

Algumas constantes úteis :

$$e=1,6 \times 10^{-19} C \quad , \quad m_e=9,1 \times 10^{-31} Kg \quad , \quad 1 eV=1,6 \times 10^{-19} J \quad , \quad h=6,63 \times 10^{-34} J \times s=4,14 \times 10^{-15} eV \times s$$

$$\sigma=5,67 \times 10^{-8} W/m^2 K^4 \quad , \quad k_B=1,38 \times 10^{-23} J/K \quad , \quad c=3,0 \times 10^8 m/s \quad \epsilon_0=8,85 \times 10^{-12} C^2/Nm^2$$

$$m_p=1,67 \times 10^{-27} kg$$

$$\mu_b = \frac{e \hbar}{2m_e} \quad p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad c = \lambda f \quad eV_0 = hf - \phi \quad hf = \frac{hc}{\lambda} = E_i - E_f \quad E_n = - \left( \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \right) \frac{Z^2}{n^2} = \frac{-13,6 eV}{n^2}$$

$$\vec{\mu} = - \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad U = - \vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad L_z = \hbar m_l \quad L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad \vec{p} = \gamma m_0 \vec{v} \quad E = \gamma m_0 c^2 \quad E = K + m_0 c^2$$

$$E^2 = (m_0 c^2)^2 + (pc)^2 \quad \sin^2(x) = \frac{1 - \cos(2x)}{2} \quad \cos^2(x) = \frac{1 + \cos(2x)}{2} \quad \int x \sin(ax) dx = \frac{-x \cos(ax)}{a} + \frac{\sin(ax)}{a^2}$$

$$\int x \sin(ax) dx = \frac{-x \cos(ax)}{a} + \frac{\sin(ax)}{a^2}$$

$$-i \hbar \frac{d\Psi(x,t)}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x,t)}{dx^2} + U(x)\Psi(x,t)$$

[1](a) Dada a equação de Schrodinger dependente do tempo,

encontre as equações diferenciais para as coordenadas x e t, usando o método da separação de variáveis, considerando que  $\Psi(x,t) = \phi(x) f(t)$  e que a constante que difere uma solução da outra é E=constante.

b) Encontre as soluções para f(t).

c) Considere um potencial do poço quadrado infinito de largura L definido por,

$$U(x) = \infty \quad \text{para } x \leq 0 \text{ e } x \geq L \quad \text{e}$$

$$U(x) = 0 \quad \text{para } x > 0 \text{ e } x < L \quad ,$$

encontre as funções  $\phi(x)$  lembrando que  $\Psi(x,t)^2 = \Psi(x,t)^* \Psi(x,t)$ .

d) Encontre uma expressão para a constante E(energia).

e) Calcule o valor de  $\langle x \rangle = \int \Psi_n(x,t)^* x \Psi_n(x,t) dx$  ,  $\langle x^2 \rangle = \int \Psi_n(x,t)^* x^2 \Psi_n(x,t) dx$  e  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$  e de de um elétron no estado n=1.

f) Calcule,  $\langle p_x \rangle = \int \Psi_n(x,t)^* \left( -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_n(x,t) dx$  ,  $\langle p_x^2 \rangle = \int \Psi_n(x,t)^* \left( -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_n(x,t) dx$  e

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$
 de um elétron no estado n=1.

g) Calcule o produto  $\Delta x \Delta p_x$ .

[2] Um elétron está ligado em um poço quadrado infinito de largura L(Questão [1]). O elétron faz uma transição do nível com energia  $E_2$  para o nível com energia  $E_1$  emitindo um fóton de comprimento de onda igual a 455nm.

a) Calcule a diferença de energia entre os níveis.

b) Calcule a largura L do poço.

