
Aplicações da Mecânica Quântica



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

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

The Scale of Things – Nanometers and More

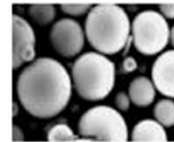
Things Natural



Dust mite
200 μm



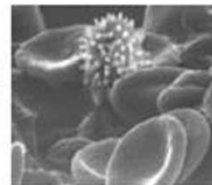
Ant
 $\sim 5 \text{ mm}$



Fly ash
 $\sim 10\text{-}20 \mu\text{m}$



Human hair
 $\sim 60\text{-}120 \mu\text{m}$ wide



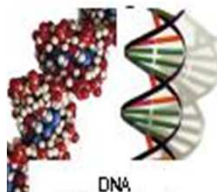
Red blood cells
with white cell
 $\sim 2\text{-}5 \mu\text{m}$



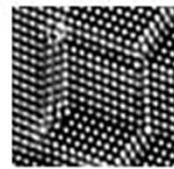
$\sim 10 \text{ nm}$ diameter



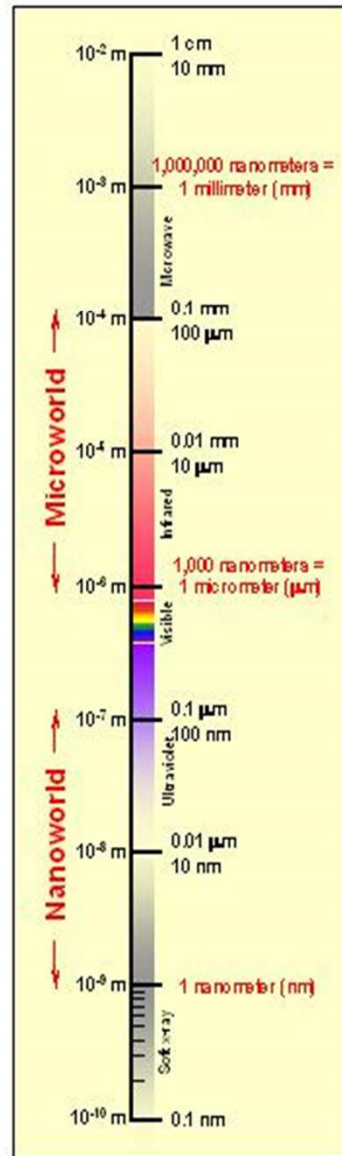
ATP synthase



DNA
 $\sim 2\text{-}12 \text{ nm}$ diameter



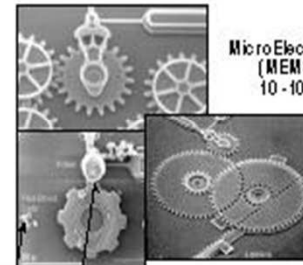
Atoms of silicon
spacing \sim tenths of nm



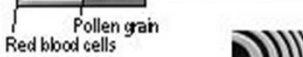
Things Manmade



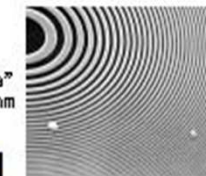
Head of a pin
1-2 mm



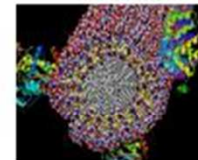
Micro Electro Mechanical (MEMS) devices
10 - 100 μm wide



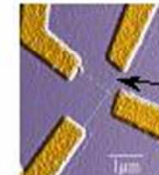
Pollen grain
Red blood cells



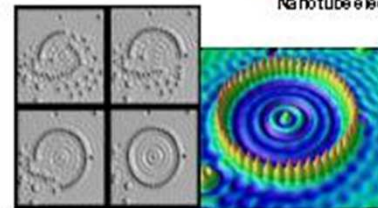
Zone plate x-ray "bars"
Outer ring spacing $\sim 35 \text{ nm}$



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

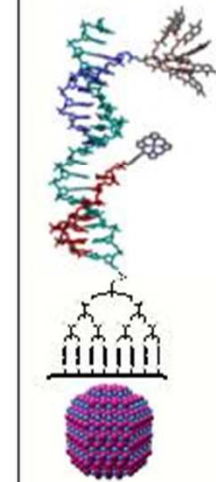


Nanotube electrodes

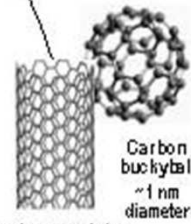


Quantum corral of 48 iron atoms on copper surface
positioned one at a time with an STM tip
Conal diameter 14 nm

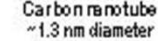
The Challenge



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



Carbon buckyball
 $\sim 1 \text{ nm}$
diameter



Carbon nanotube
 $\sim 1.3 \text{ nm}$ diameter

Photo credit: www.flickr.com/photos/112103289@N00/4449162

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

Prof. MARCELO DOLACHINI

© Quimicatual (2000) - todos os direitos reservados

www.quimicatual.com.br

IA 1	CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS																VIIIA 18							
1	Hidrogênio 1,00794 (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 38,963 (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	Radônio [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	Mitério [266] Mt	Ununílio [269] Uun	Ununônio [272] Uuu	Ununbio [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
[outros]

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	Holmio 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	Americônio [243] Am	Cúrio [247] Cm	Berquélio [247] Bk	Califórnio [251] Cf	Einsténio [252] Es	Férmio [257] Fm	Mendelévio [258] Md	Nobélio [259] No	Laurêncio [262] Lr

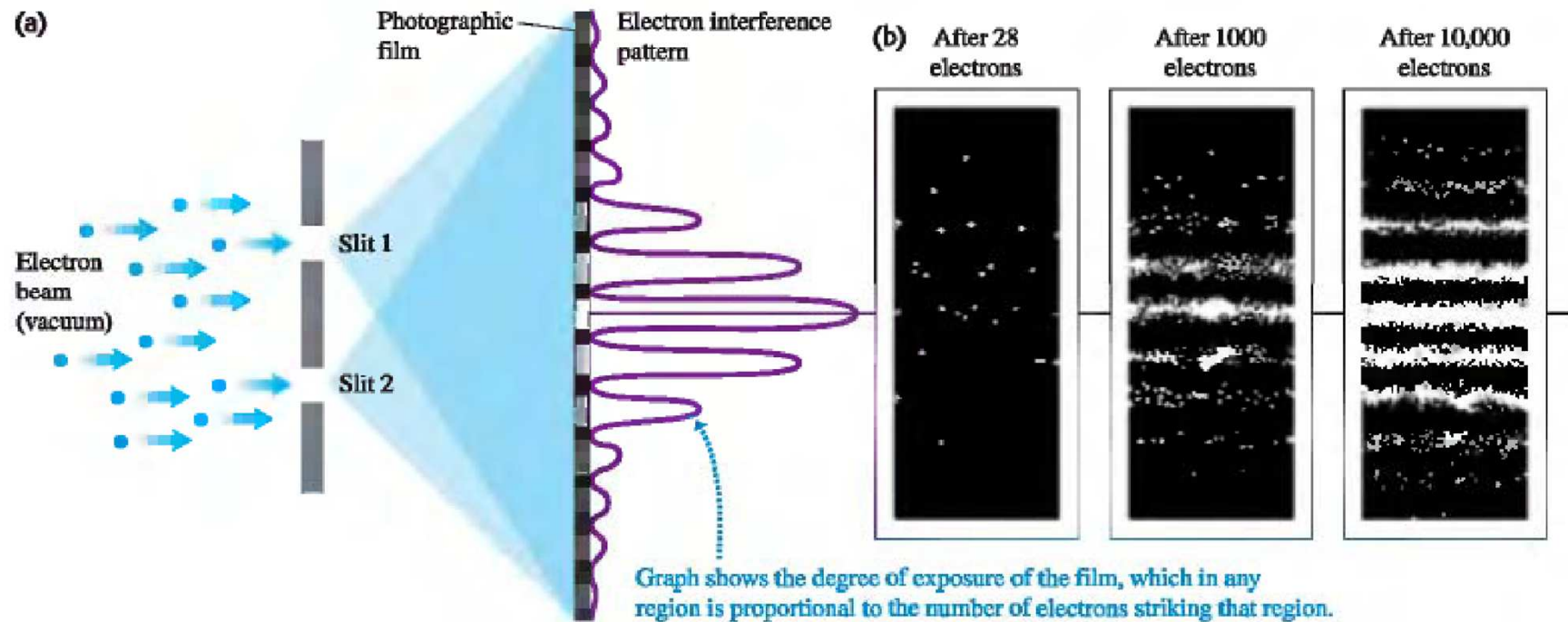
 Hidrogênio
 Metais
 Semimetais
 Ametais
 Gases Nobres
 Lantanóides
 Actinóides

* 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)

As partículas também se comportam como ondas

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

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



Mecânica Quântica

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

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

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

A função de onda e a equação de Schrödinger

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

Equação de Schrödinger a 3 D:

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

Equação de Schrödinger a 1 D:

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

“Significado” físico da função de onda



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

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

Função de onda de uma partícula livre com energia E

O que é uma partícula livre?

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

Equação de Schrödinger a 1 D para uma partícula livre

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

*Schrodinger equation for free particle
in one dimension.*

Solução:

Ψ = wavefunction
for electron

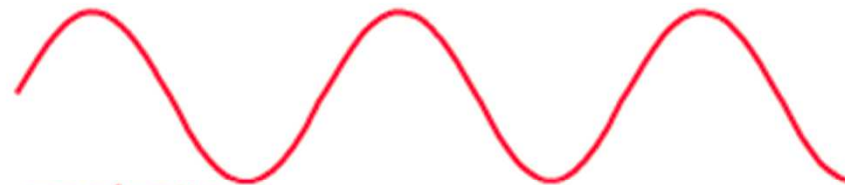
$$\Psi = A \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} x - \omega t\right)$$

Using the deBroglie relationship

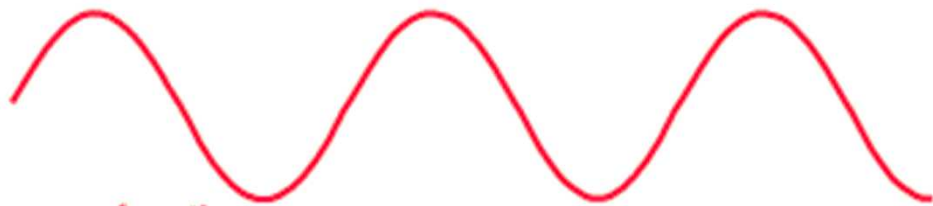
$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = k \quad p = \text{electron momentum}$$

Using the Planck relationship

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



Função de onda de uma partícula livre



Ψ = wavefunction for electron

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

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

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

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

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/quantum/schr2.html#c1>

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

Propriedades da função de onda

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

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

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

Função de onda: significado físico

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

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

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

Interpretação de 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.

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

Estados estacionários

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

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

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

E : representa a energia do estado

Equação de Schrödinger independente do tempo

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

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

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

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

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

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

Questões filosóficas criadas pela Mecânica Quântica

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

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

Quantum mechanical quotes

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

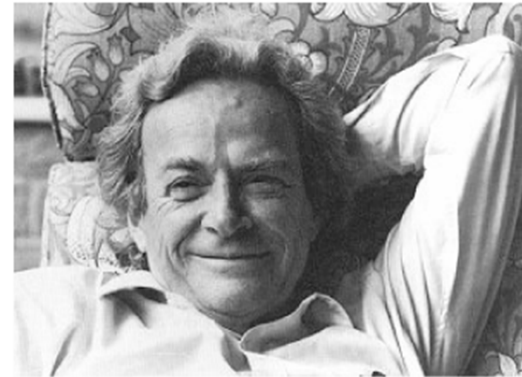
“Será que a Lua está lá quando não olhamos para ela?”*

(Einstein, ~1950).

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

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

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



Richard Feynman

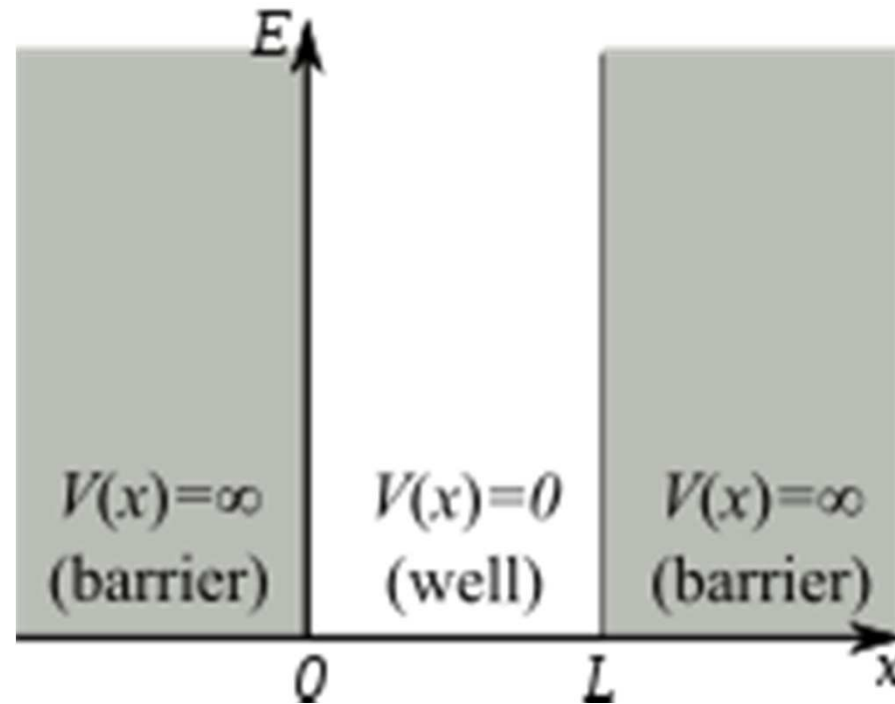
“I think it is safe to say that nobody understands quantum mechanics...”



