UFES CEUNES

Universidade Federal do Espírito Santo
Prof. Paulo Moscon

Nome:

Matrícula:

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

OBS:Respostas não justificadas serão desconsideradas.

Questão 1) [2,5] As energias do átomo de Hidrogênio é dada por

$$E = -\frac{13.6}{n^2}\text{eV}.$$

(a) Qual a origem (física e matemática) do sinal negativo na Equação acima.
(b) Quais tipos de energias foram consideradas para o cálculo da energia do átomo de Hidrogênio? **(c)** Calcule o comprimento de onda associado com um fóton proveniente de uma transição do nível inicial $n = 3$ para o nível final $n = 1$.

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

No caso n representa (é proporcional) à distância do elétron ao núcleo atômico. Define-se que $E = 0$ em $n = \infty$ (definição feita durante a obtenção da expressão $E = -\frac{13{,}6\ \text{eV}}{n^2}$). Desta forma, como trata-se de uma energia que diminui com a proximidade do elétron ao núcleo atômico, então só é possível valores negativos para E. (negativo < zero).

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

(c) $\Delta E_{3\to1} = -13{,}6\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2}\right)\text{eV} \cong -12{,}09\ \text{eV} = \boxed{-1{,}934 \times 10^{-18}\ \text{J}}$

Esta é a energia perdida pelo átomo H, e emitida como um fóton com $E = +1{,}934 \times 10^{-18}\ \text{J}$

A energia de um fóton é dada por

$$E = h.f$$

$$\Longrightarrow h.f = 1{,}934 \times 10^{-18}\ J \qquad \text{"}h = 6{,}6 \times 10^{-34}\ J.s$$

$$\Longrightarrow f = \frac{1{,}934}{6{,}6} \times \frac{10^{-18}}{10^{-34}} \frac{\cancel{J}}{\cancel{J}.s} \cong 2{,}93 \times 10^{15}\ Hz$$

$\longrightarrow$ fóton viaja com velocidade $c = 3 \times 10^{8}\ m/s$;

$$c = \lambda . f \qquad \Longrightarrow \lambda = \frac{3 \times 10^{8}\ m/s}{2{,}93 \times 10^{15} . 1/s} = 1{,}024 \times 10^{-7}\ m$$

$$\boxed{\Longrightarrow \lambda = 102{,}4\ nm}$$

Questão 2) [2,5] Calcule a energia cinética, em elétron-volts, de um elétron cujo comprimento de onda de *de Broglie* é $\lambda = 700nm$.

A relação proposta por de Broglie é

$$P = \frac{h}{\lambda} \longrightarrow mv = \frac{h}{\lambda}$$

$$\longrightarrow v = \frac{h}{m\lambda} \qquad \text{com} \qquad h = 6{,}6 \times 10^{-34}\ J.s$$

$$m \cong 9{,}1 \times 10^{-31}\ kg$$

$$\lambda = 700 \times 10^{-9}\ m \qquad \text{(exigência).}$$

Portanto $E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \left(\frac{h}{m\lambda}\right)^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$

$$E_c = \frac{6{,}6^2 \times 10^{-68}}{2 \times 9{,}1 \times 10^{-31} \times 7^2 \times 10^{-14}} \frac{J^2 s^2}{kg . m^2}$$

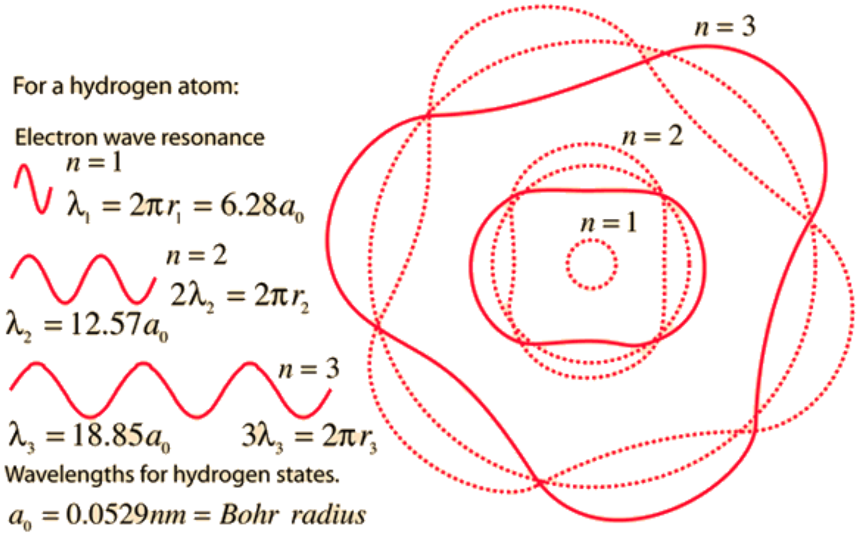
$$E_c = 4{,}88 \times 10^{-2} \times 10^{-68} \times 10^{31} \times 10^{14} \frac{J^2}{\underbrace{kg . \frac{m}{s^2}}_{} \times \underbrace{m}_{}} \Longrightarrow \boxed{E_c = 4{,}88 \times 10^{-25}\ J}$$

Newton × metro = Joule

Questão 3) [2,5] Explique o motivo pelo qual existem órbitas mais prováveis para um elétron orbitando um núcleo atômico; ou seja, o que acontece que faz com que órbitas específicas sejam estáveis?

