



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
Escola de Engenharia de Lorena – EEL

*“LOB1021 - FÍSICA IV”*

*Prof. Dr. Durval Rodrigues Junior*

*Departamento de Engenharia de Materiais (DEMAR)*

*Escola de Engenharia de Lorena (EEL)*

*Universidade de São Paulo (USP)*

*Polo Urbo-Industrial, Gleba AI-6 - Lorena, SP 12600-970*

*[durval@demar.eel.usp.br](mailto:durval@demar.eel.usp.br)*

*[www.demar.eel.usp.br/docentes](http://www.demar.eel.usp.br/docentes) ou [www.eel.usp.br](http://www.eel.usp.br) (Página dos professores)*

Rodovia Itajubá-Lorena, Km 74,5 - Caixa Postal 116  
CEP 12600-970 - Lorena - SP  
Fax (12) 3153-3133  
Tel. (Direto) (12) 3159-5007/3153-3209

USP Lorena  
[www.eel.usp.br](http://www.eel.usp.br)

Polo Urbo-Industrial Gleba AI-6 - Caixa Postal 116  
CEP 12600-970 - Lorena - SP  
Fax (12) 3153-3006  
Tel. (PABX) (12) 3159-9900

# **UNIDADE 9 -**

## **Mais Ondas de Matéria**

# Estados ligados

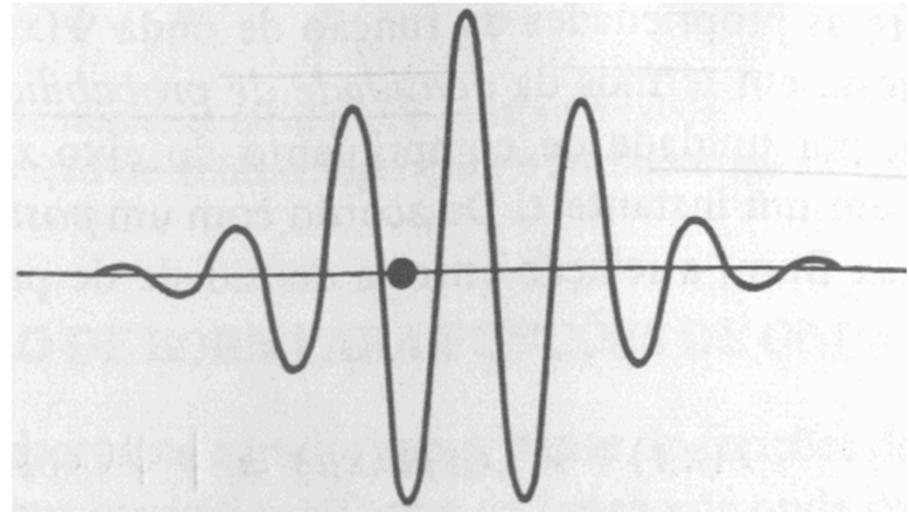
Vimos, até agora, 3 postulados da Mecânica Quântica:

a) Toda partícula possui uma função de onda  $\Psi$  associada a ela.

b) A forma e a evolução temporal desta  $\Psi$  é determinada pela **equação de Schrödinger**.

c) Dada a função  $\Psi(x,t)$ , a densidade de probabilidade da partícula ser encontrada em um ponto  $x$ , num dado instante  $t$ , é dada por:

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$



# A Equação de Schrödinger e a Quantização de Energia

Quando a relação entre a **energia total** de uma partícula e sua **energia potencial** é tal que *classicamente a partícula estaria confinada* a uma região limitada do espaço ( $E < V$ ), pois senão a energia cinética excederia a energia total fora da região, a teoria de Schrödinger prevê que a **energia total da partícula é quantizada**.

Quando a partícula *não estiver confinada* em uma região limitada, então a teoria prevê que *a sua energia total pode apresentar qualquer valor*.

# O átomo na “Antiga” Mecânica Quântica

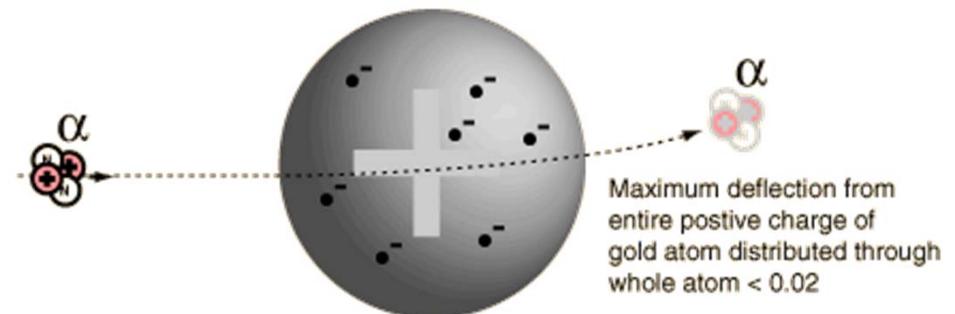
- Por volta de 1910 acumularam-se inúmeras evidências experimentais de que os átomos continham elétrons (aquelas partículas que compunham os raios catódicos e conduziam a eletricidade).

Mas os átomos eram neutros. Portanto, deviam possuir uma quantidade igual de carga positiva.

## Modelo de Thomson (1910)

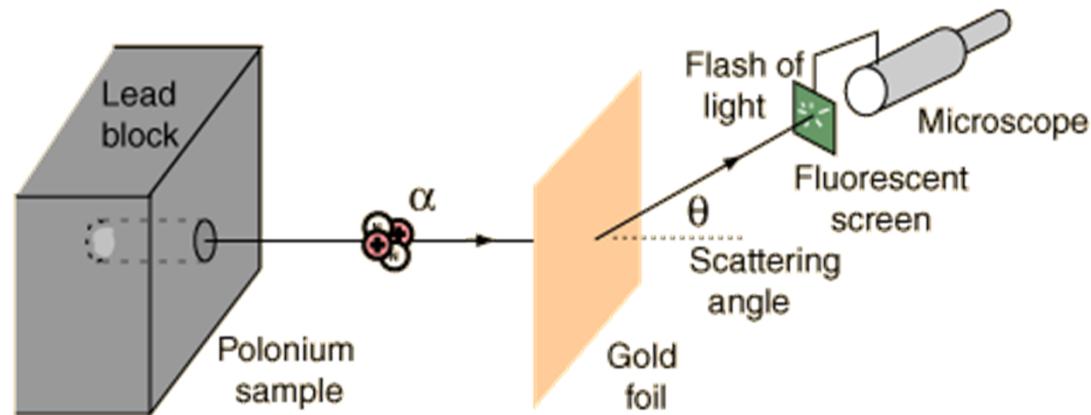
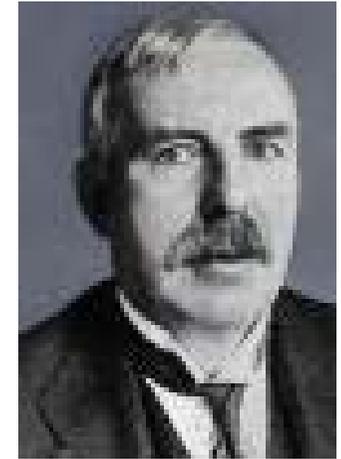
Os átomos seriam compostos por elétrons pontuais, distribuídos numa massa de carga positiva uniforme: Modelo do “*pudim de passas*”.

Modelo de Thomson: previa uma deflexão pequena das partículas  $\alpha$

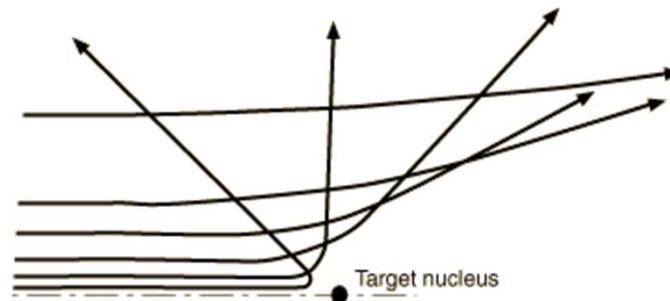


## Exemplo histórico: estrutura do átomo

- Ernest Rutherford (1911): descobriu a **estrutura nuclear** do átomo. Primeiro experimento de colisão de partículas sub-atômicas.