[3] Um elétron em um átomo de hidrogênio tem  $n=4$ .

a) Quais são os possíveis valores de  $l$  ,  $m_l$  ,  $m_s$  e quantos estados existem neste nível de energia.

b) Se um campo magnético  $B_z$  constante for aplicado indique em um diagrama os desdobramentos Zeeman dos níveis de energia associados a  $l=3$ .

c) Calcule a variação de energia em elétron-volts para um campo magnético de  $B_z = 30000,0 mT$  em relação à energia do mesmo nível,  $E_4$  sem campo.

[4] Considere um elétron de massa m e confinada em um poço de potencial unidimensional infinito de tamanho L.

a) Obtenha uma expressão para a densidade de estados  $g(E) = \frac{dn}{dE}$  para um gás de elétrons unidimensional esboçando um gráfico de g(E) como função de E.

b) Obtenha uma expressão para a energia de Fermi para o gás de elétrons unidimensional.

- [5]** Num cristal de sulfeto de chumbo, o comprimento de onda dos primeiros fótons que são absorvidos é  $3,35\mu m$ .
- a) Calcule a energia da lagura do gap entre a banda de valência e a banda de condução deste cristal.
- b) Considerando que a energia de Fermi deste cristal está localizada no meio entre a banda de valência e a banda de condução deste cristal calcule a probabilidade de um elétron ser encontrado com energia igual à da banda de condução em  $T=500K$ .

- [6]** Os químicos usam espectros de absorção infravermelho para identificar os elementos químicos em uma amostra. Em certa amostra um químico verifica que uma luz de comprimento de onda  $6,8\mu m$  é absorvida.
- a) Calcule a energia da transição.
- b) Se a massa da molécula é  $5,6 \times 10^{-26} kg$ , calcule a constante de mola do oscilador harmônico, considerando que a transição é entre dois níveis consecutivos.

- [7] (a)** Calcule, para o estado fundamental do átomo de hidrogênio,  $\Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$ , o valor de  $r$  para o qual a densidade de probabilidade radial é máxima,  $a_0$  é o raio de Bohr.
- (b)** Calcule em seguida o valor médio,  $\langle r \rangle = \int r |\Psi|^2 dV$  da coordenada radial nesse estado.

- [8]** Considere um elétron de massa  $m$  e confinada em um poço de potencial unidimensional e infinito de tamanho  $L$ .
- a) Obtenha as energias  $E_n$  e as autofunções  $\Psi_n(x)$ .
- b) Considerando que temos agora um poço infinito bidimensional de lados  $L_x = L_y = L$  escreva as energias  $E_{n_x, n_y}$  e as novas possíveis funções de  $\Psi_{n_x, n_y}(x, y)$  onda.
- c) Enumere até o quarto nível e em ordem crescente as energias dos níveis mostrando o número de estados em cada nível de energia e o valor da energia.
- d) Considerando que elétrons tem spin com  $m_s = \pm 1/2$ , e levando em conta o princípio de exclusão de Pauli faça um diagrama de energias do item anterior agora preenchendo com elétrons, indicando os spins com setas, até um número  $N = 7$  elétrons.
- e) Calcule a energia densidade de estados  $g(E) = \frac{dn}{dE}$  para um gás de elétrons bidimensional. Dica: Use os mesmos argumentos para o caso 3D porém lembre-se que no caso bidimensional NÃO temos um volume e sim uma superfície.

- [9]** O Lítio metálico tem uma estrutura cristalina BCC. Cada unidade é um cubo de comprimento  $a = 0,35$  nm.
- a) Em uma rede BCC, qual é o número de átomos por unidade de volume? Forneça a resposta em termos de  $a$ . (Sugestão: quantos átomos existem por unidade?)
- b) Use o resultado da parte (a) para calcular a energia de Fermi  $E_F$  do Lítio metálico a temperatura zero. Suponha que haja um elétron livre por átomo.

- [10]** O comprimento de onda máximo da luz que certa fotocélula de silício pode detectar é  $1,11\mu m$ .
- a) Qual é a banda proibida (em e1étons-volt) entre a banda de valência e a banda de condução dessa fotocélula?
- b) Explique por que o silício puro é opaco.