A redor do núcleo uma órbita de $\underline{2\pi r}$ deve ser suficiente para conter um número inteiro de comprimentos de onda – no mínimo um (numa visão mais simplória). O fato é que ao resolver-se a equação de Schrödinger, as condições de que órbitas devem seguir condições de contorno contendo ondas estacionárias (de maior estabilidade), levam a valores específicos de orbitas e orbitais.

Ilustração.

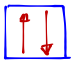


Como ilustrado acima, esta é uma condição necessária para produzir ressonância; a condição de ressonância é uma condição mais estável e tende a se manter por mais tempo. Isto significa que as órbitais consideradas mais estáveis são na verdade órbitais mais prováveis.

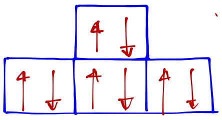
Questão 4) [2,5] **(a)** Faça a distribuição eletrônica para o Ion de Ferro Fe^{2+} (24 elétrons). **(b)**O Ion Fe^{2+} possui magnetismo de origens orbital e/ou de spin? **(c)** Calcule o seu momento magnético de origem orbital (se houver) em magnetons de Bohr; **(d)** Calcule o seu momento magnético de origem de Spin (se houver) em magnetons de Bohr

Obs: Faça a distribuição utilizando a representação em caixinhas a fim de explicar o magnetismo resultante.

(a)

$n = 1 \Longrightarrow$  $l = 0 \Rightarrow 1s^2$

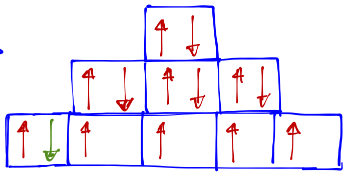
$m_l \rightarrow$ 0

$n = 2 \Longrightarrow$ 

$l = 0 \Longrightarrow 2s^2$

$l = 1 \Longrightarrow 2p^6$

$m_l \rightarrow$ −1 0 1

$n = 3 \Longrightarrow$ 

$l = 0 \Longrightarrow 3s^2$

$l = 1 \Longrightarrow 3p^6$

$l = 2 \Longrightarrow 3d^6$

$m_l \longrightarrow$ −2 −1 0 1 2

Átomo regular (26 elét.)

~~$1s^2$~~

~~$2s^2$ $2p^6$~~

~~$3s^2$ $3p^6$ $3d^6$~~

~~$4s^2$~~

Ion (Perde os 2 elé-trons com $n = 4$)

~~$1s^2$~~

~~$2s^2$ $2p^6$~~

~~$3s^2$ $3p^6$ $3d^6$~~

Análise orbital

$\Rightarrow$ Só há um elétron com momento angular não compensado diferenciado pela cor verde ($\downarrow$), com $l = 2$ e $m_l = -2$. Ocorre, portanto magnetismo de origem orbital.

Análise de spins

$\Rightarrow$ Existem 4 spins não compensados. Portanto, ocorre magnetismo com origem nos spins eletrônicos não compensados.

(b) $\vec{\mu}_{orb.} = -g \dfrac{\mu_\beta}{\hbar} \vec{L}_{orb.}$ $\quad g = 1$ para o caso orbital.

$|\vec{\mu}_{orb}| = \dfrac{\mu_\beta}{\cancel{\hbar}} \sqrt{l(l+1)}\, \cancel{\hbar} \quad \Rightarrow$ no caso $l = 2$

$|\vec{\mu}_{orb.}| = \sqrt{6}\, \mu_\beta$

Para a componente z do elétron ($\downarrow$).

$\vec{\mu}_{orb_z} = -\dfrac{\mu_\beta}{\hbar} m_l \hbar \hat{z} \qquad \vec{\mu}_{orb_z} = -(-2)\mu_\beta \hat{z}$

$\vec{\mu} = 2\mu_B \hat{z}$

<u>Obs</u>: Porque usar módulo em $\vec{\mu}_{orb}$. e não em $\vec{\mu}_{orb_z}$?

$\vec{\mu}_{orb}$ não é acessado diretamente. Pode, portanto, estar em qualquer sentido. O tratamento vetorial serve só para evidenciar que $\vec{\mu}_{orb}$. é contrário à $\vec{L}$.

Já $\vec{\mu}_{orb_z}$ é acessado pela aplicação de um campo magnético externo, definindo um sentido $\hat{z}$ de alinhamento de $\vec{\mu}_z$. Pode ser apresentado vetorialmente relativo ao campo aplicado para medi-lo.

(c) Lembrando que mede-se sempre a componente z do momento magnético (portanto do "angular") comecemos por μ_z.

Se quatro elétrons estão com spins alinhados e cada um colabora com

$$\mu_{z_1} = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\frac{1}{2}\hbar = \mu_B$$

Então os 4 geram um μ_z máximo de

$\mu_z = 4\mu_B$, ou seja

$$\boxed{\mu_z = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\underbrace{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)}_{\text{Máximo valor de } m_s \text{ total}}\hbar = 4\mu_B}$$

Como S = Máximo m_s , pois $|m_s| \leq S$

$$\Rightarrow S = \frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2} = 2$$

$$\Rightarrow \mu_{spin} = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\sqrt{S(S+1)}\,\hbar = 2\sqrt{2(2+1)}\,\mu_B$$

$$\boxed{\Rightarrow \mu_{spin} = 2\sqrt{6}\,\mu_B \cong 4{,}9\,\mu_B}$$