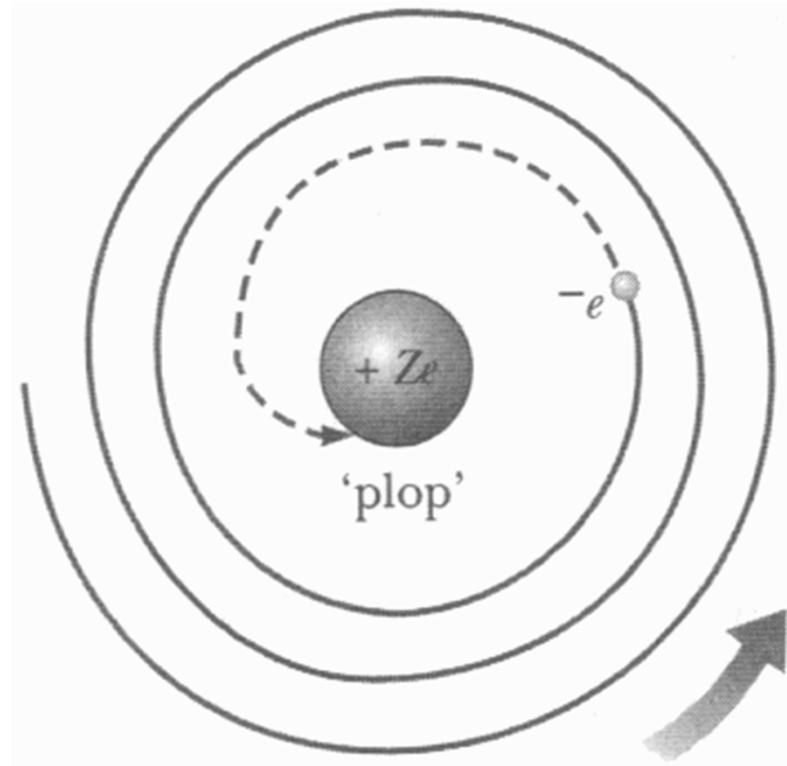
*Rutherford observou grandes deflexões, sugerindo um núcleo duro e pequeno*



# O átomo na “Antiga” Mecânica Quântica

- Rutherford então propôs um modelo no qual toda a carga positiva dos átomos, que comportaria praticamente toda a sua massa, estaria concentrada numa pequena região do seu centro: *o núcleo*. Os elétrons, então, ficariam orbitando em torno deste núcleo: Modelo “*planetário*”.

Entretanto, estes elétrons em órbita estariam acelerados (aceleração centrípeta). Assim, **segundo o eletromagnetismo**, deveriam **emitir energia** na forma de radiação eletromagnética, até **colapsarem para o núcleo!**



# O modelo atômico de Bohr (1913)



## Motivação experimental:

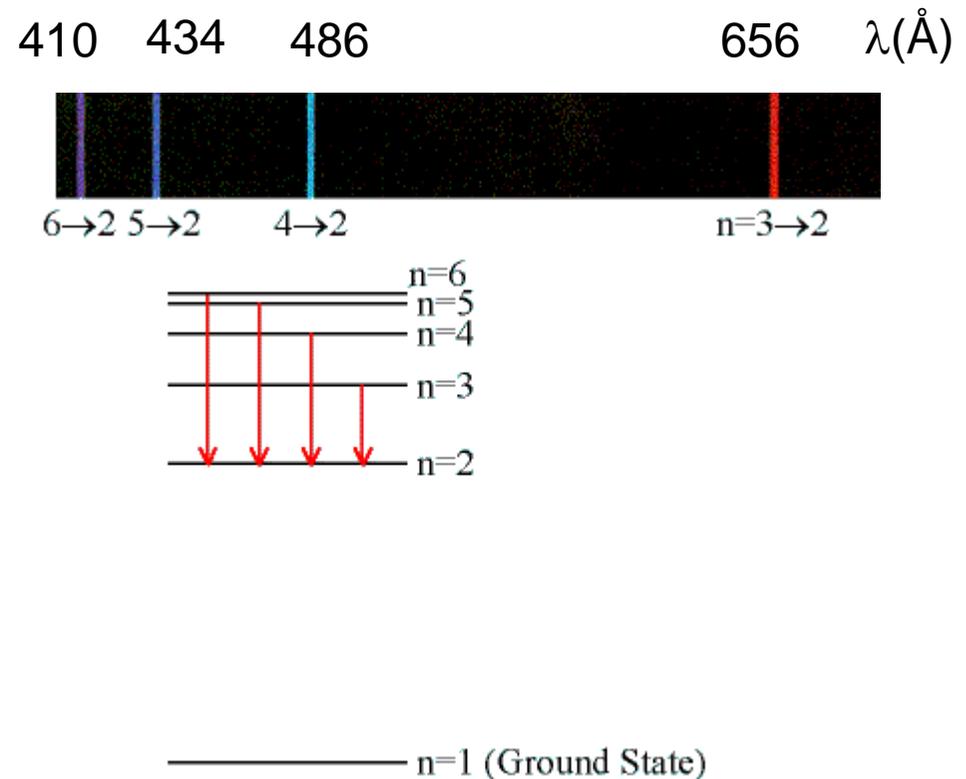
Experimentos de espectroscopia de átomos de H apresentavam raias espectrais discretas :

*Série de Balmer*

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n=3, 4, 5, \dots$$

$$R_H = 109,677 \text{ cm}^{-1}$$



# O modelo atômico de Bohr (1913)

Baseado na idéia da “quantização” e da existência dos fótons, Bohr introduziu o seu modelo para o **átomo de hidrogênio**, baseado em 4 postulados:

- 1) Um elétron se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana do núcleo, (mecânica clássica).
- 2) O elétron só pode se mover em órbitas que apresentem **momentos angulares  $L$  “quantizados”**:

$$L = n\hbar \quad n = 1,2,3,\dots \quad (\hbar = h/2\pi)$$

# O modelo atômico de Bohr (1913)

- 3) O elétron fica em *órbitas “estacionárias”* e **não emite radiação eletromagnética**. Portanto, a sua energia total  **$E$**  **permanece constante**.
- 4) **Radiação é emitida** se um elétron, que se move inicialmente numa órbita de energia  $E_i$ , muda para uma órbita de energia  $E_f$  menor que  $E_i$ . A frequência da radiação emitida é dada por:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

Em outras palavras, o átomo emite um *fóton*.

# O modelo atômico de Bohr (1913)

Considerando o núcleo em repouso, a força elétrica no elétron é dada por

$$F = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2}$$

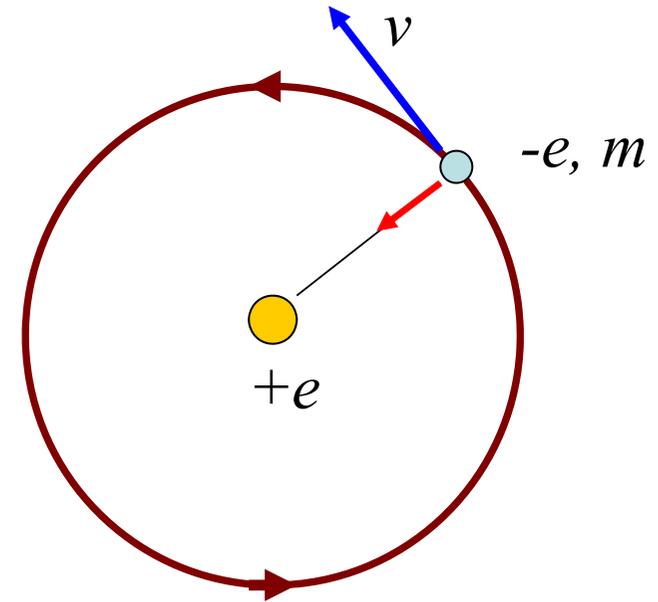
Para uma órbita circular:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

Se  $L = rmv$   
e  $L = n\hbar$  }  $\Rightarrow v = \frac{n\hbar}{rm}$

$$\Rightarrow r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2$$

Quantização das órbitas!