Partícula numa caixa (poço quântico)

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

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



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

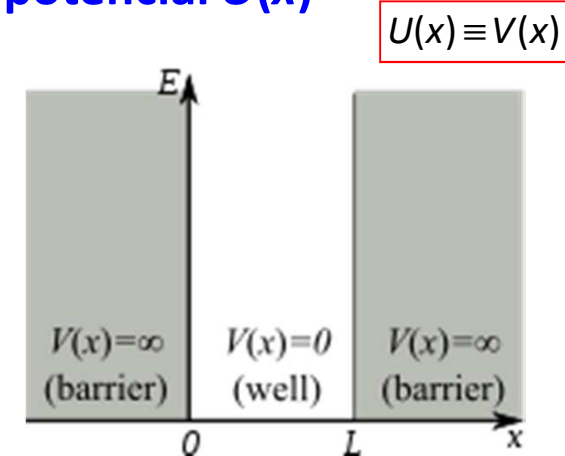
Dentro do poço: $U(x) = 0$ $0 < x < L$

Equação de Schrödinger para uma partícula numa caixa

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

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

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



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

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

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

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

Partícula numa caixa (poço quântico)

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

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

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

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

Solução geral:

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

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

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

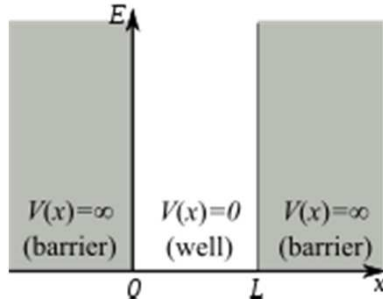
Solução geral:

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

Partícula numa caixa (poço quântico)

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

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



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

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

Solução geral:

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

Solução particular:

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

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

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

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

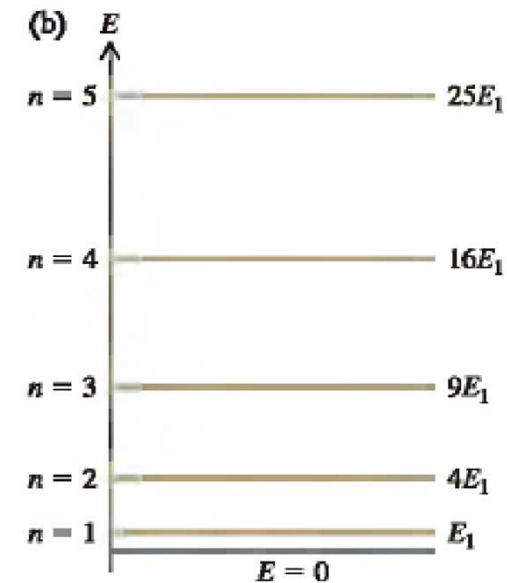
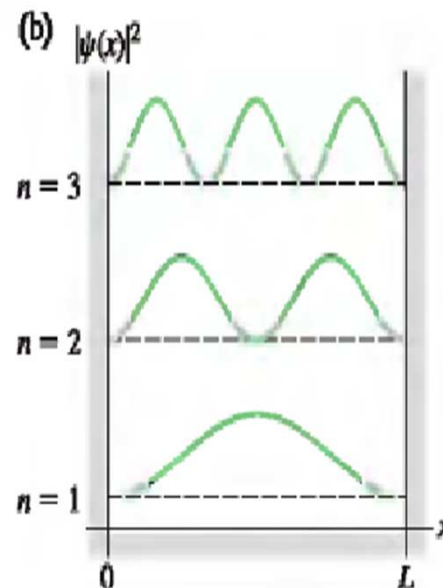
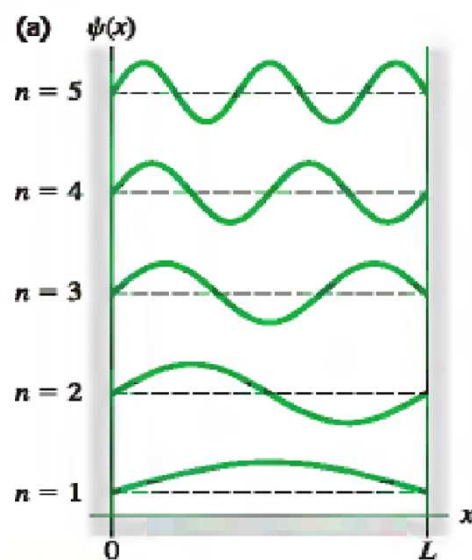
Níveis de energia de uma partícula numa caixa

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

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

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

(Falta normalizar a função de onda)

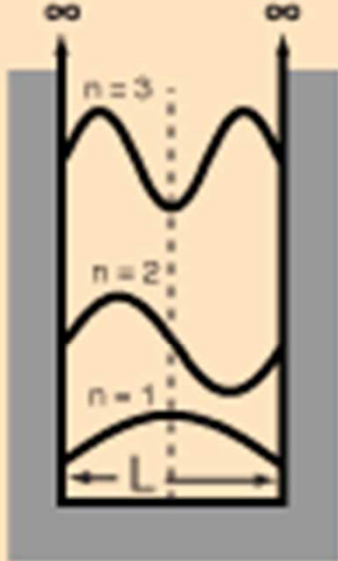


Ideias a reter:

O número de estados possíveis é infinito, mas as energias possíveis estão quantizadas.

Níveis de energia de uma partícula numa caixa

Shrodinger Equation for Particle in Box

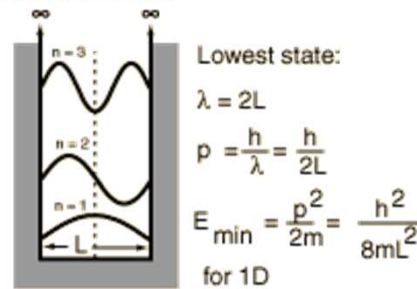


Smaller box implies larger energy

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

Níveis de energia de uma partícula numa caixa

Shrodinger Equation for Particle in Box



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

3D Box



0.182 nm

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: $E_{\min} = 10.4 \text{ eV}$

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

atom vs nucleus



$T_{1/2} = 5715 \text{ yr}$
 $Q = 0.016 \text{ MeV}$
 Beta particle (electron)

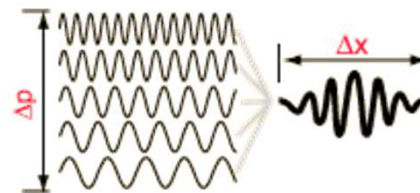
Binding energy 105.29 MeV or 7.5 MeV per nucleon.

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

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

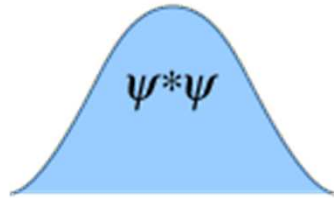
Uncertainty Principle

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



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

Níveis de energia de uma partícula numa caixa



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



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

Assume atomic size = 0.4nm

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

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: 9.4eV

Confine proton in nucleus: 2.05MeV

Confine electron in nucleus: 3.77GeV

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!

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/%E2%80%8Chbase/quantum/carbconfine.html#c1>

Níveis de energia de uma partícula numa caixa

Confinement in atom

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

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

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

For electron:

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

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

Confinement in nucleus

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

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

For electron:

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

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

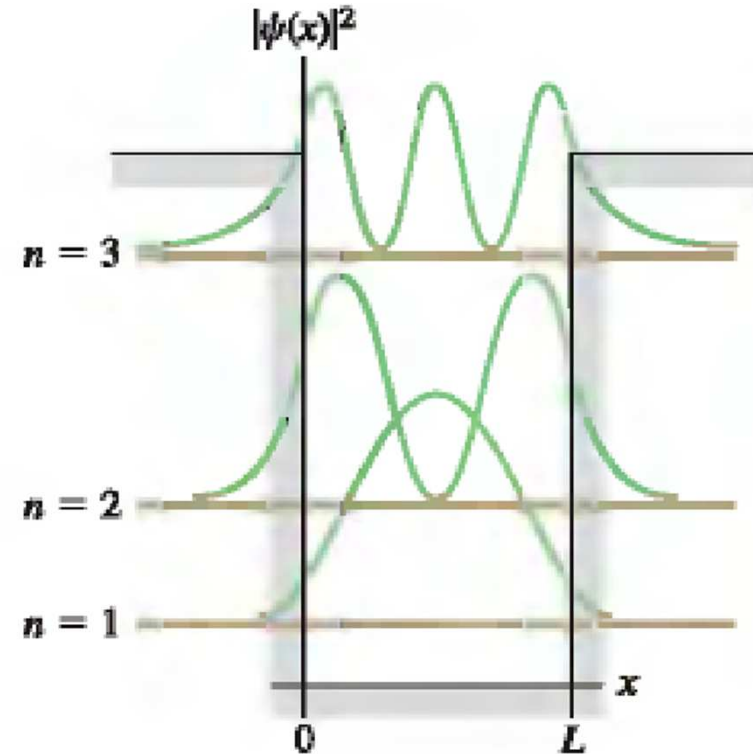
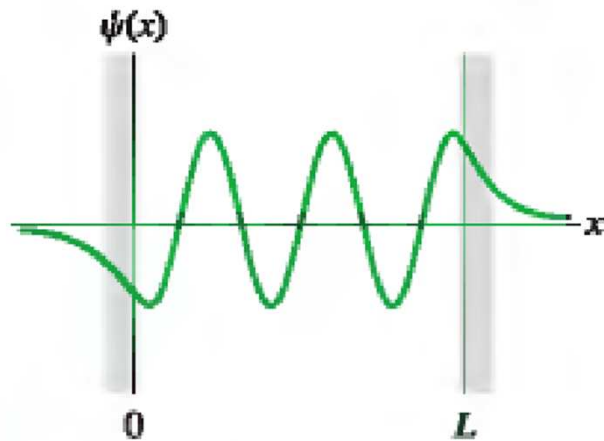
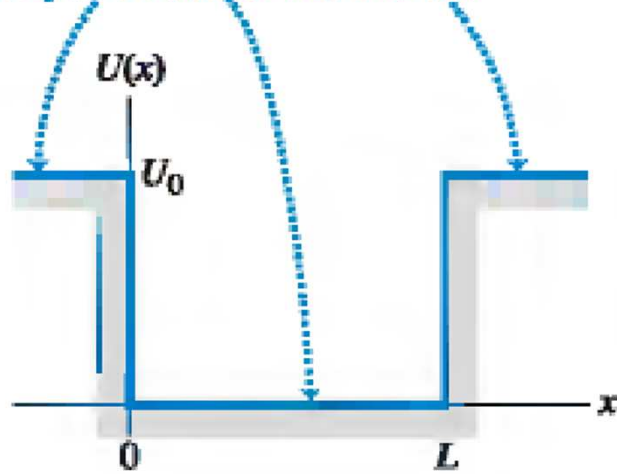
For proton, divide by $m_p / m_e = 1836$

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

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/%E2%80%8Chbase/quantum/carbconfine.html#c1>

Funções de onda num poço finito

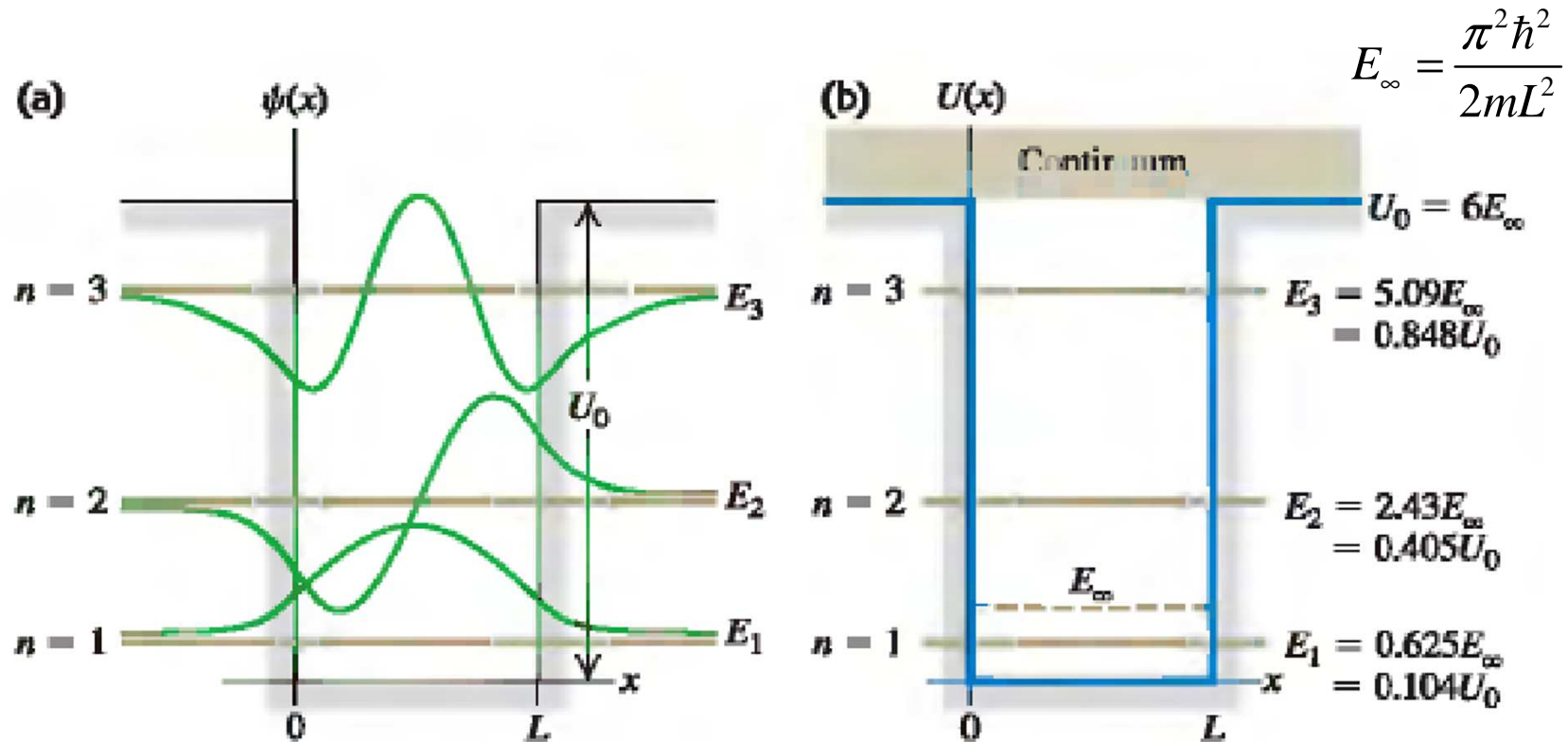
The potential energy U is zero in the interval $0 \leq x \leq L$ and has the constant value U_0 everywhere outside this interval.



Ideias a reter

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

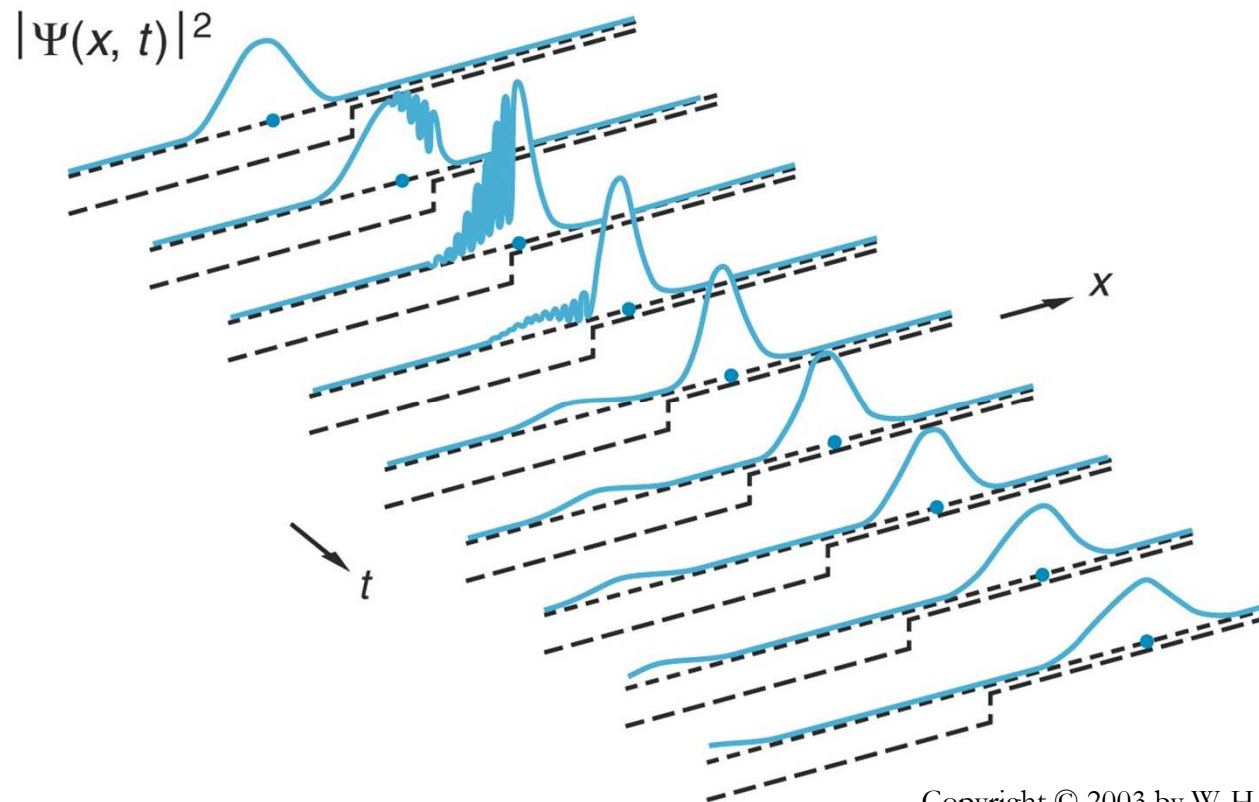
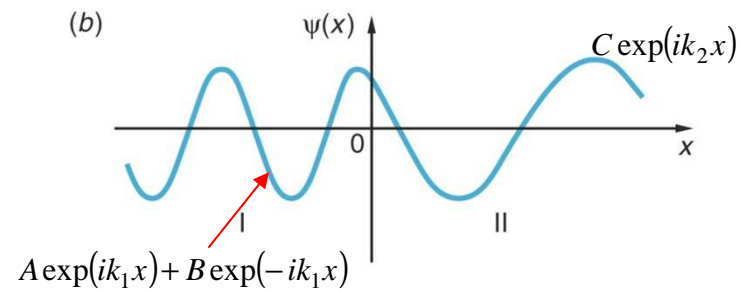
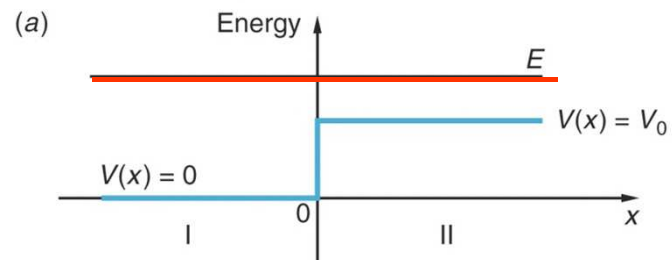
Funções de onda e níveis de energia num poço finito



