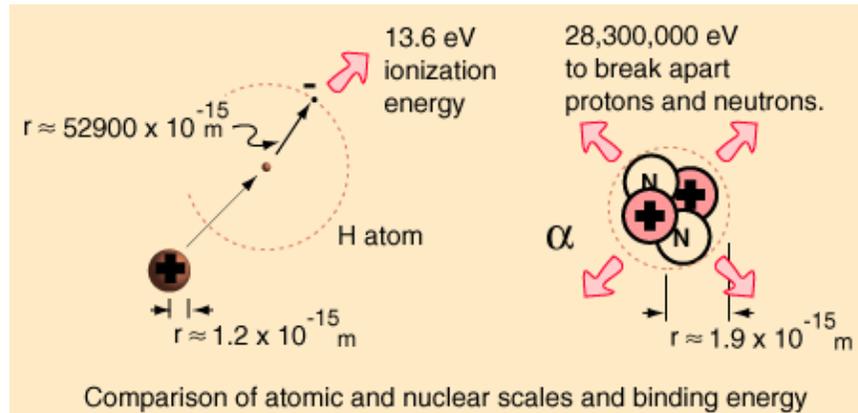


2 protons
+ 2 neutrons Helium
nucleus

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



Reacções nucleares e estabilidade nuclear

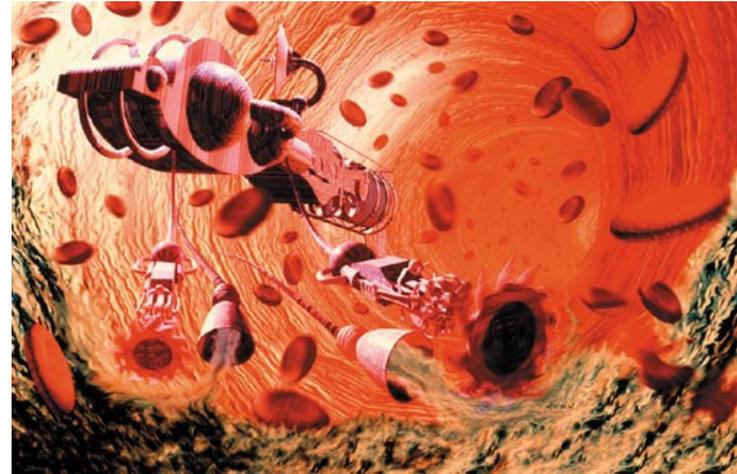
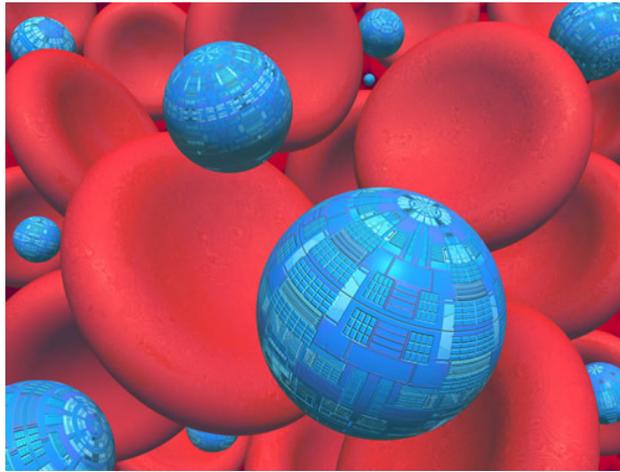


Fim

Nano máquinas e nano robôs

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

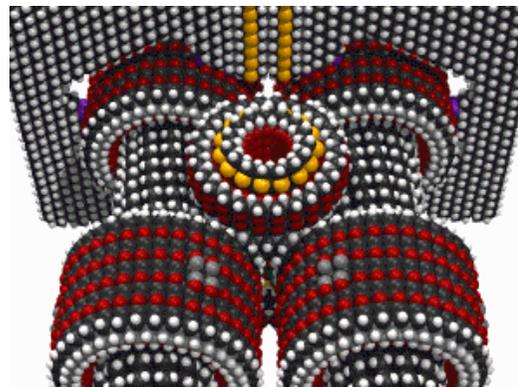
<http://www.imdb.com/title/tt0060397/>



Nano máquinas e nano robôs

<http://nanoinformatic.org/>

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



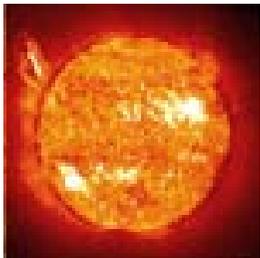
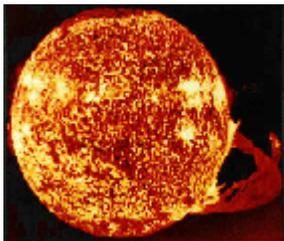
Física nuclear

Temas a abordar

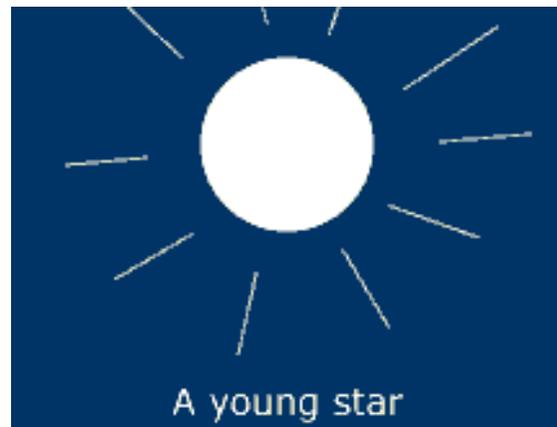
- propriedades do núcleo
- Nuclídeo e isótopos
- Força nuclear

Ver os objectivos de aprendizagem descritos no início do capítulo 42 do manual recomendado.

Onde são produzidos os átomos?



15-09-2009



Orion Nebula Mosaic HST · WFPC2
PRC95-45a · ST Sci OPO · November 20, 1995
C. R. O'Dell and S. K. Wong (Rice University), NASA

346