# O modelo atômico de Bohr (1913)

Portanto, Bohr prevê que as órbitas têm raios:

$$r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2 \quad \text{ou} \quad r_n = r_0 n^2$$

com

$$r_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \quad \text{ou} \quad r_0 = 0,5291 \text{ \AA}$$

Mas:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} + \left( -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Assim, a energia das diferentes órbitas serão dadas por:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} eV$$

# O modelo atômico de Bohr (1913)

As frequências emitidas nas transições seriam:

$$\nu_{n \rightarrow n'} = \frac{E_{n'} - E_n}{h} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{n \rightarrow n'}} = \frac{\nu_{n \rightarrow n'}}{c} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

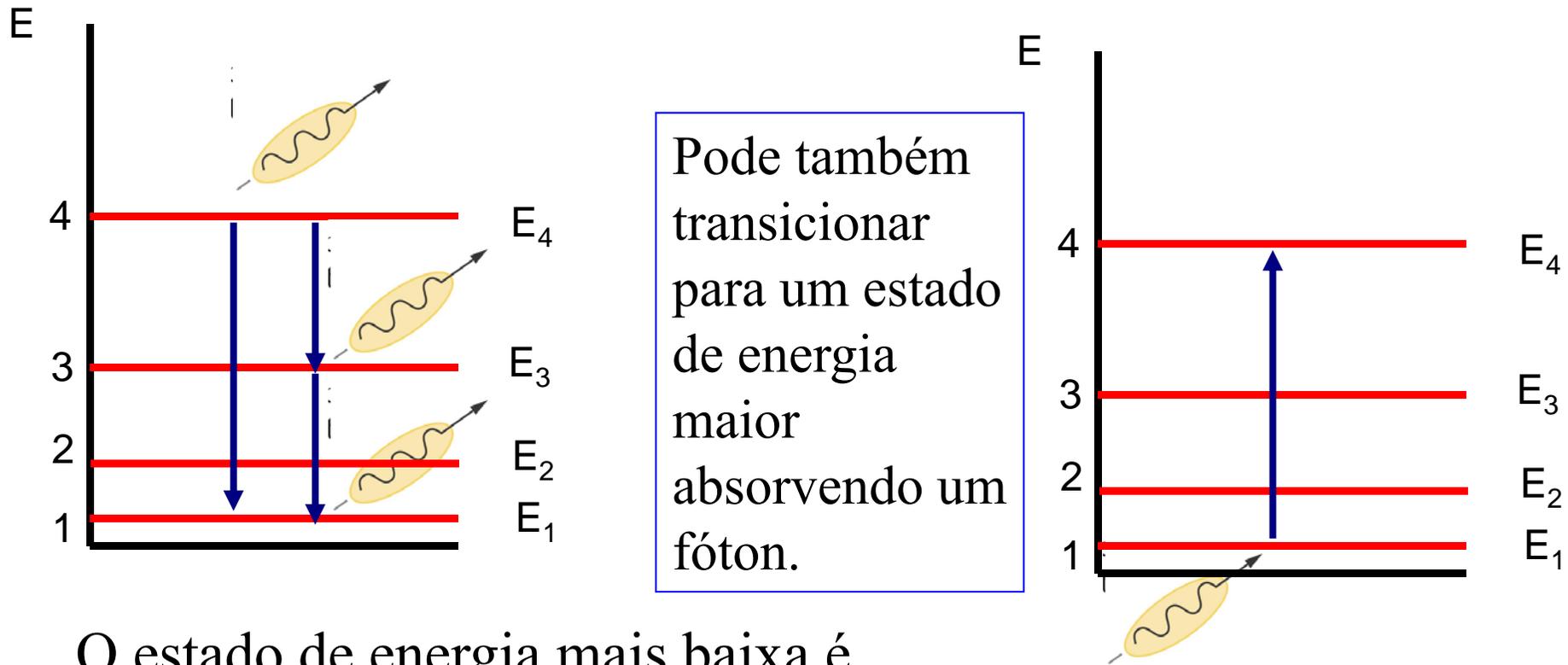
Portanto, Bohr prevê que:

$$R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 109,74 \text{ cm}^{-1}$$

sendo um êxito para a sua teoria!

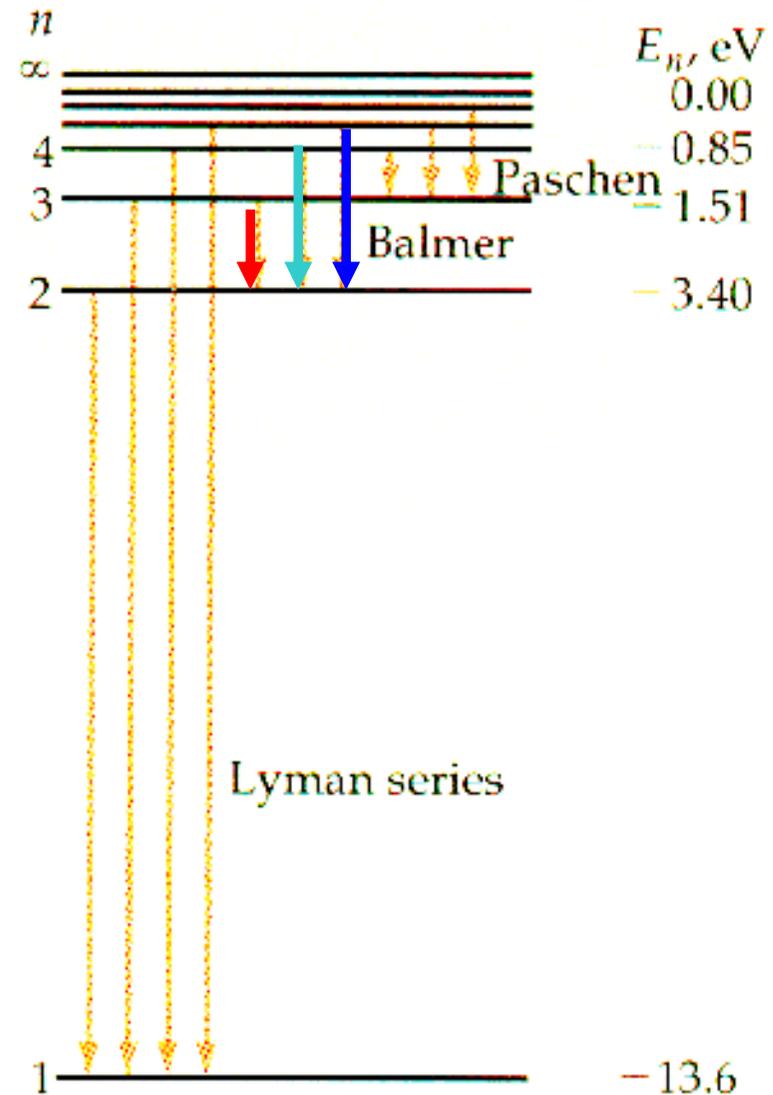
O sistema pode passar de um estado  $n$  para um  $n'$ , de energia menor, emitindo um fóton de frequência:

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$



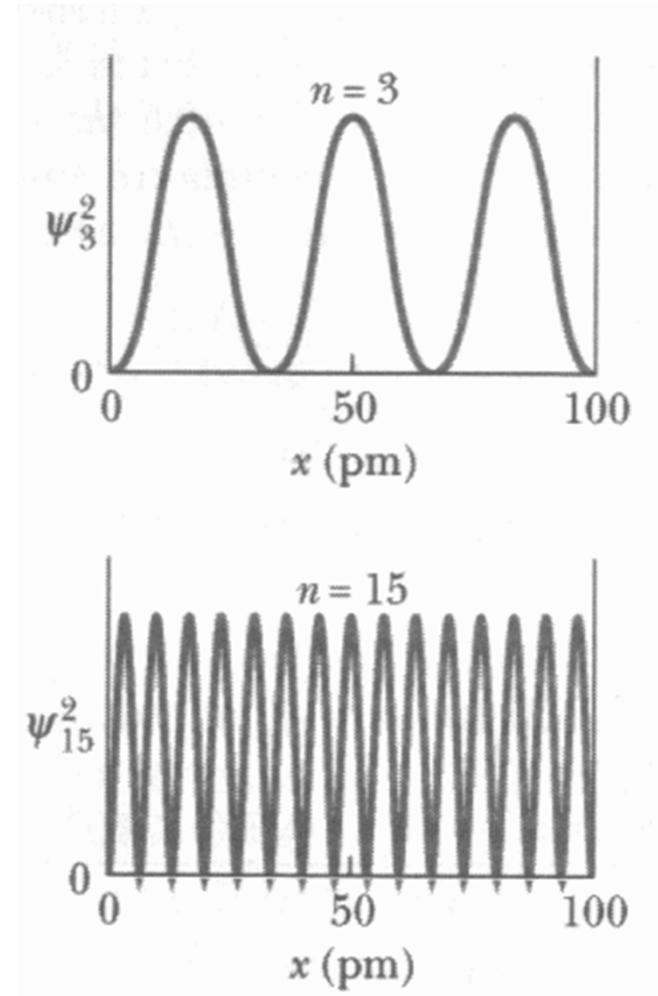
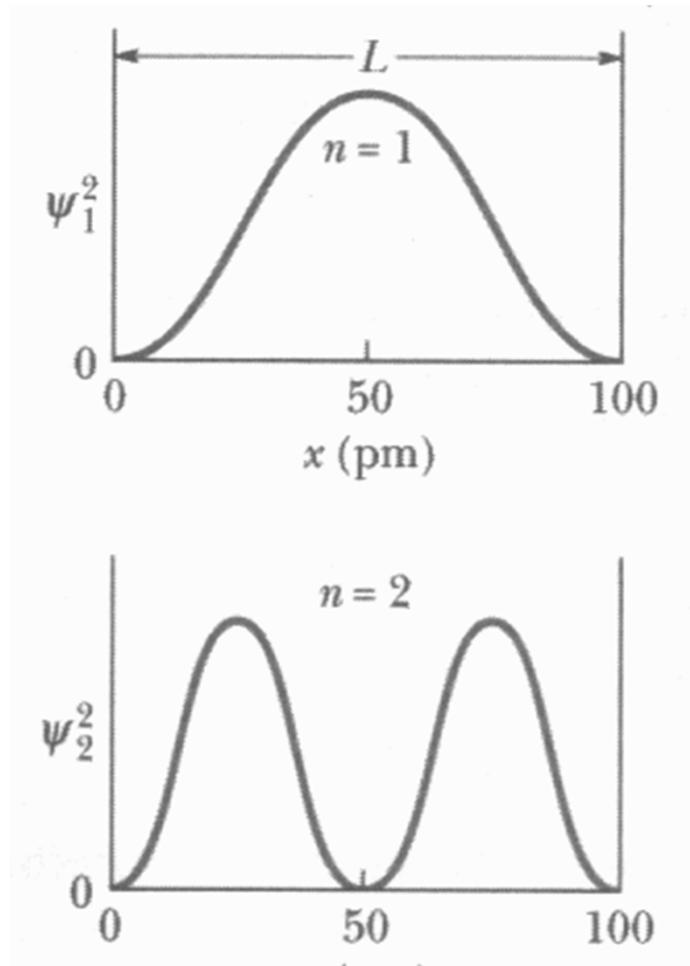
O estado de energia mais baixa é chamado de *estado fundamental*.

O modelo de Bohr explicou as *raias espectrais*, conhecidas para o *átomo de hidrogênio*, e mostrou que deveriam existir outras, fora do espectro visível.



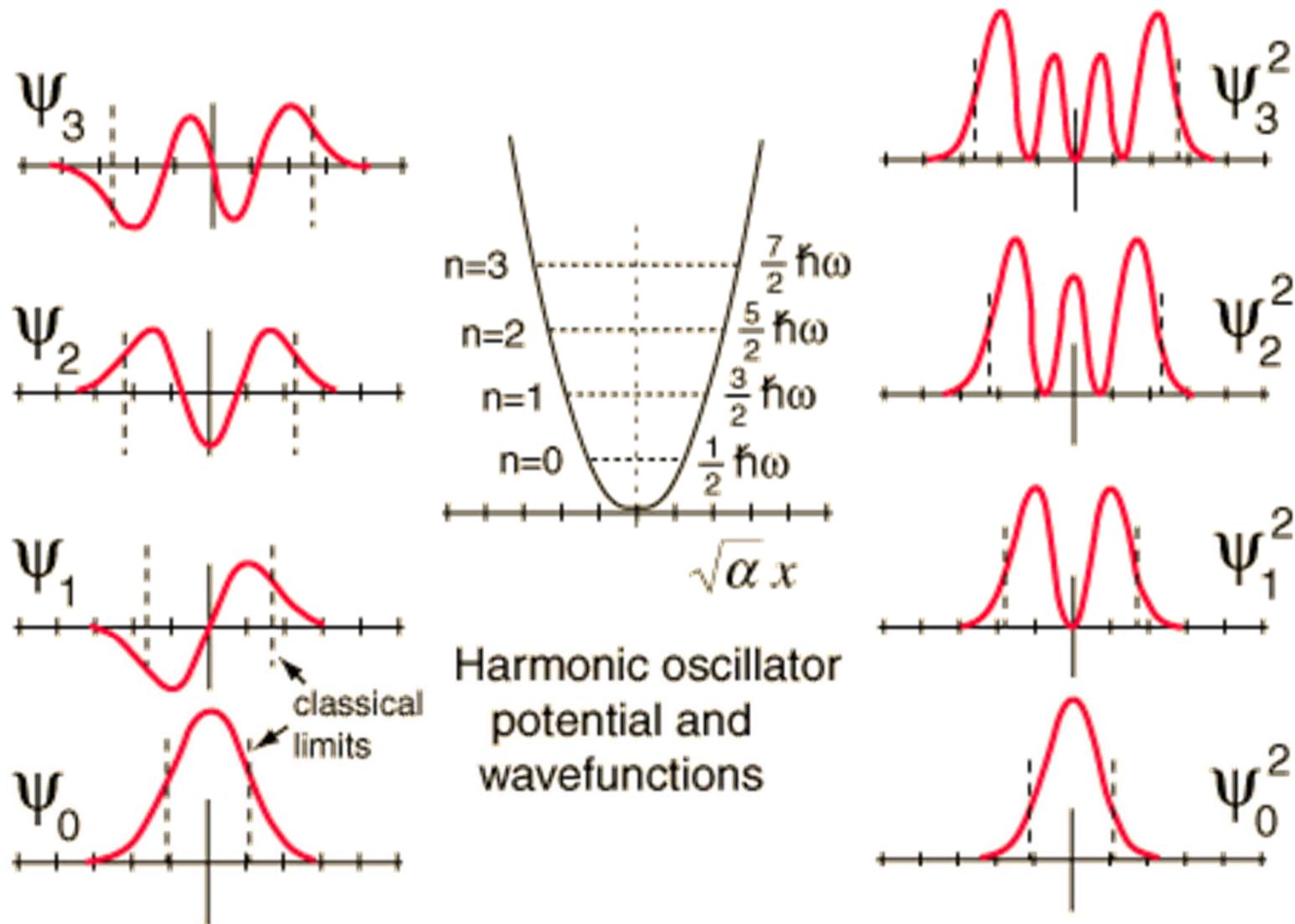
## *Princípio da Correspondência de Bohr:*

No limite dos números quânticos muito elevados, os resultados da física quântica tendem para os resultados da física clássica.