Ideias a reter

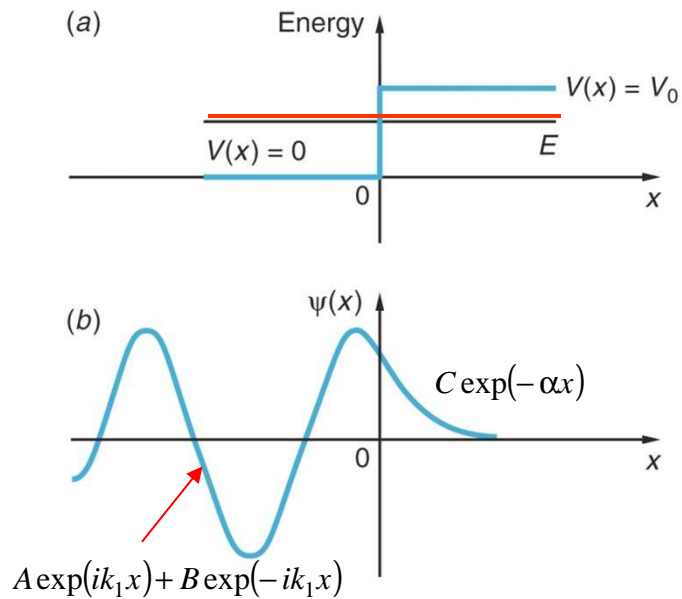
- O número de estados possíveis num poço quântico de profundidade finita é **finito**.
- Num poço quântico finito a função de onda espraia-se para dentro das barreiras, o que faz com que os valores da energia dos estados discretos possíveis sejam inferiores aos valores previstos para um poço quântico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

Função de onda num degrau de potencial

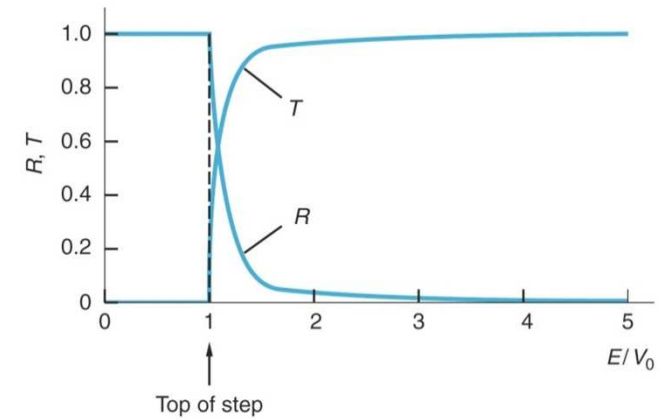


Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

Função de onda num degrau de potencial



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

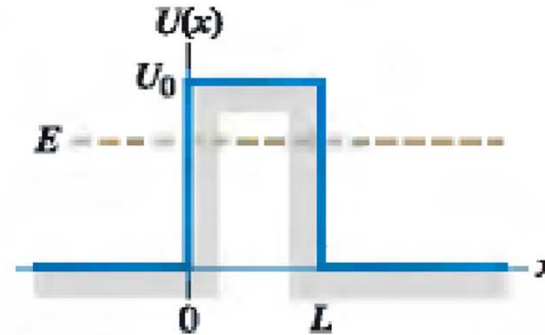
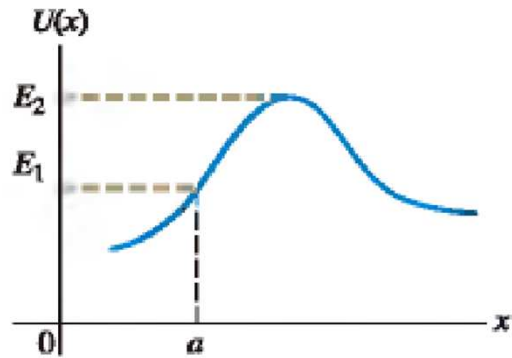


Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

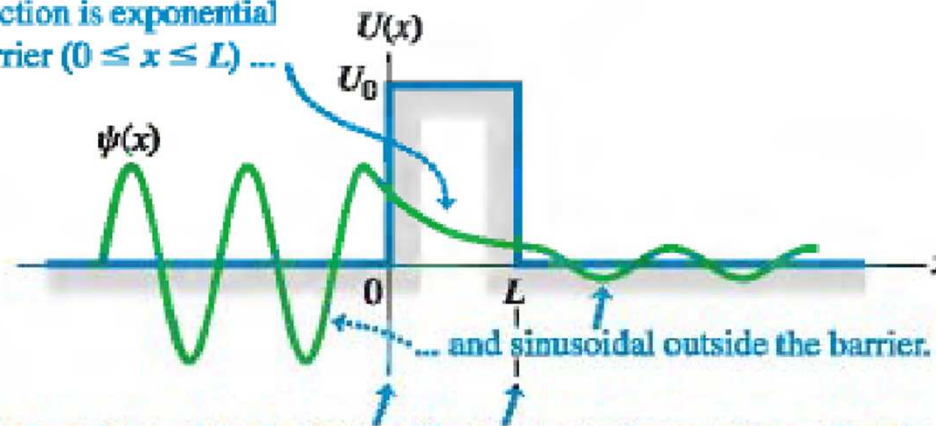
Adaptado de *Modern Physics*, Tipler

Barreiras de potencial e efeito de túnel

Barreiras de potencial



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

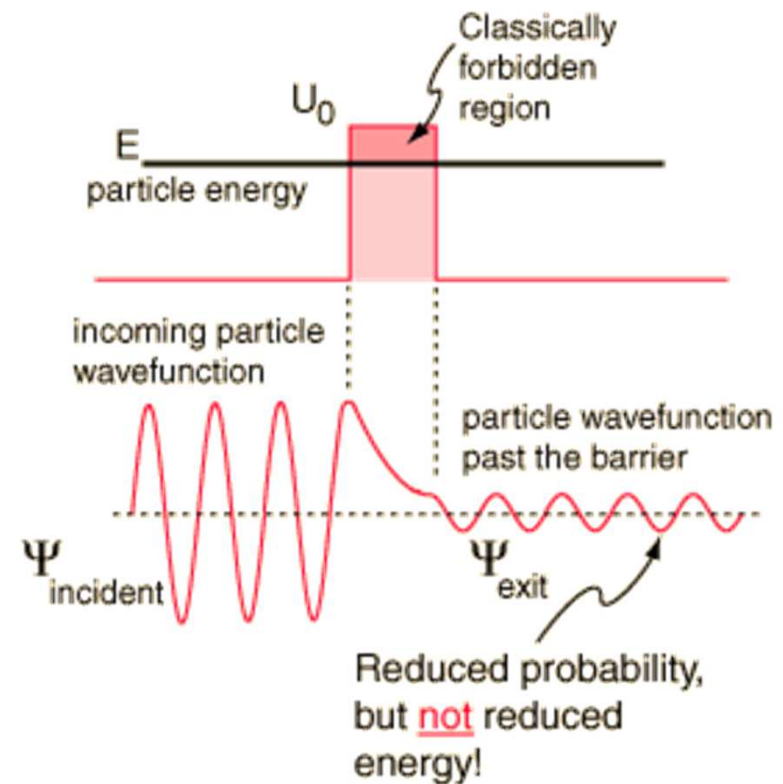
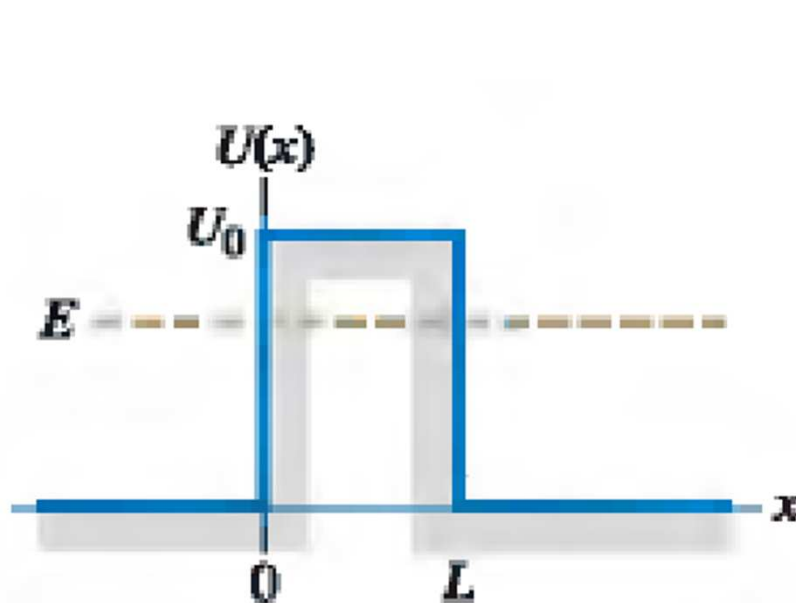


The function and its derivative (slope) are continuous at $x = 0$ and $x = L$ so that the sinusoidal and exponential functions join smoothly.

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

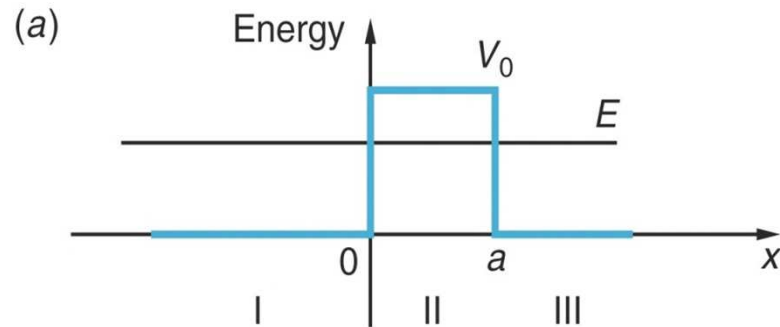
Barreiras de potencial e efeito de túnel

Barreiras de potencial

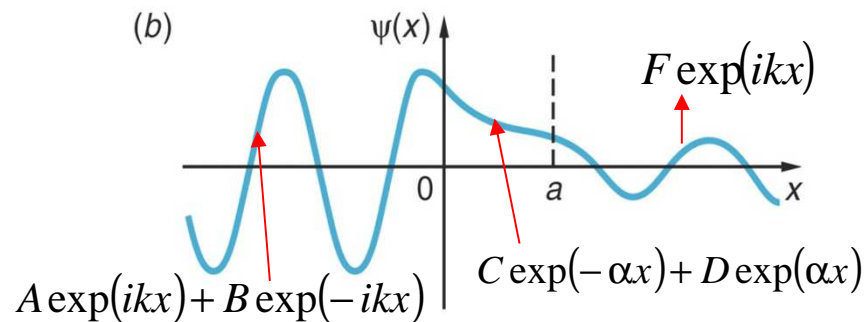


Numa barreira de potencial finita a função de onda é não nula na região da barreira, isto é, a probabilidade de encontrar a partícula dentro da barreira é finita. Se a barreira não for muito alta e muito larga, a probabilidade de encontrar a partícula do outro lado da barreira é diferente de zero.

Barreiras de potencial e efeito de túnel



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



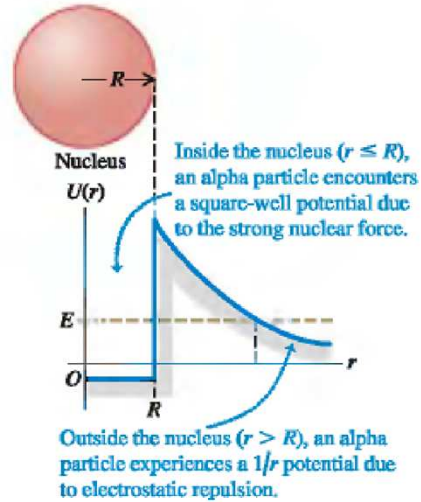
$$T(E) = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{\sinh^2 \alpha a}{4 \frac{E}{U_0} \left(1 + \frac{E}{U_0} \right)} \right]^{-1}$$

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

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

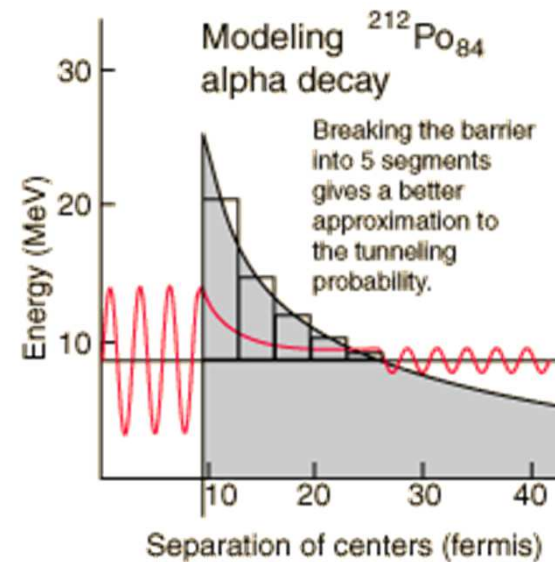
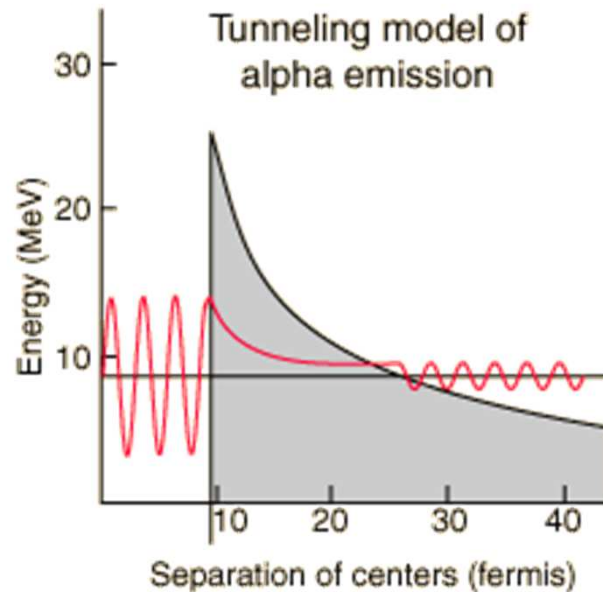
Exemplos de efeito de túnel na natureza

Decaimento alfa



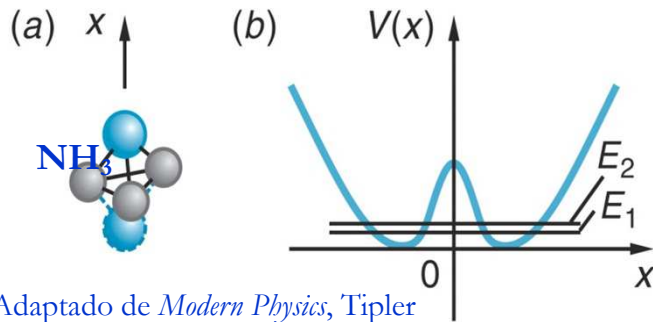
Decaimento alfa: Processo de decaimento radioactivo no qual o núcleo de um átomo emite uma partícula alfa, perdendo massa atómica igual a um átomo de 4He .

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



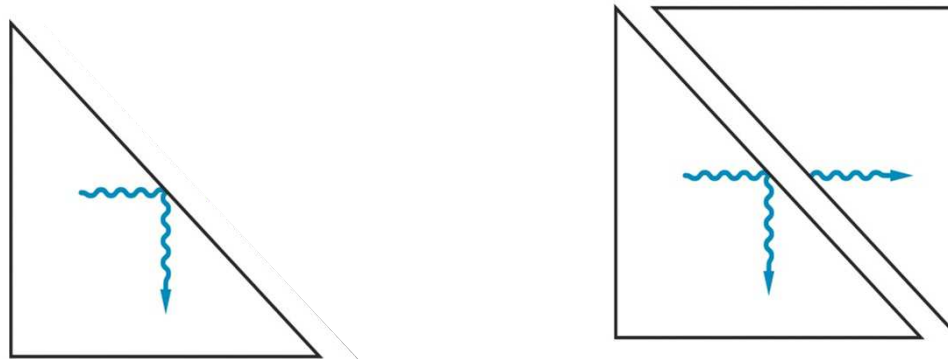
Exemplos de efeito de túnel na natureza

Relógio atômico de NH_3



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

Efeito de túnel óptico

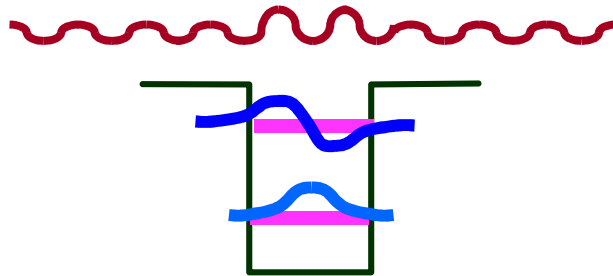


Copyright © 2003 by W. H. Freeman & Company

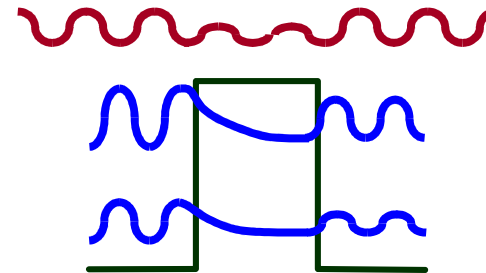
<http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/snef/xvi/cd/resumos/T0461-1.pdf>

Dupla barreira de potencial: efeito de túnel ressonante

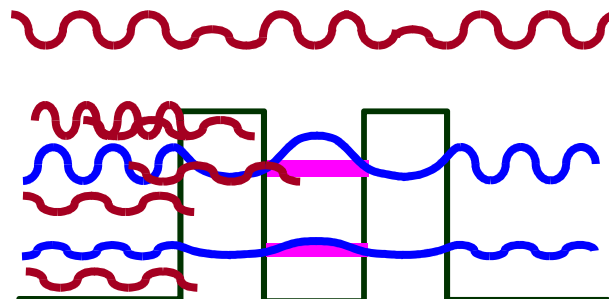
Poço quântico



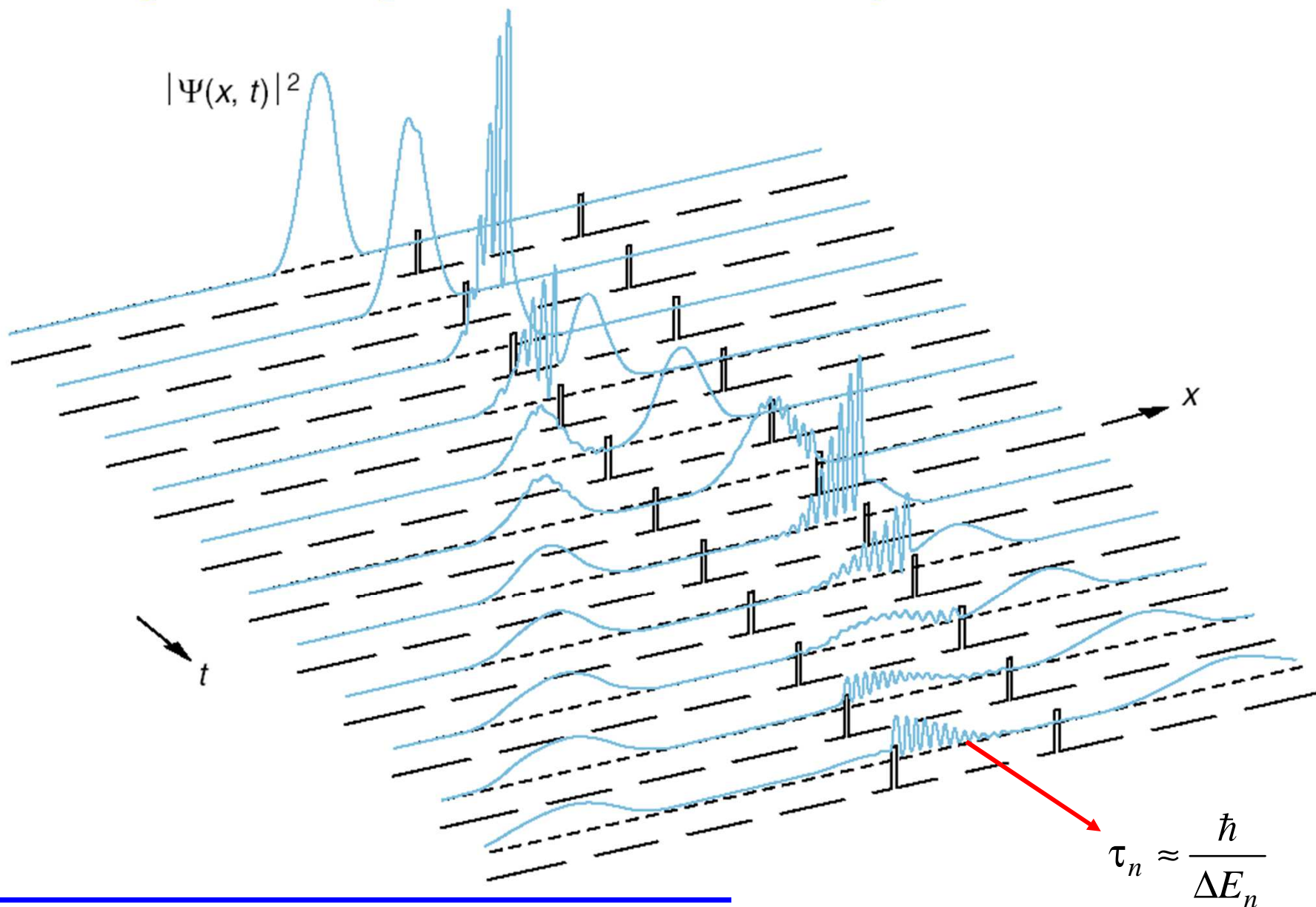
Barreira



Dupla barreira de potencial

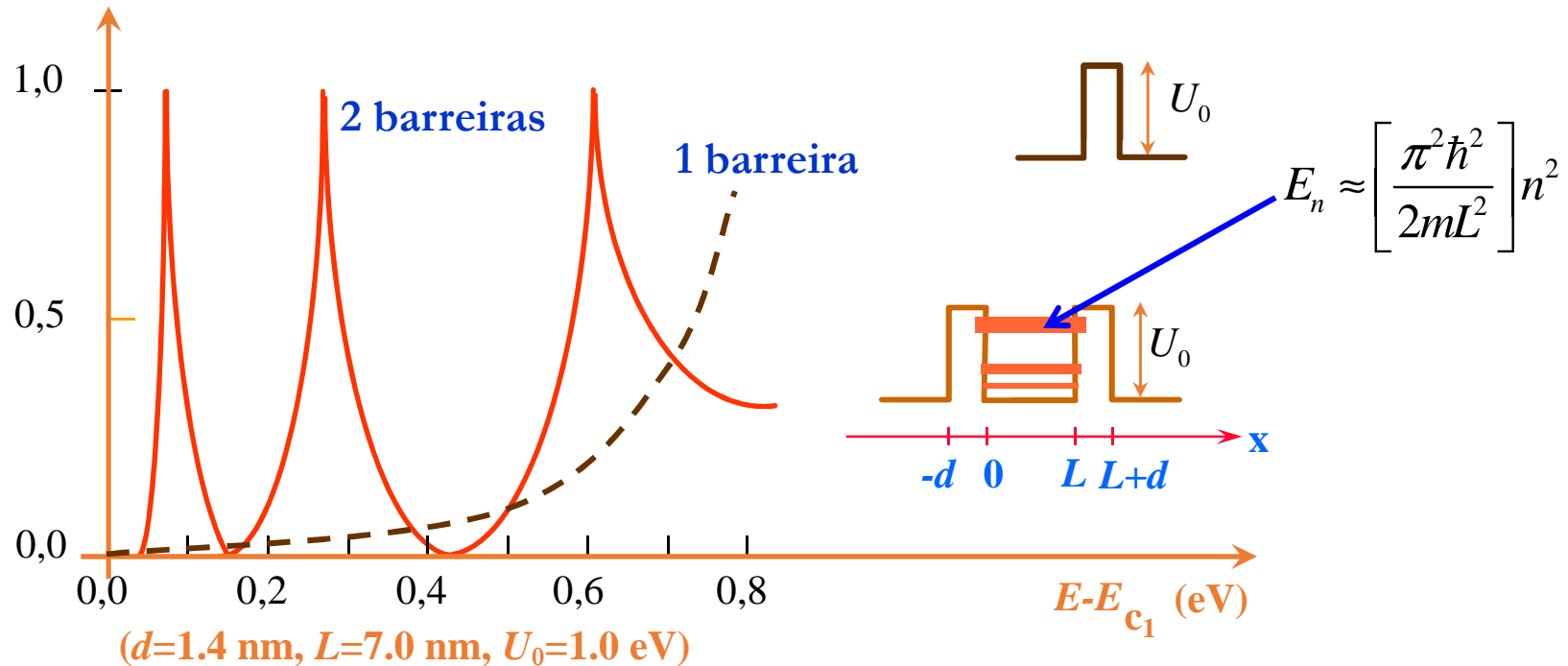


Evolução da função de onda numa dupla barreira



Dupla barreira de potencial: efeito de túnel ressonante

Probabilidade transmissão dos electrões



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

Microscópico de varrimento baseado no efeito de túnel

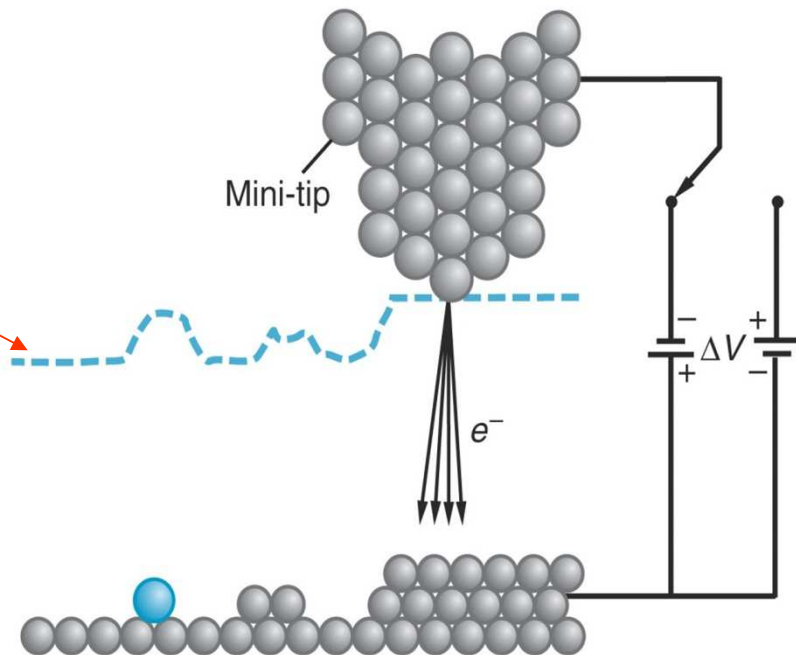
Scanning Tunneling Microscope (STM), 1980s

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

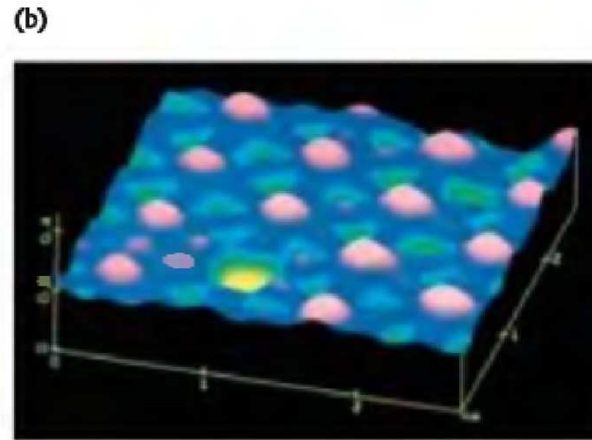
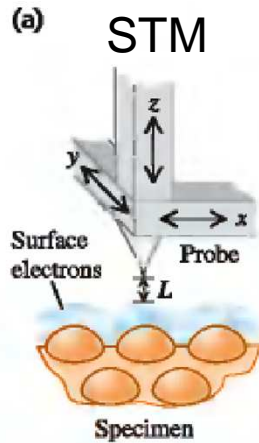
A corrente de túnel é extremamente sensível à largura da barreira. Uma variação de 0,5 nm na largura da barreira pode provocar uma alteração na intensidade de corrente de um factor de 10 000. À medida que a ponta de prova percorre a amostra, a corrente de túnel é mantida constante usando um sistema de 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.

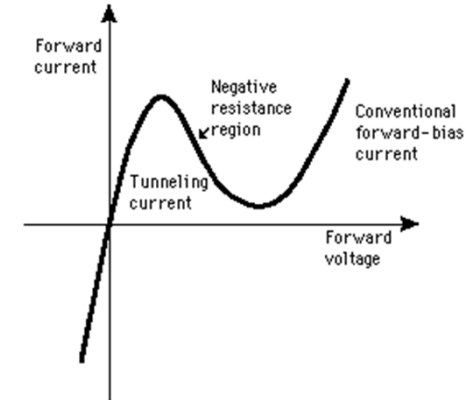
Piezoelectricidade ou piezelectricidade: electricidade desenvolvida em certos cristais quando se exercem pressões sobre as suas faces (de piez- + electricidade); piez(o)- elem. de formação de palavras que exprime a ideia de fazer pressão, comprimir, apertar (do gr. piézein, «fazer pressão»).