# Partícula sujeita a um potencial harmônico:

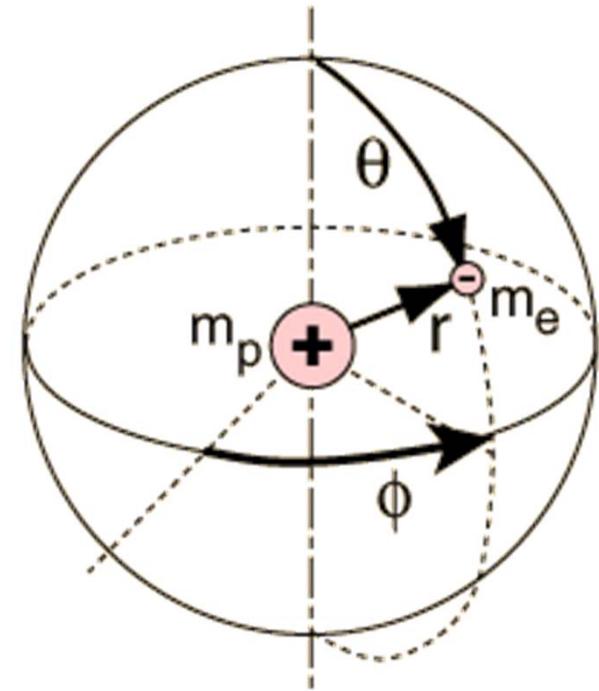
## Oscilador harmônico e estados coerentes



# A equação de Schrödinger e o átomo de H

O poço de potencial onde o elétron está confinado tem a forma

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$



A equação de Schrödinger nesse potencial é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + U(r) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

# A equação de Schrödinger e o átomo de H

Como o potencial só depende de  $r$ , a função de onda pode ser separada (em coordenadas esféricas)

Isto produz 3 equações separadas, para as coordenadas eletrônicas do átomo de H !

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

$n$

número  
quântico  
principal

$l$

número  
quântico  
orbital

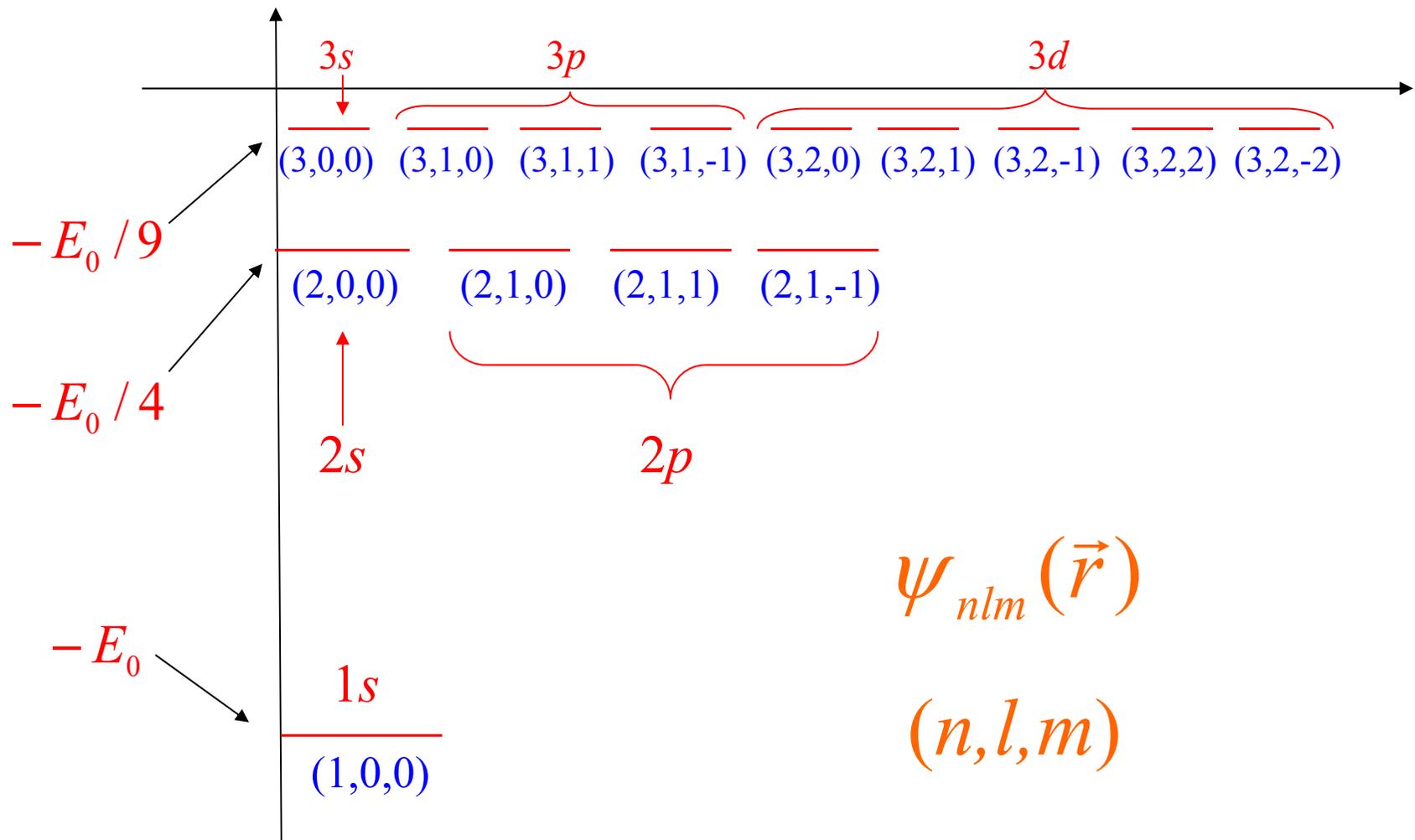
$m$

número  
quântico  
magnético

símbolo	valores
$n$	1,2,3,
$l$	0,..., $n-1$
$m$	$-l,...,l$

# A equação de Schrödinger e o átomo de H

O número quântico orbital  $l$  corresponde aos estados:  $l = 0, 1, 2, 3, 4$   
 $s, p, d, f, g$



# A equação de Schrödinger e o átomo de H

Para o estado fundamental ( $n = 1, l = 0, m = 0$ ) temos a equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2\psi(\vec{r})}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(\vec{r})}{dr} \right) + U(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

A função de onda radial do estado fundamental (1,0,0):

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} e^{-r/r_0} \quad ; \quad r_0 \text{ é o raio de Bohr}$$