Aplicações do efeito túnel

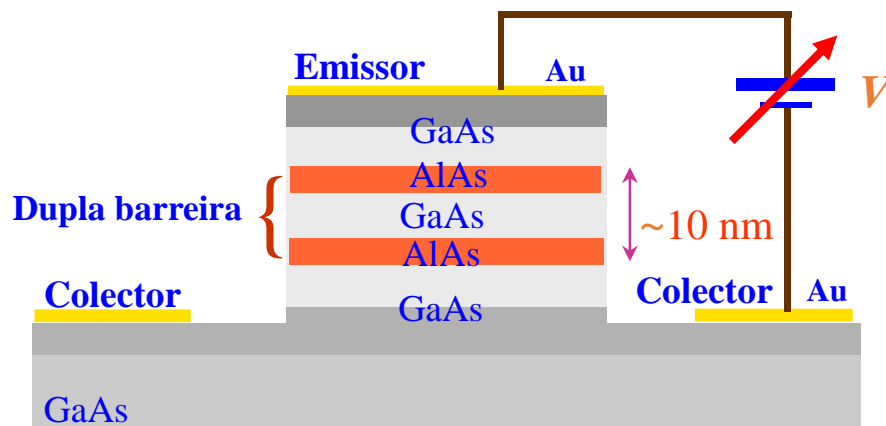
Scanning Tunneling Microscope



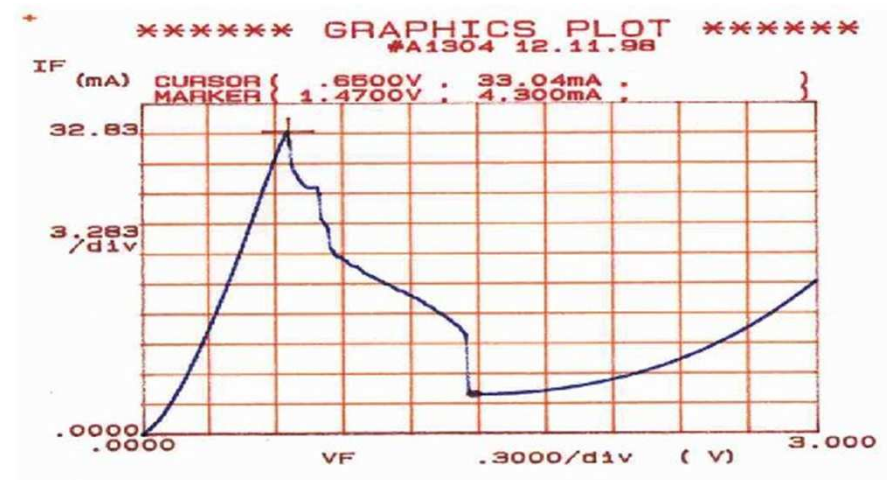
Díodo Túnel



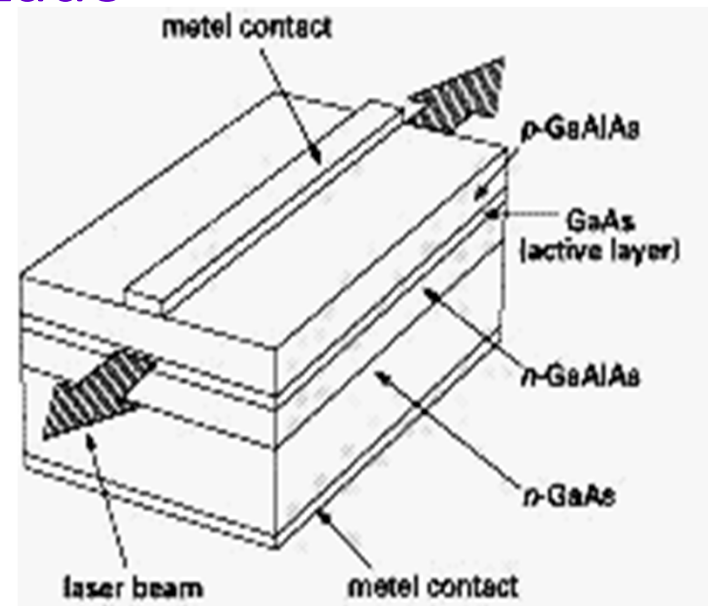
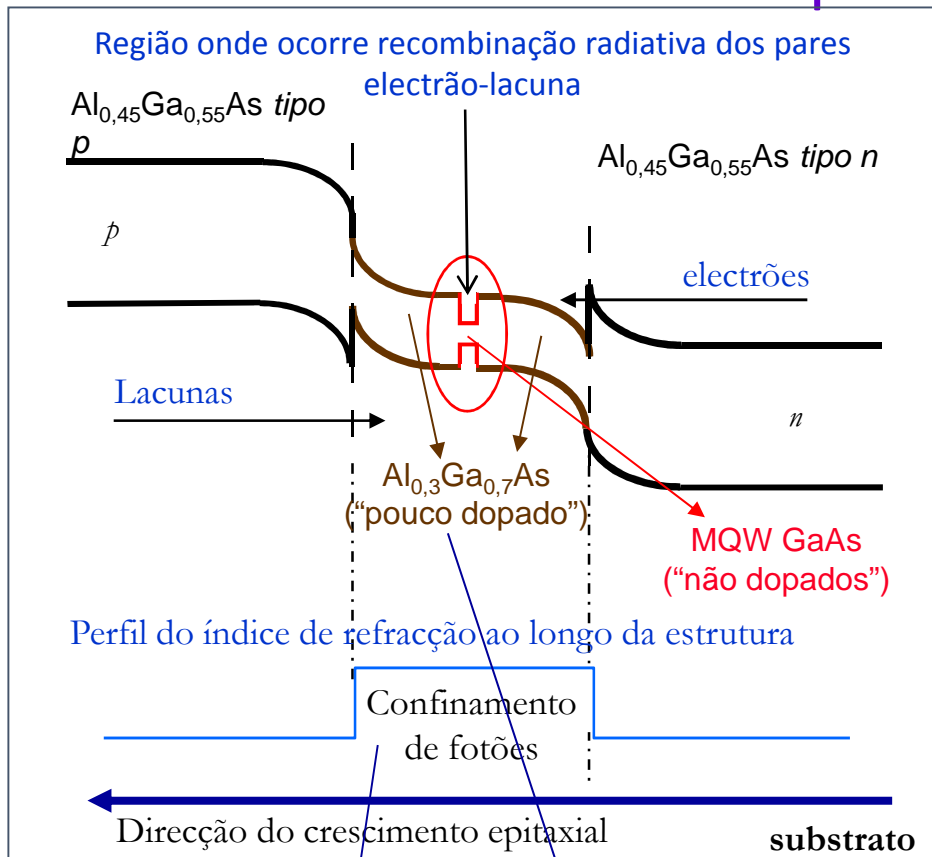
RTD: "Resonant Tunnelling Diode"



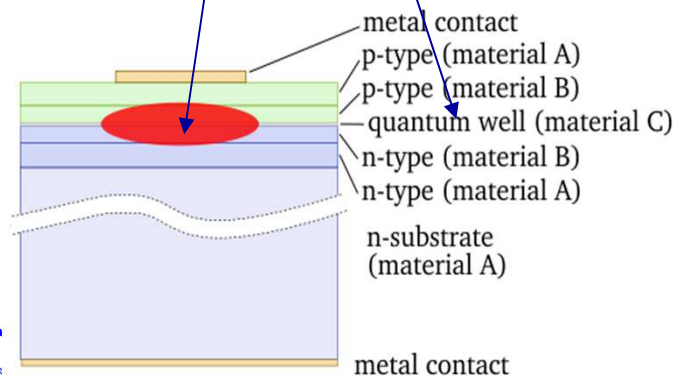
<http://nanohub.org/resources/6812/play>



Estrutura *básica* de um laser polarizado



Largura do poço
~ 10 nm



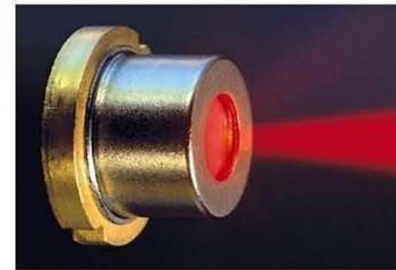
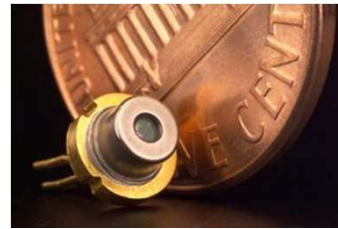
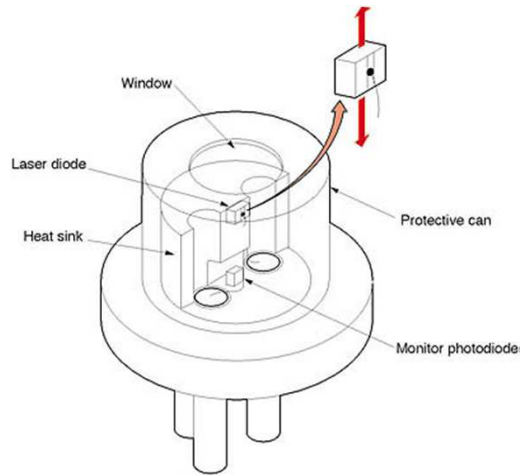
http://w3.ualg.pt/~jlongras/med_diode.mov

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

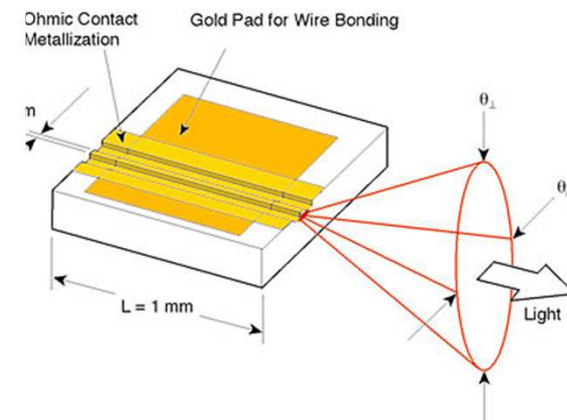
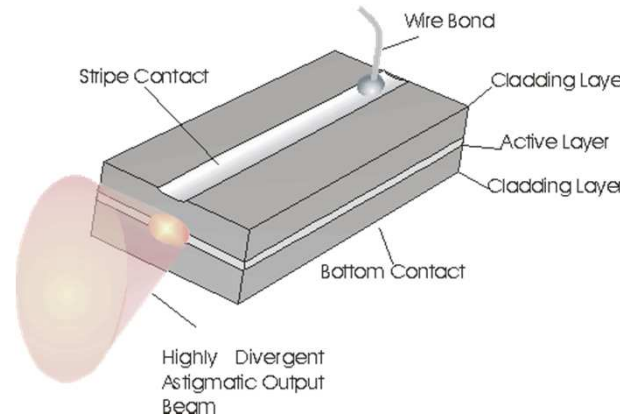
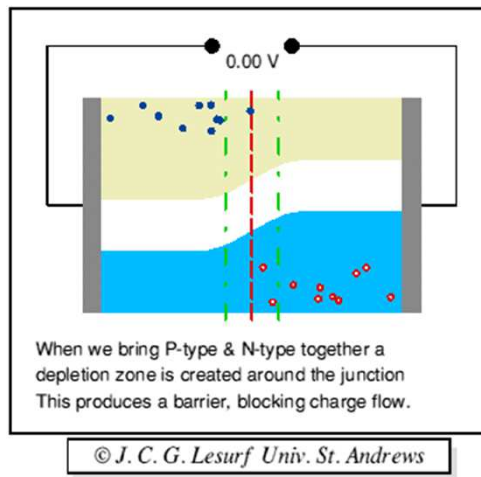
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/TxRxOp.mov>

Aplicação de poços quânticos: Laser de díodo (LD)

The Nobel Prize in Physics 2000



Ver http://webpages.ciencias.ulisboa.pt/~jmfigueiredo/anima/Laser_diode.mov

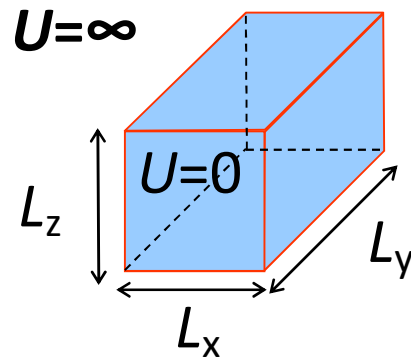


http://en.wikipedia.org/wiki/Laser_diode

Fios e pontos quânticos

Caixa a 3 dimensões (3D): pontos quânticos

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



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

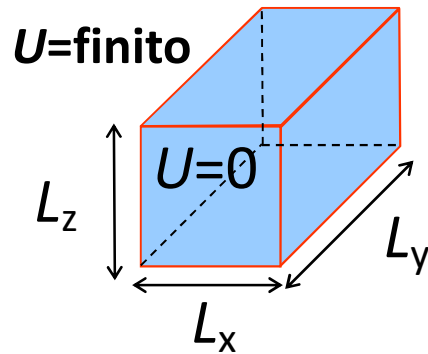
Uma solução possível:

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

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

Pontos quânticos *reais*

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

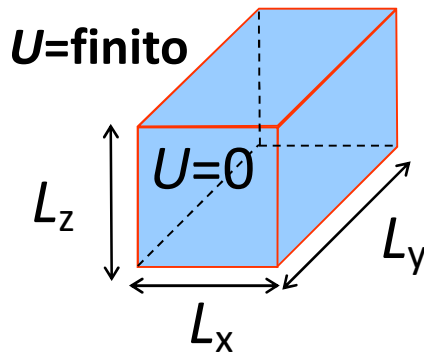


Numa primeira aproximação pode considerar-se:

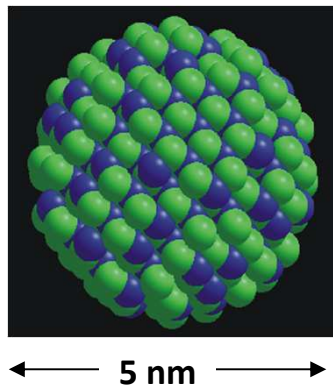
$$E_{n_x n_y n_z} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

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

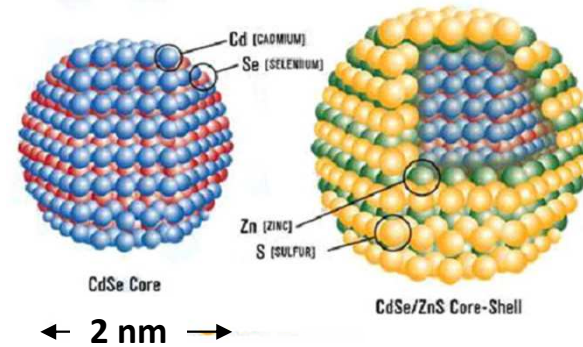
Exemplos de implementações práticas



QDs de InP



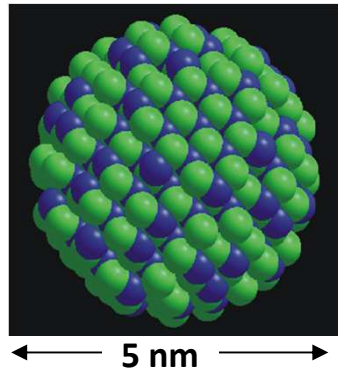
QDs de CdS



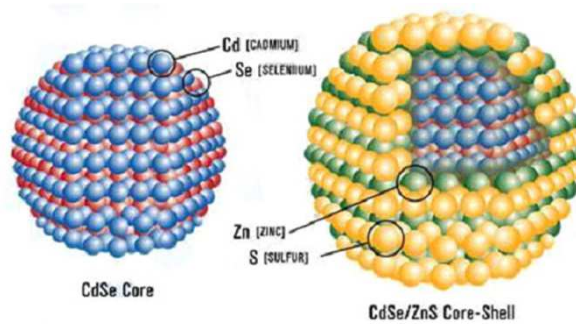
http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_dot

Propriedades espectroscópicas dos pontos quânticos

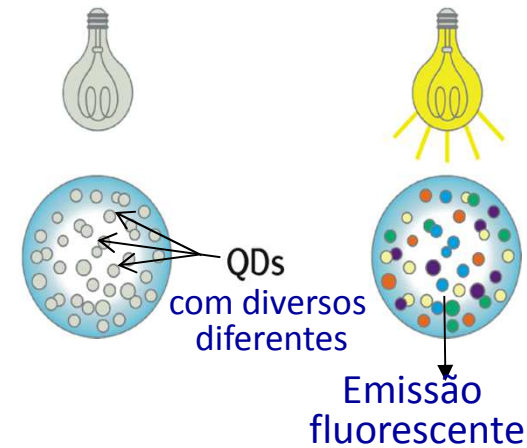
QDs de InP



QDs de CdS



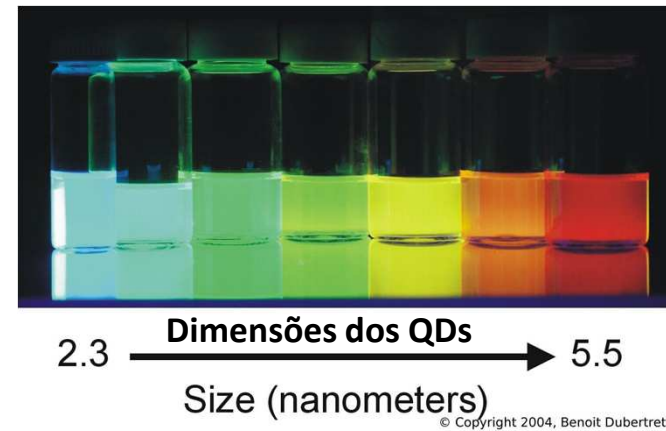
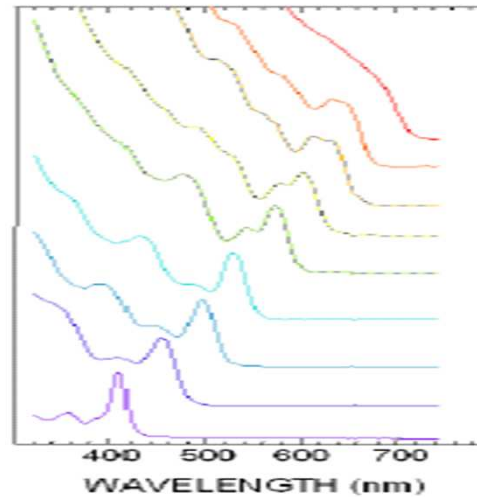
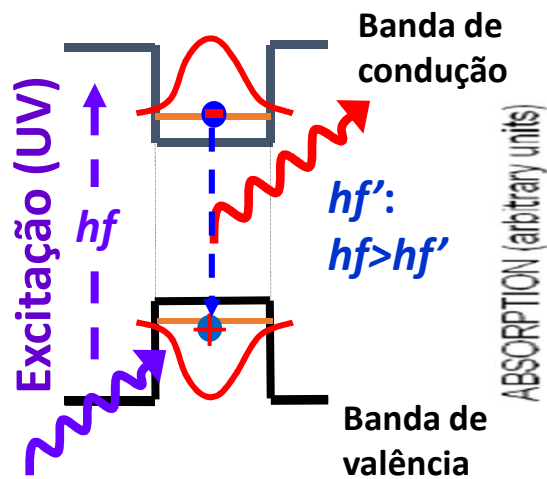
Luz ultravioleta



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

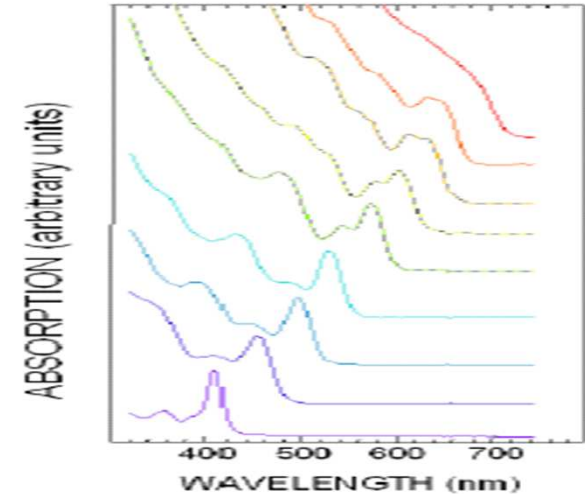
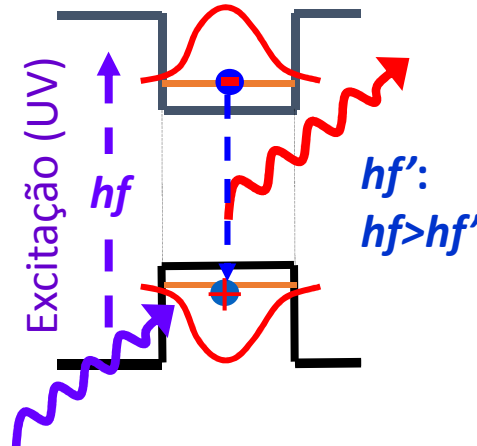
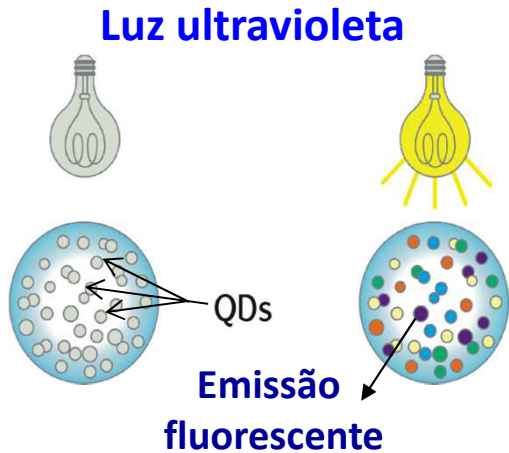
Alterando o tamanho, a forma, e a composição dos QDs, as propriedades espectroscópicas dos QDs alteram-se de forma dramática.

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

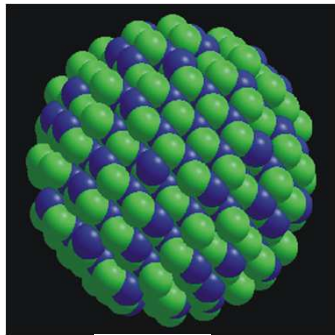


<http://www.evidenttech.com/quantum-dots-explained/how-quantum-dots-work.html>

Pontos quânticos reais



QDs de InP

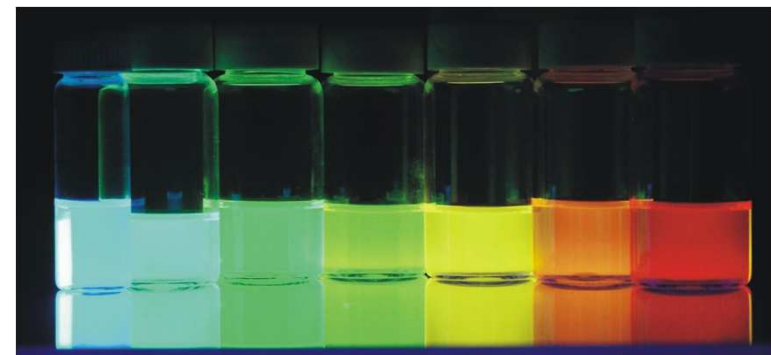


← 5 nm →

[gds-nasa.wmv](#)

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

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



2.3 → **Dimensão dos QDs** → 5.5

Size (nanometers)

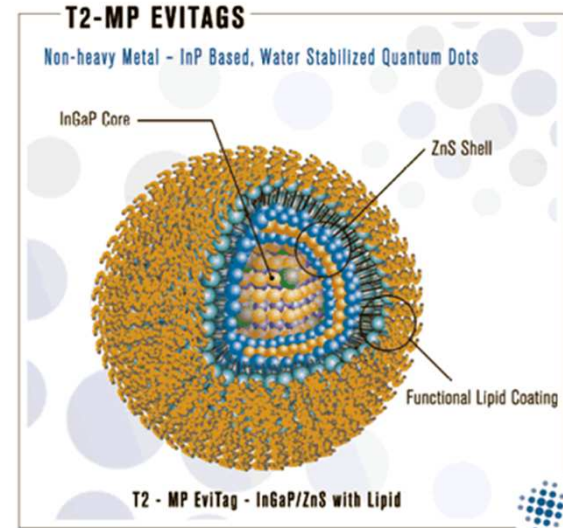
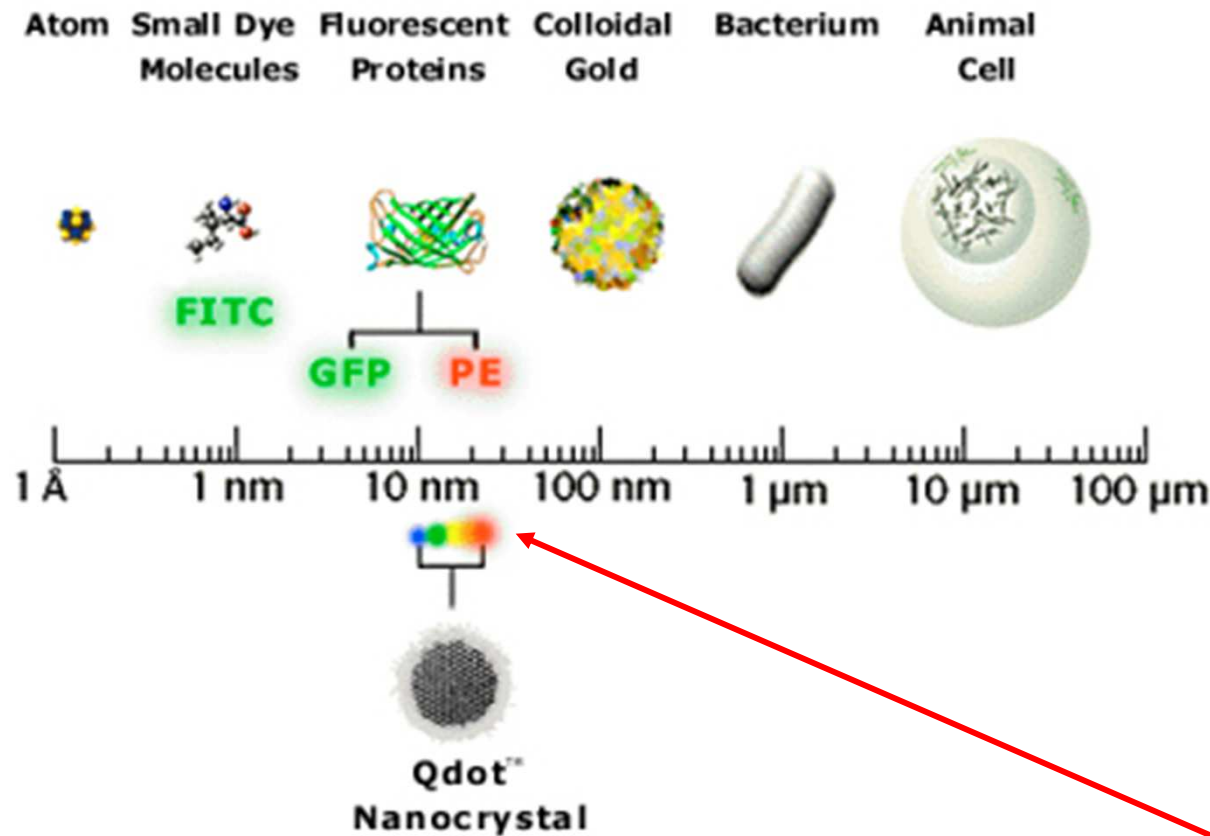
© Copyright 2004, Benoit Dubertret

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

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

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

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



qds-nasa.wmv

ocancro-e-quantum-dots.wmv

Fontes de luz



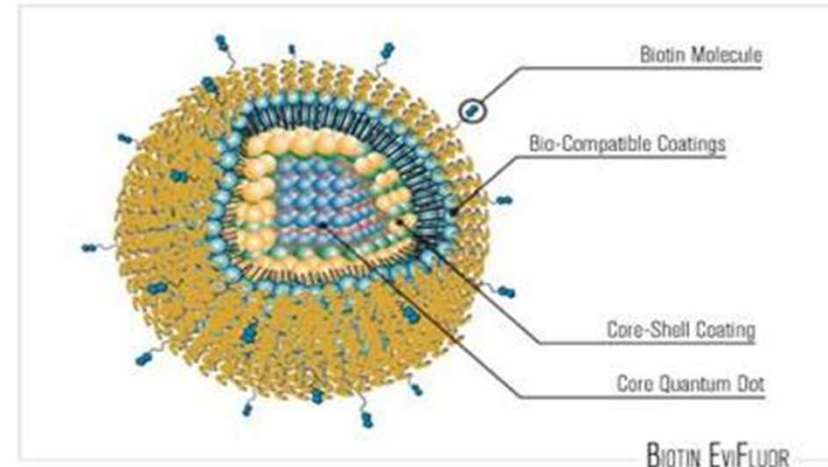
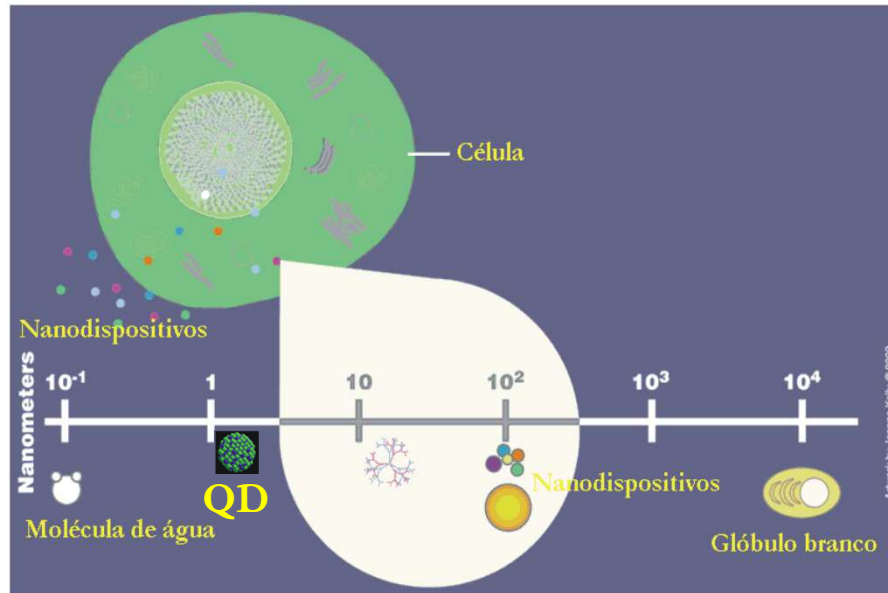
Alterando o tamanho, a forma, e a composição dos QDs, as **propriedades espectroscópicas** dos QDs alteram-se de forma dramática.

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

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

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

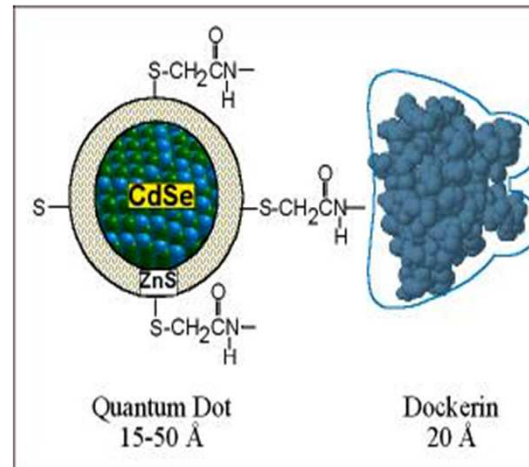
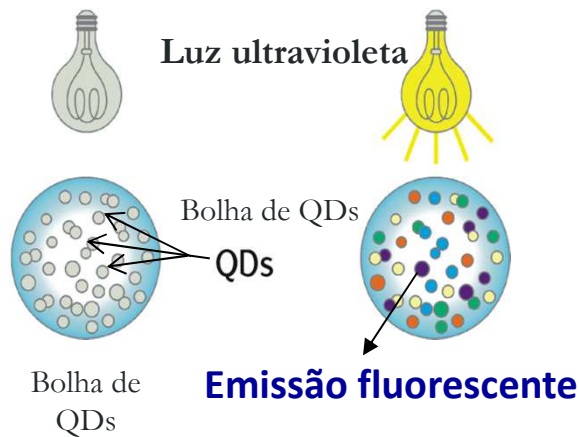
Aplicações de pontos quânticos na Medicina