# A equação de Schrödinger e o átomo de H

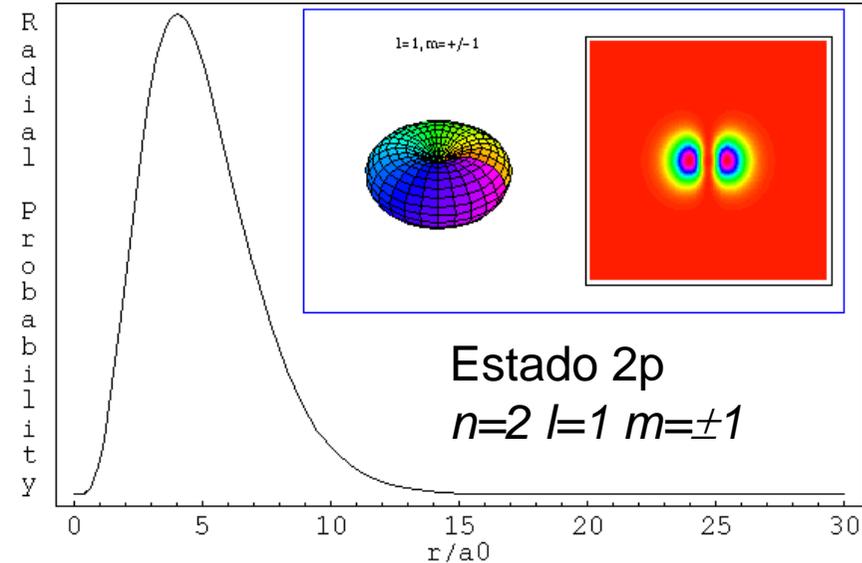
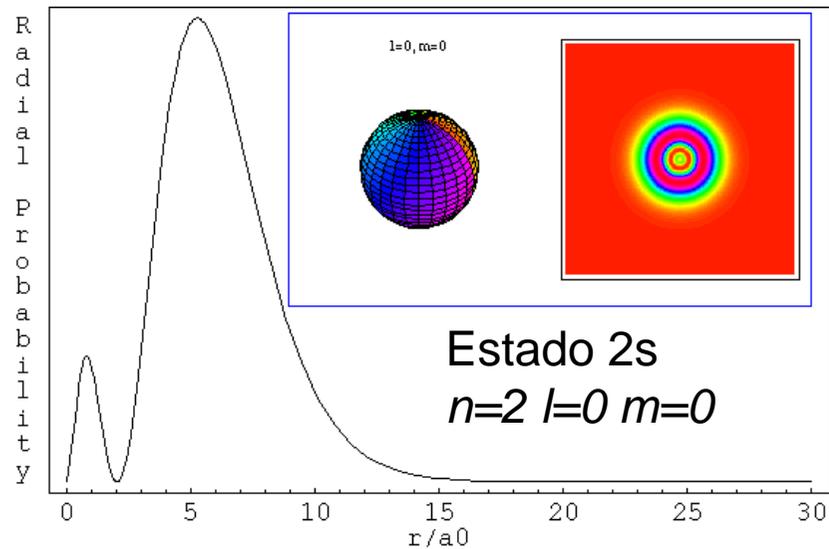
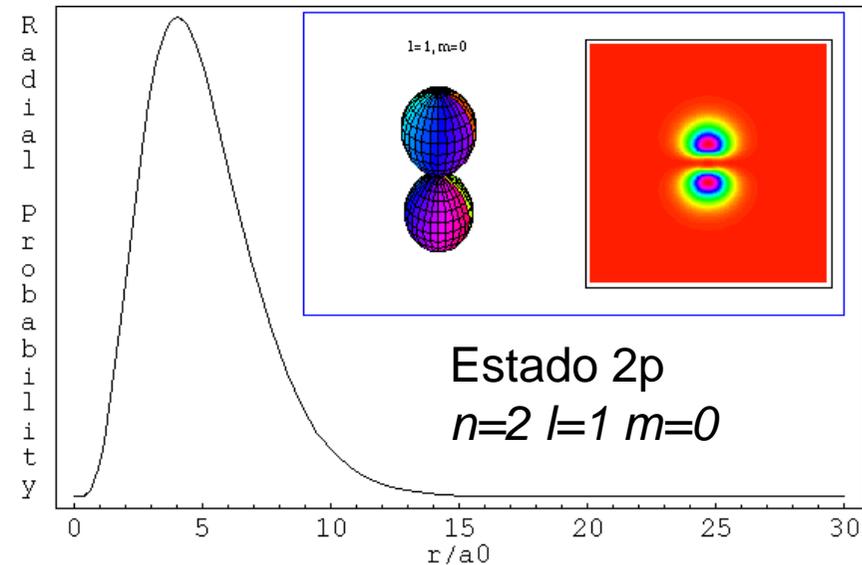
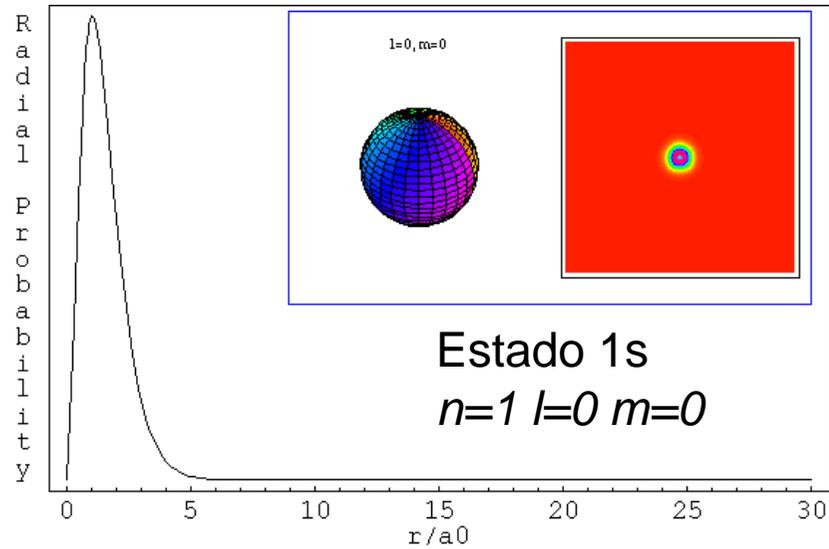
A densidade de probabilidade associada à função de onda:

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Probabilidade de medir} \\ \text{no volume } dV \\ \text{à distância } r \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{densidade de probabilidade} \\ |\Psi(r)|^2 \\ \text{à distância } r \end{array} \right] \times dV$$

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

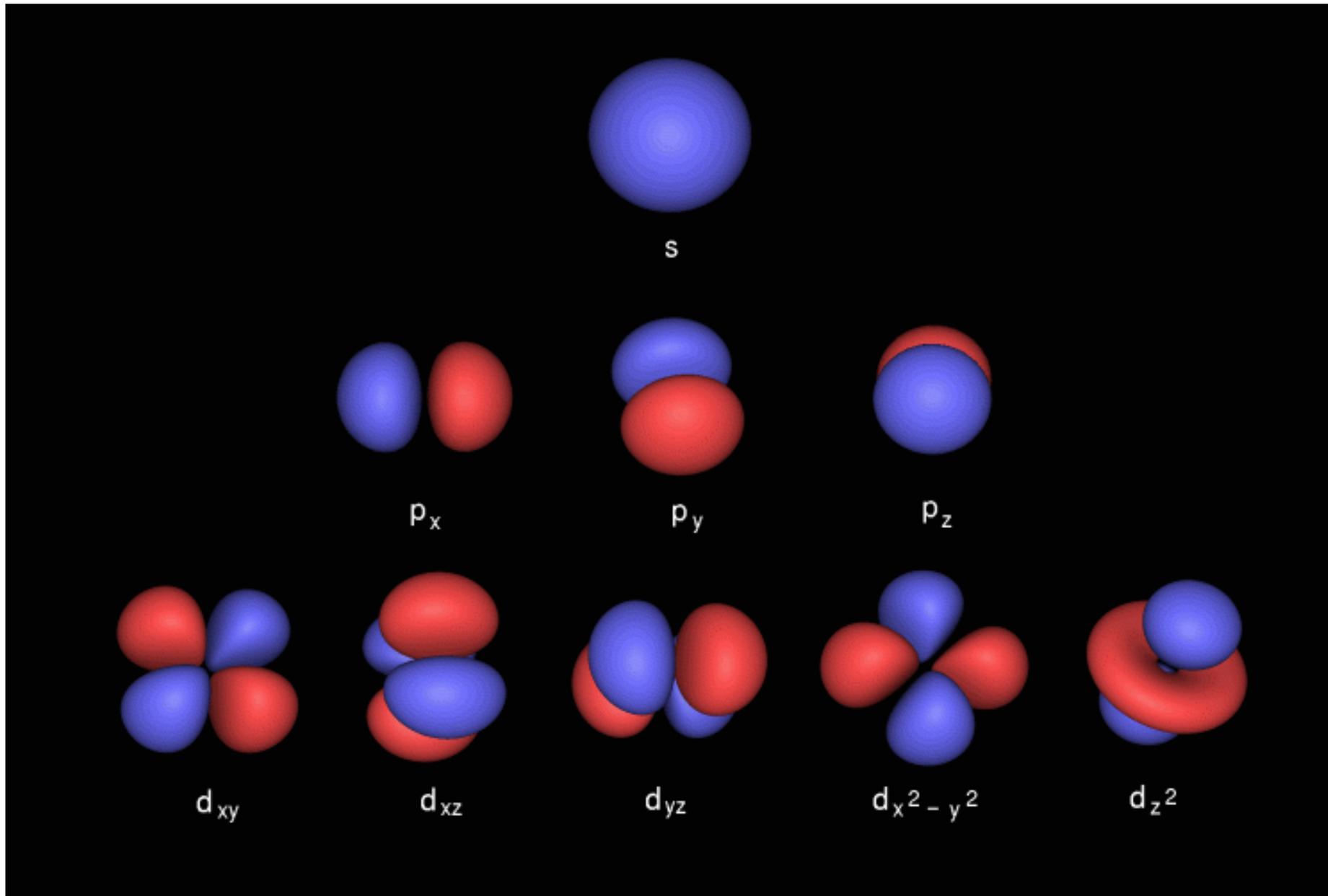
onde 
$$P(r) = \frac{4}{r_0^3} r^2 e^{-2r/r_0}$$

# Densidade de probabilidade do H



# Orbitais atômicos

orbitais atômicos





# Elétron confinado

O **confinamento** de uma onda leva à **quantização**, ou seja, à existência de **estados discretos**, com **energias discretas**.

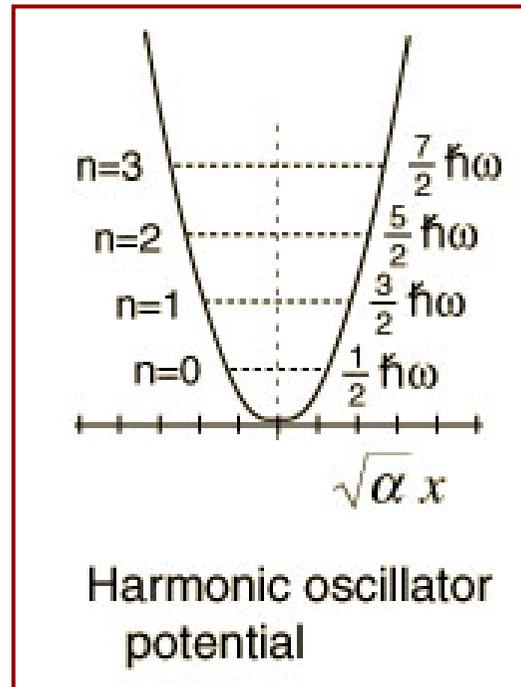
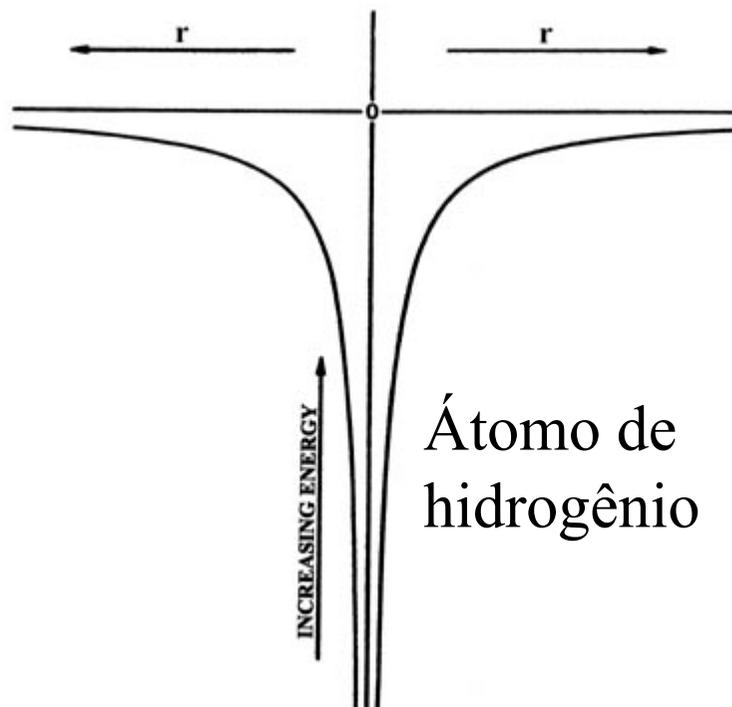
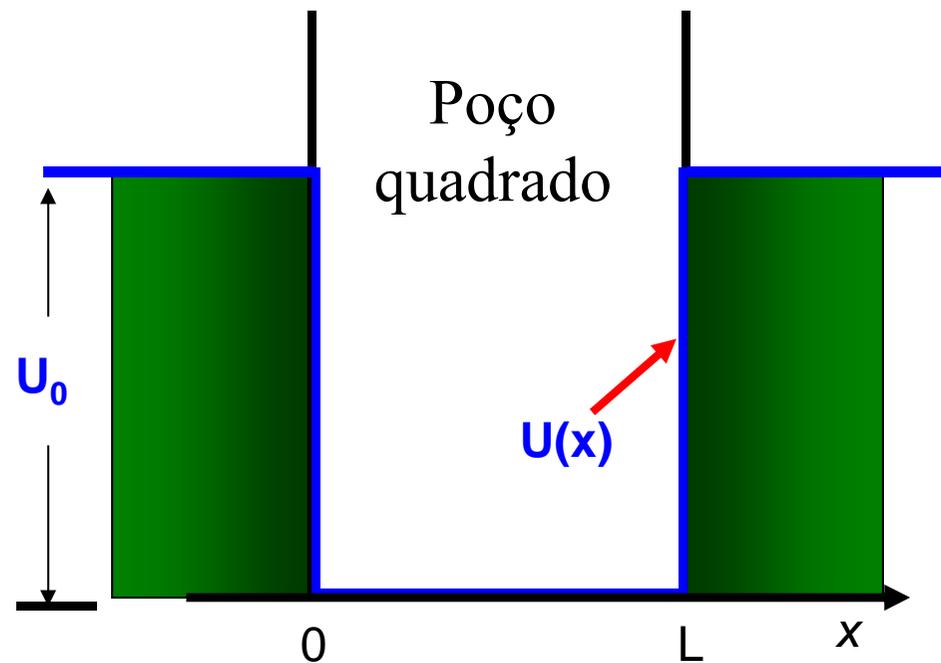
## Analogia:

Ondas estacionárias em uma corda  estados estacionários

Exemplos: Armadilhas em 1, 2 e 3 dimensões;

Átomos

Exemplos de potenciais diversos:



# Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

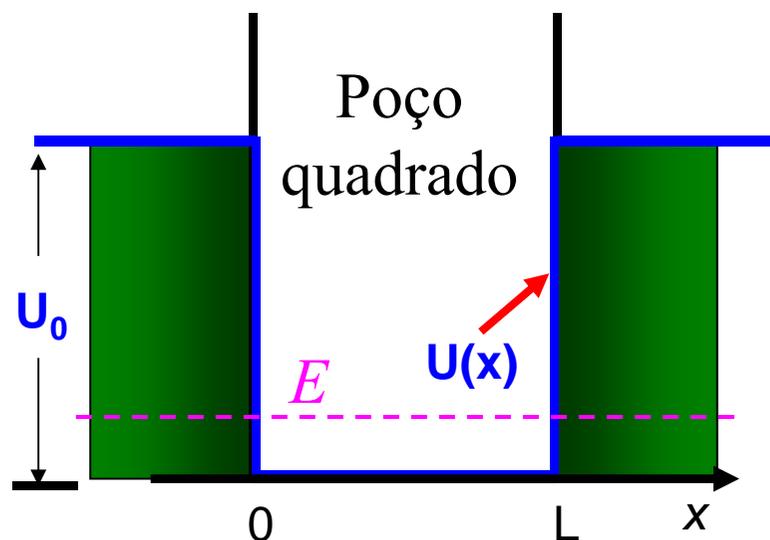
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Sempre que  $E - V(\vec{r}) < 0$  teremos estados ligados;  
que são quantizados.

$$\text{ou } E < V(\vec{r})$$

# Partícula confinada em um poço quadrado

Na região em que  $E - U(x) < 0$  ou  $E < U(x)$  a função de onda  $\Psi(x)$  deve tender a zero, pois a probabilidade de encontrar a partícula nesta região é muito pequena. Esta imposição faz com que tenhamos um conjunto discreto  $\Psi_n(x)$ , de soluções para a **equação de Schrödinger**, cada uma delas associadas a uma energia  $E_n$  (similar aos modos normais em uma corda clássica):