qds-nasa.wmv

ocancro-e-quantum-dots.wmv

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

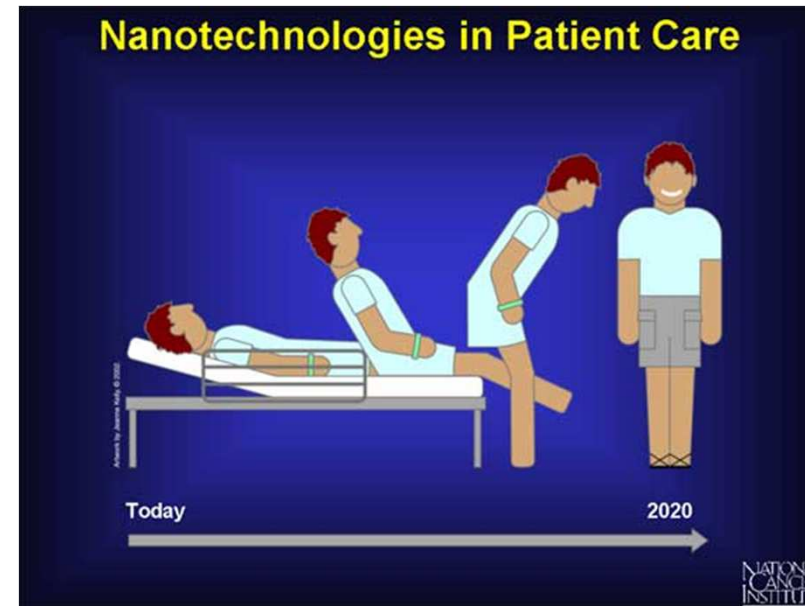
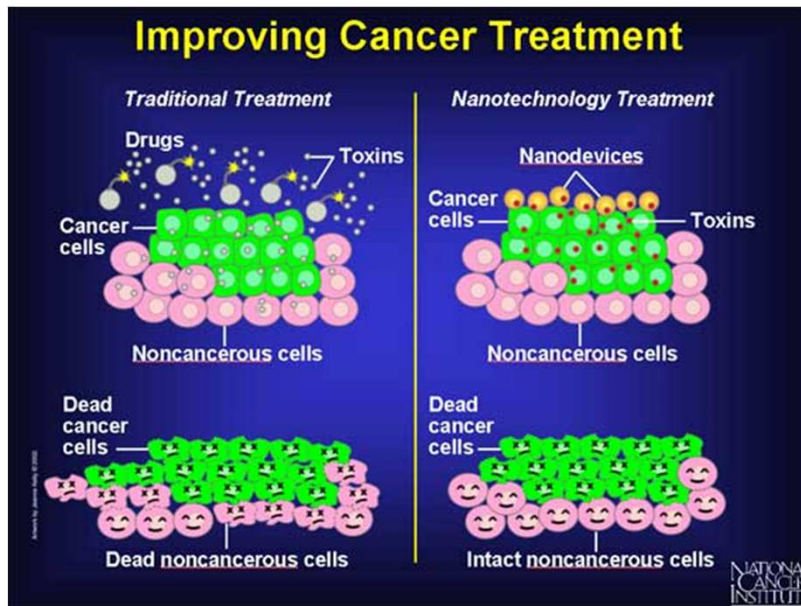
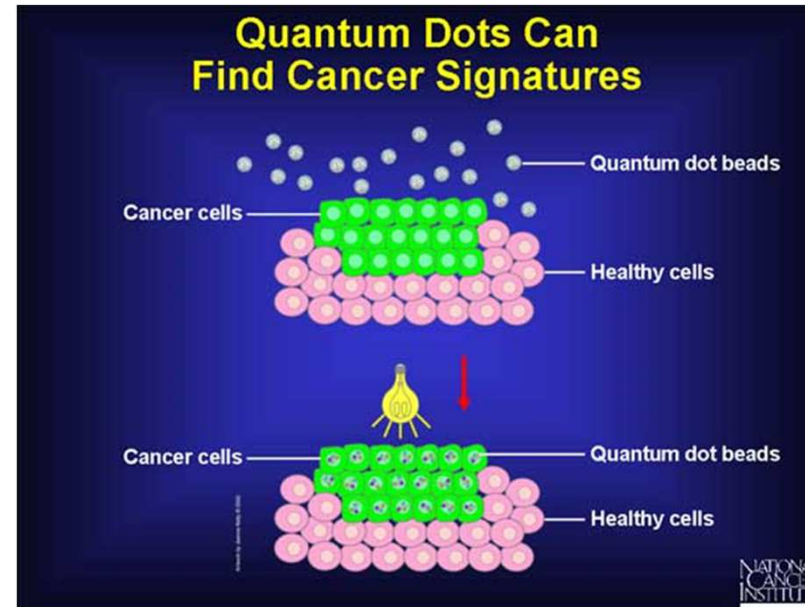
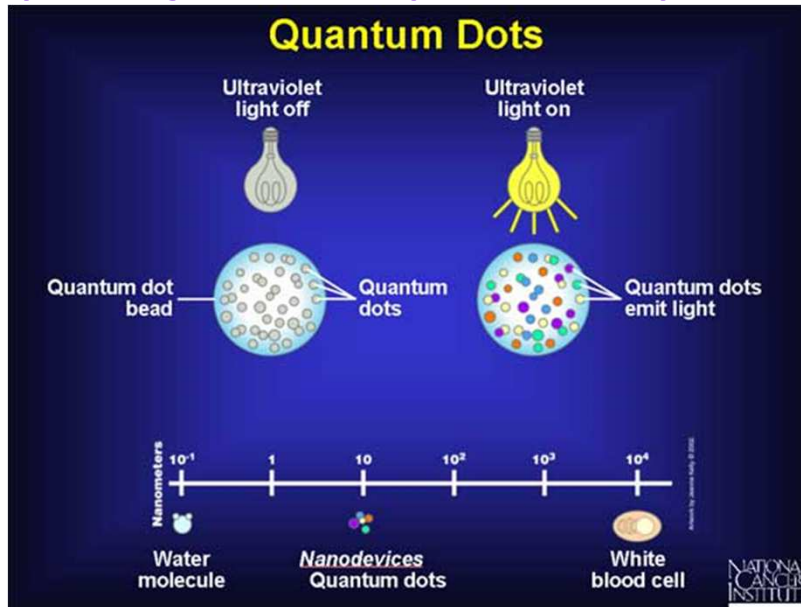


Bull's-eye. Red quantum dots injected into a live mouse mark the location of a tumor.

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

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

Aplicações de pontos quânticos em Medicina



Nanopartículas

Será o ouro sempre “amarelado”?

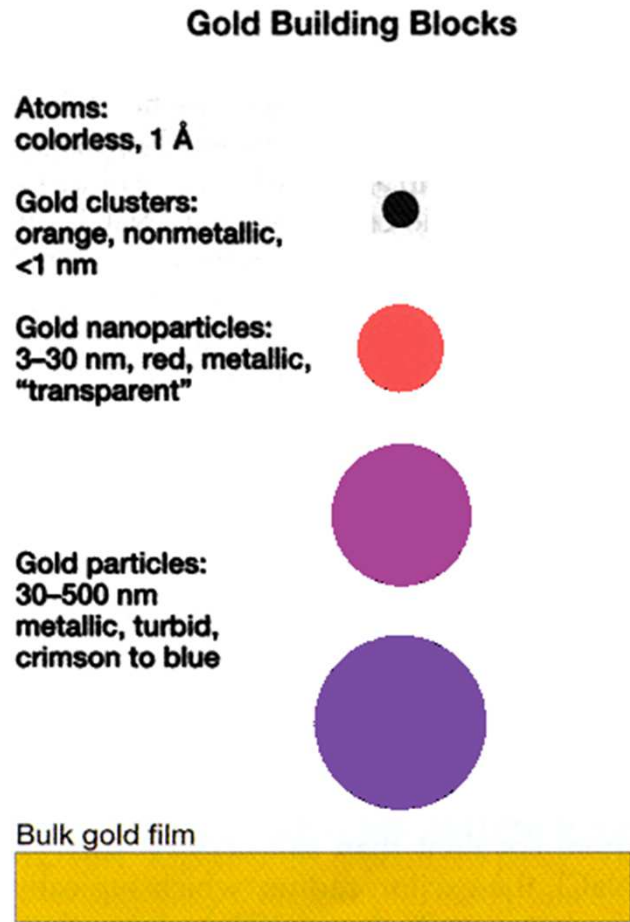


Figure 1. Gold building blocks, from the atomic to the mesoscopic, and their changing colors.

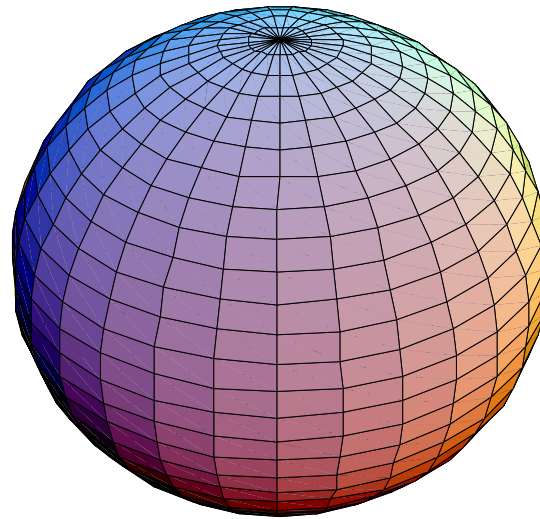
Una nanopartícula (nanopolvo, nanoracimo, o nanocristal) es una partícula microscópica con por lo menos una dimensión menor que **100 nm**. Actualmente las nanopartículas son un área de intensa investigación científica, debido a una amplia variedad de aplicaciones potenciales en los campos de [biomédicos](#),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

Imagens de nanopartículas

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

Nanopartículas

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



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

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

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

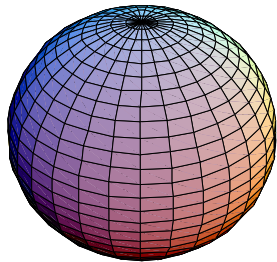
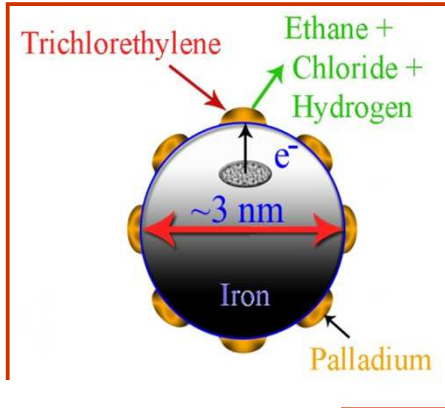
<http://www.abril.com.br/noticias/ciencia-saude/nanopartacula-ouro-pode-ajudar-tratar-doencas-como-cancer-412027.shtml>

Nanocristais poderão revolucionar energia solar

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

Nanopartículas

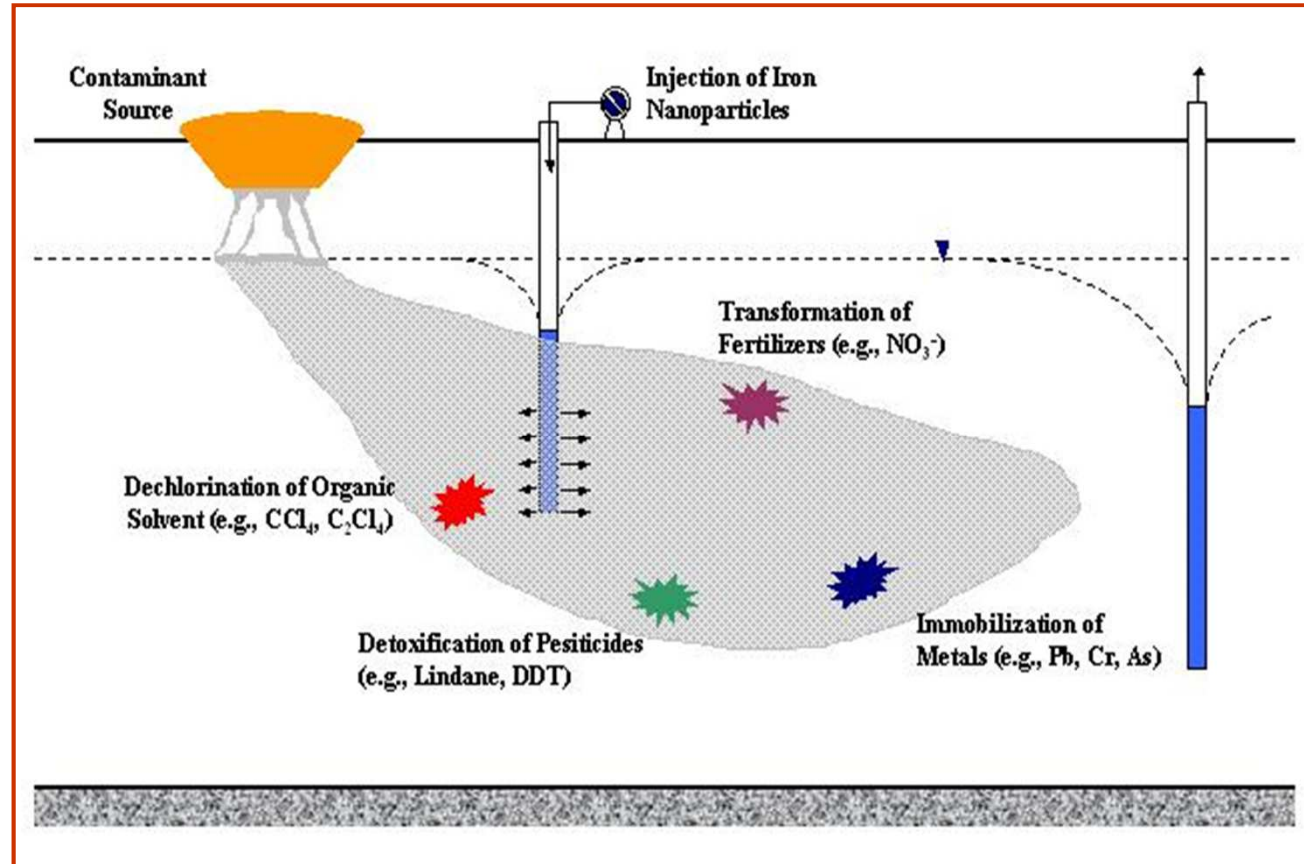
Nanopartícula de ferro como *despoluente* de água



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

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

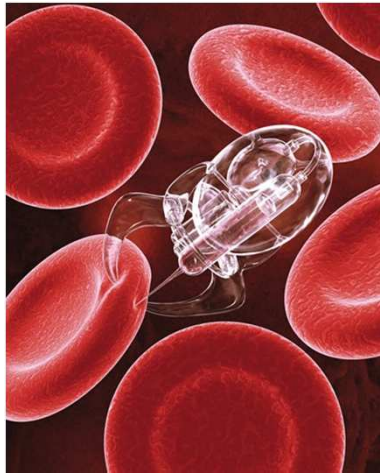
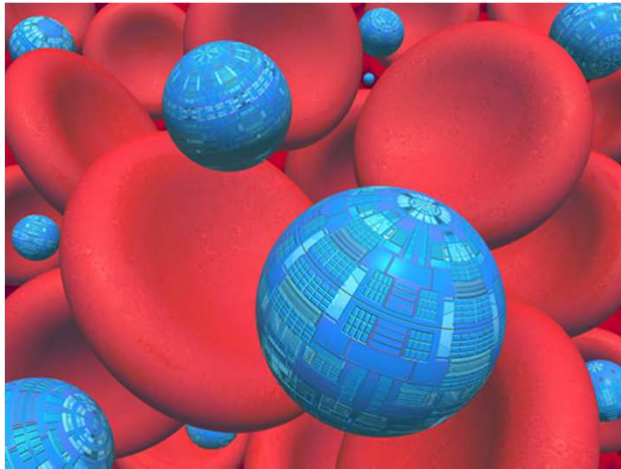
$$\frac{S}{V} = \frac{3}{R}$$



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

Nanotecnologia

Nano máquinas e nano robôs

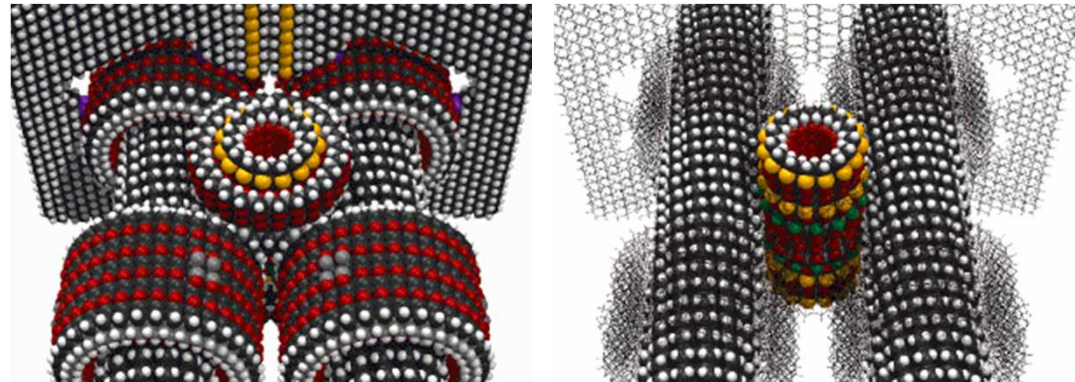


[Fantastic Voyage \(1966\)](#)

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

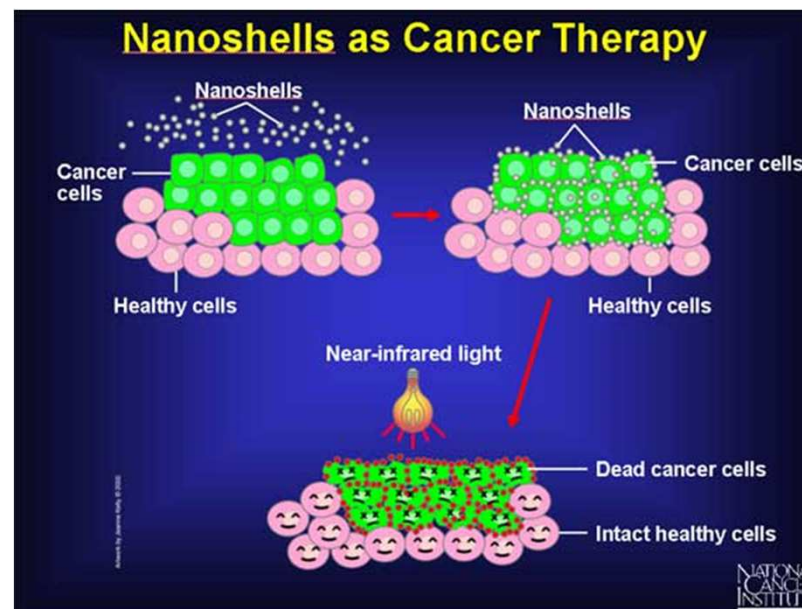
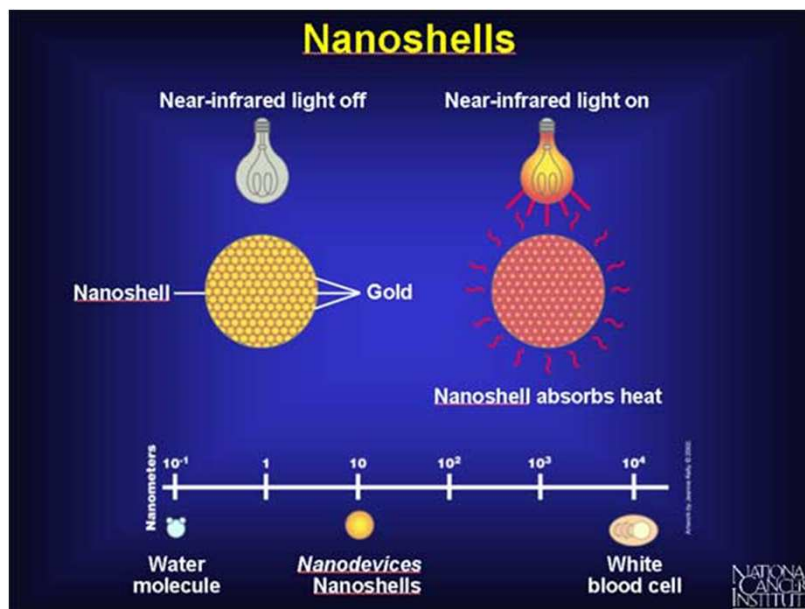
<http://nanoinformatic.org/>

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



Nanotecnologia e nanomedicina

Aplicações de nanopartículas em Medicina



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

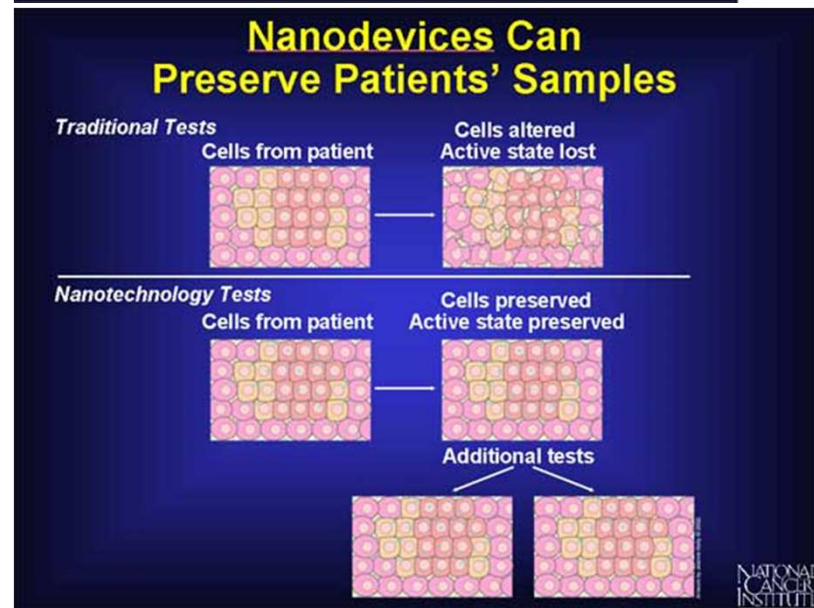
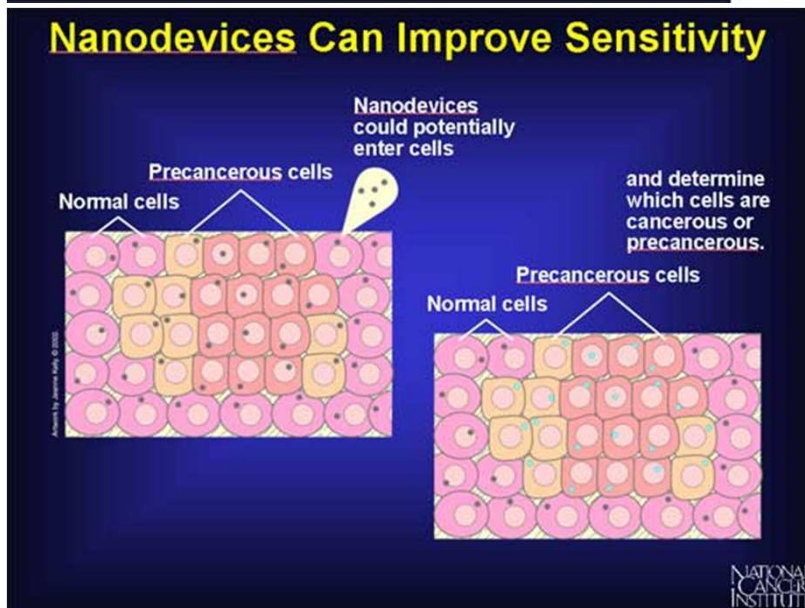
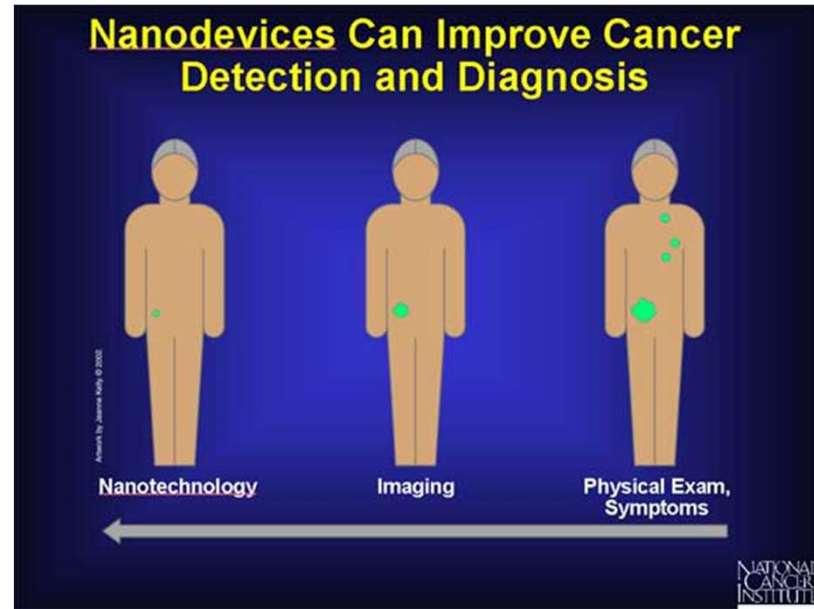
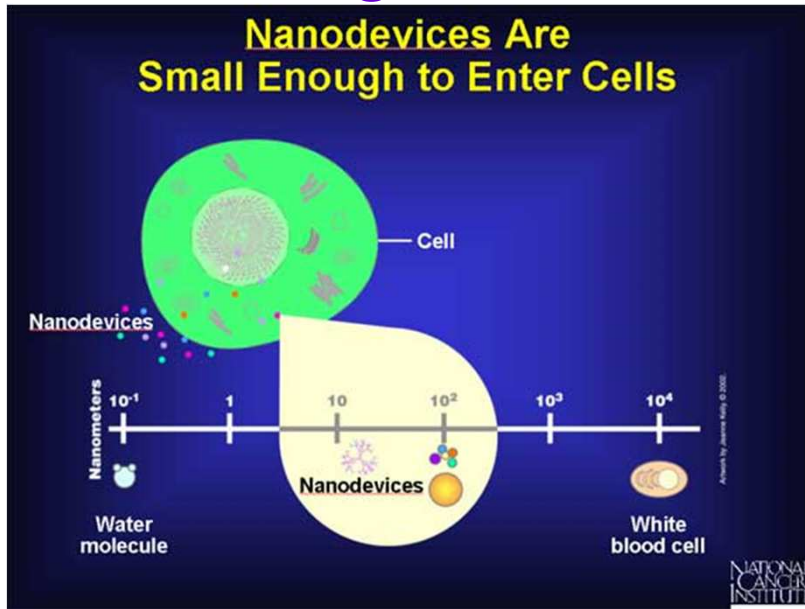
Segundo cientistas do Massachusetts Institute of Technology (MIT), o sistema torna possível liberar uma quantidade determinada de remédios em partes específicas do corpo durante intervalos controlados. Em reportagem, a BBC afirma que a tecnologia funciona porque as nanopartículas desenvolvidas pelo MIT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

ocancro-e-quantum-dots.wmv

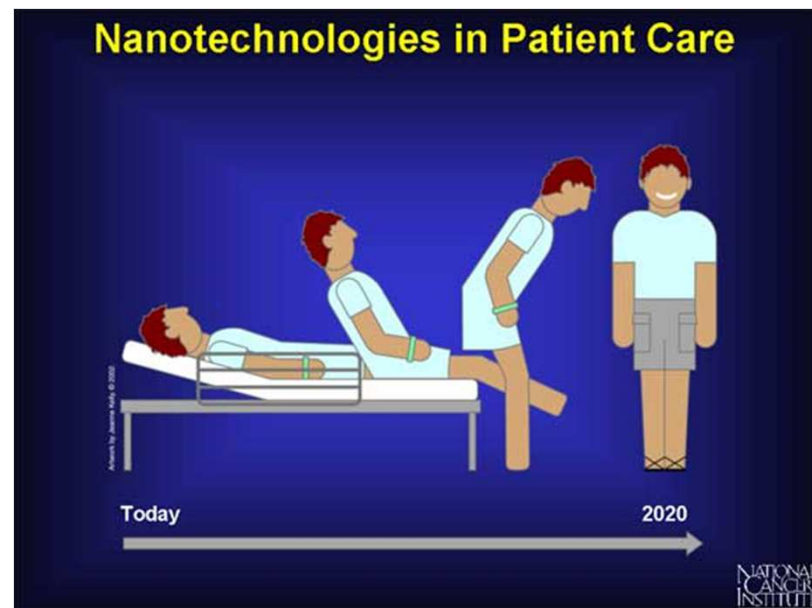
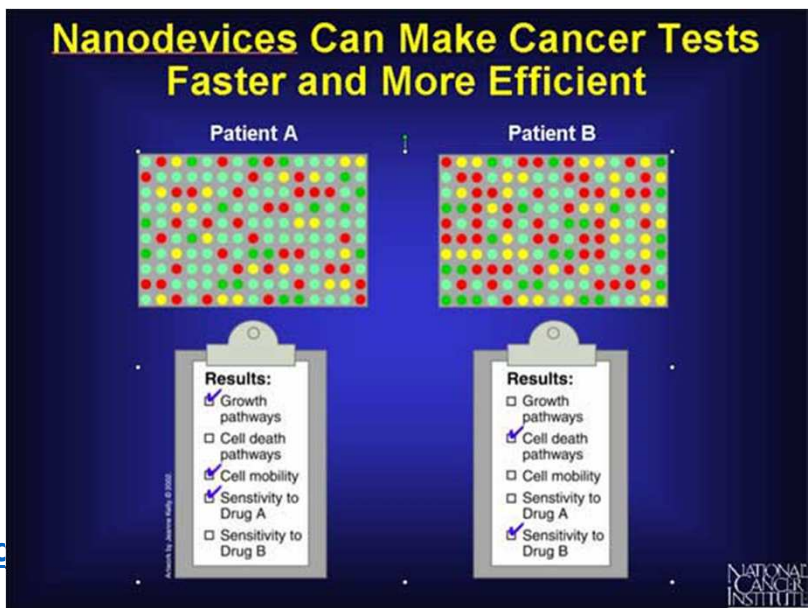
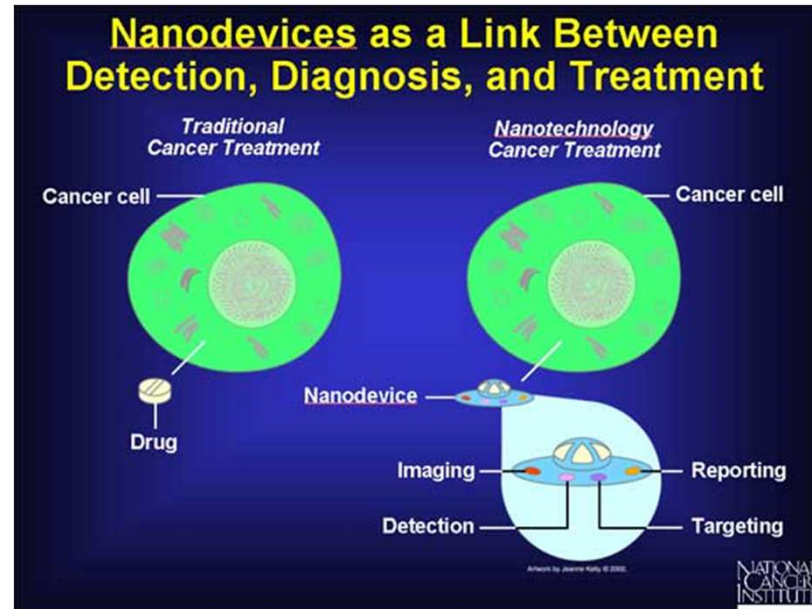
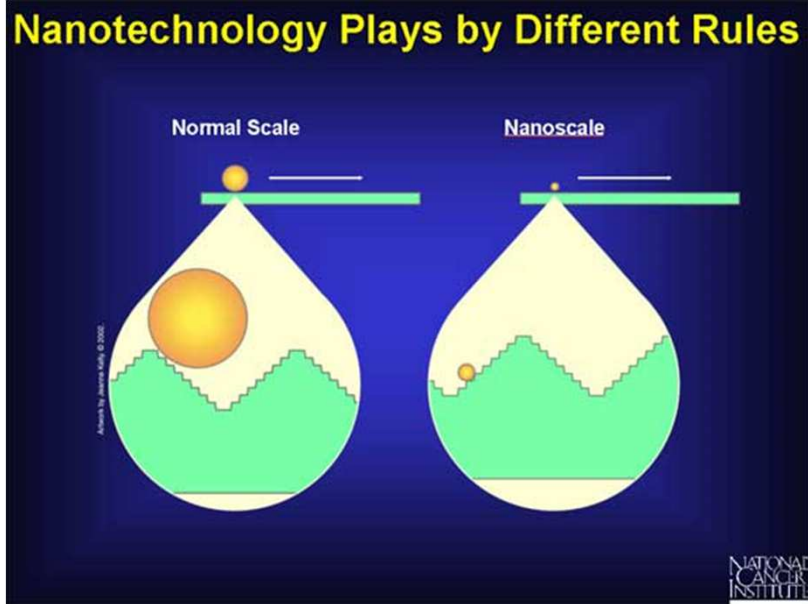
<http://w3.ualg.pt/~jlongras/qds-nasa.wmv>

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

Nanotecnologia e a Medicina



Nanotecnologia e a Medicina



ocanc