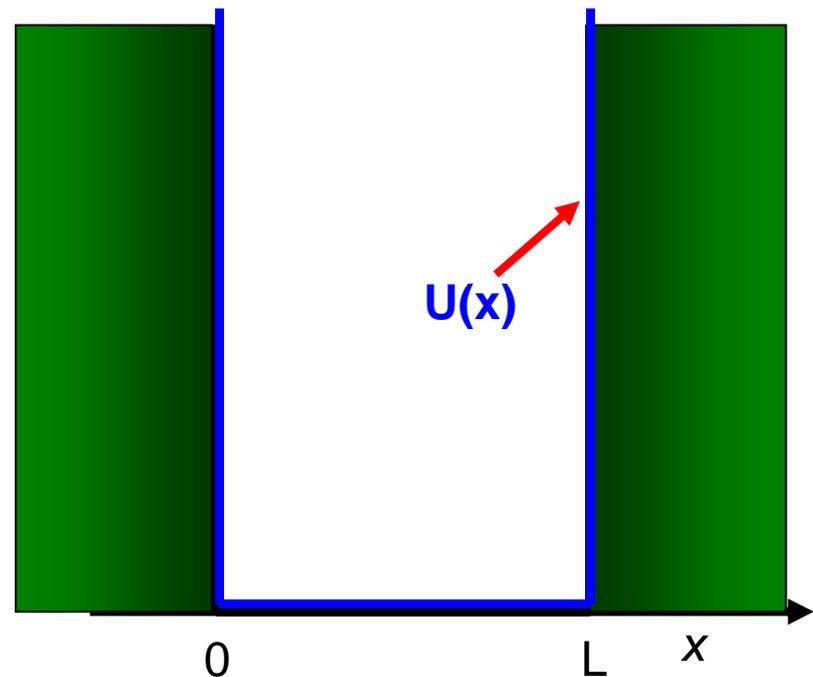
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

# Partícula em uma Caixa

Vamos resolver a eq. de Schrödinger para uma partícula confinada a uma caixa de paredes “**impenetráveis**”. Isto é, partícula sujeita a um potencial de forma:

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

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



- Como o **potencial é infinito**, a partícula deve encontrar-se rigorosamente no interior da caixa, portanto devemos ter  **$\Psi(x) = 0$ , para  $x = 0$  e  $x = L$  (condição de contorno).**

No interior da caixa, temos:

$$\text{ou} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A solução geral desta eq. pode ser escrita como:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

A condição de contorno  $\Psi(0) = 0$  leva à:  $\psi(x) = A \sin kx$

A condição de contorno  $\Psi(L) = 0$  leva à:

$$\psi(L) = A \sin kL = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi \quad \Rightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Escrita em termos dos comprimentos de onda:

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = n \frac{\pi}{L} \quad \rightarrow \quad L = n \frac{\lambda_n}{2} \quad \left( L = \frac{\lambda_n}{2}, 2 \frac{\lambda_n}{2}, 3 \frac{\lambda_n}{2}, 4 \frac{\lambda_n}{2}, 5 \frac{\lambda_n}{2}, \dots \right)$$

que corresponde justamente à condição de formação de ondas estacionárias.

As funções de onda serão então dadas por:

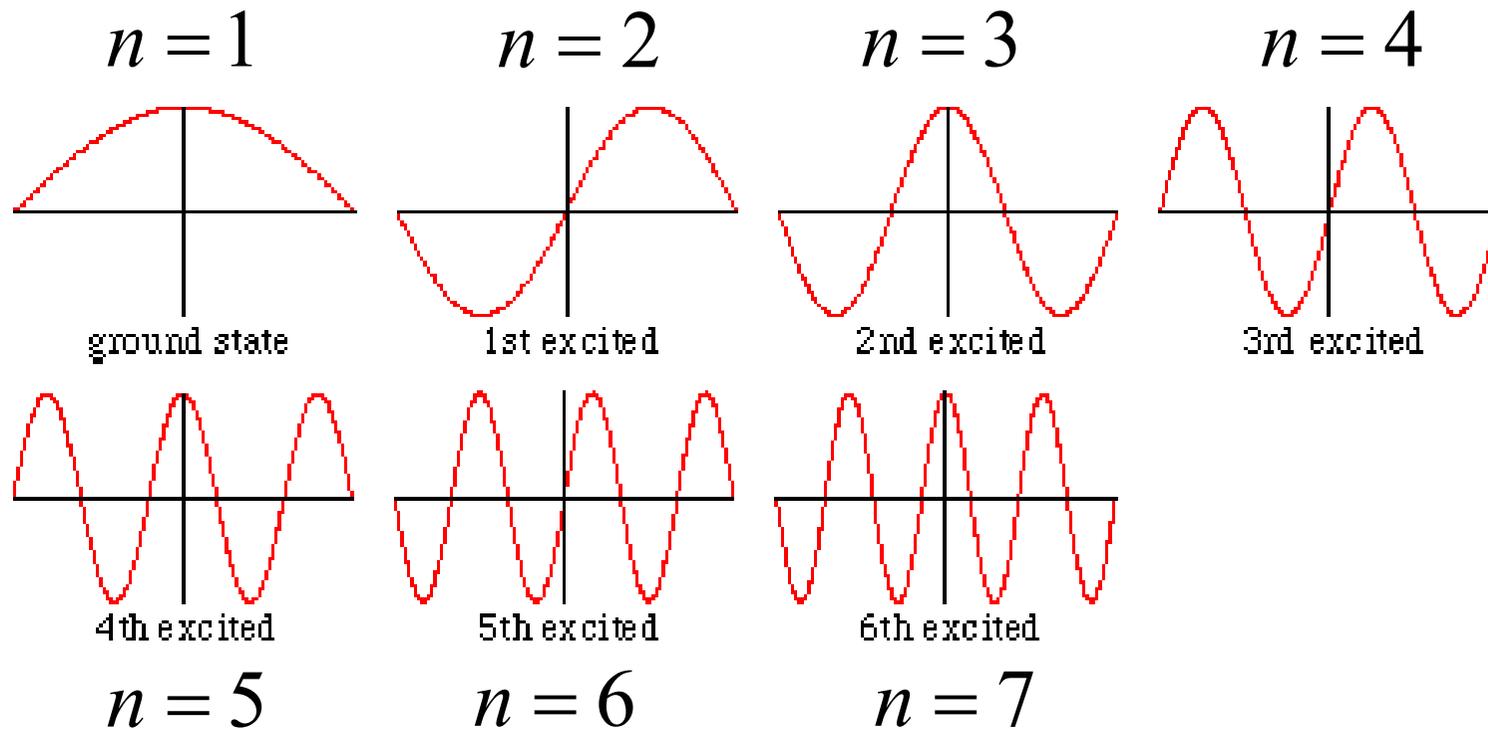
$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(k_n x) = A_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Para cada  $n$  temos uma  $\psi_n(x)$ ; onde  $n$  é um *número quântico*.

Como temos um *sistema unidimensional*,  $\psi(x)$  é completamente determinada por *apenas um número quântico*.

# Funções de onda

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(k_n x) = A_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



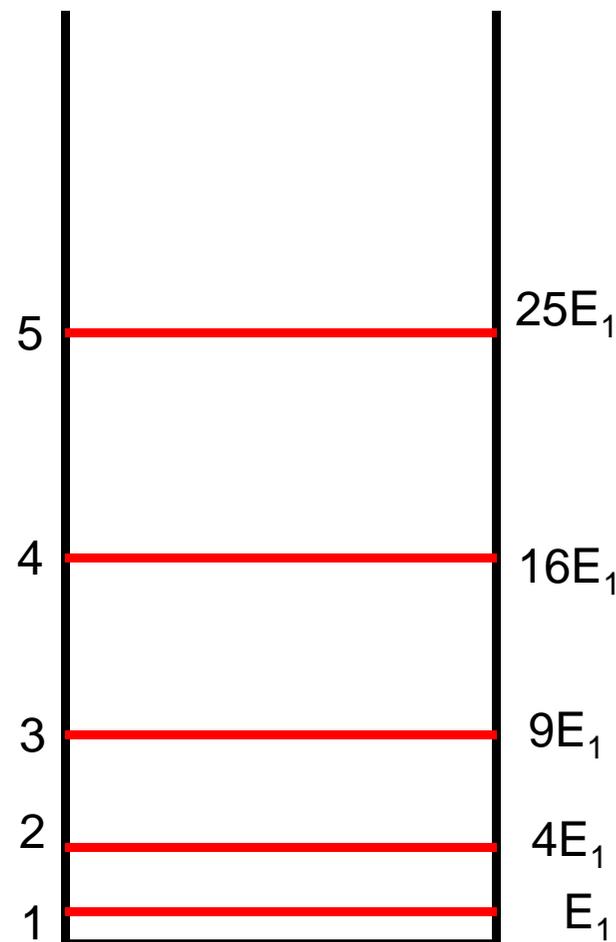
As energias associadas a estas funções são dadas por:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2$$

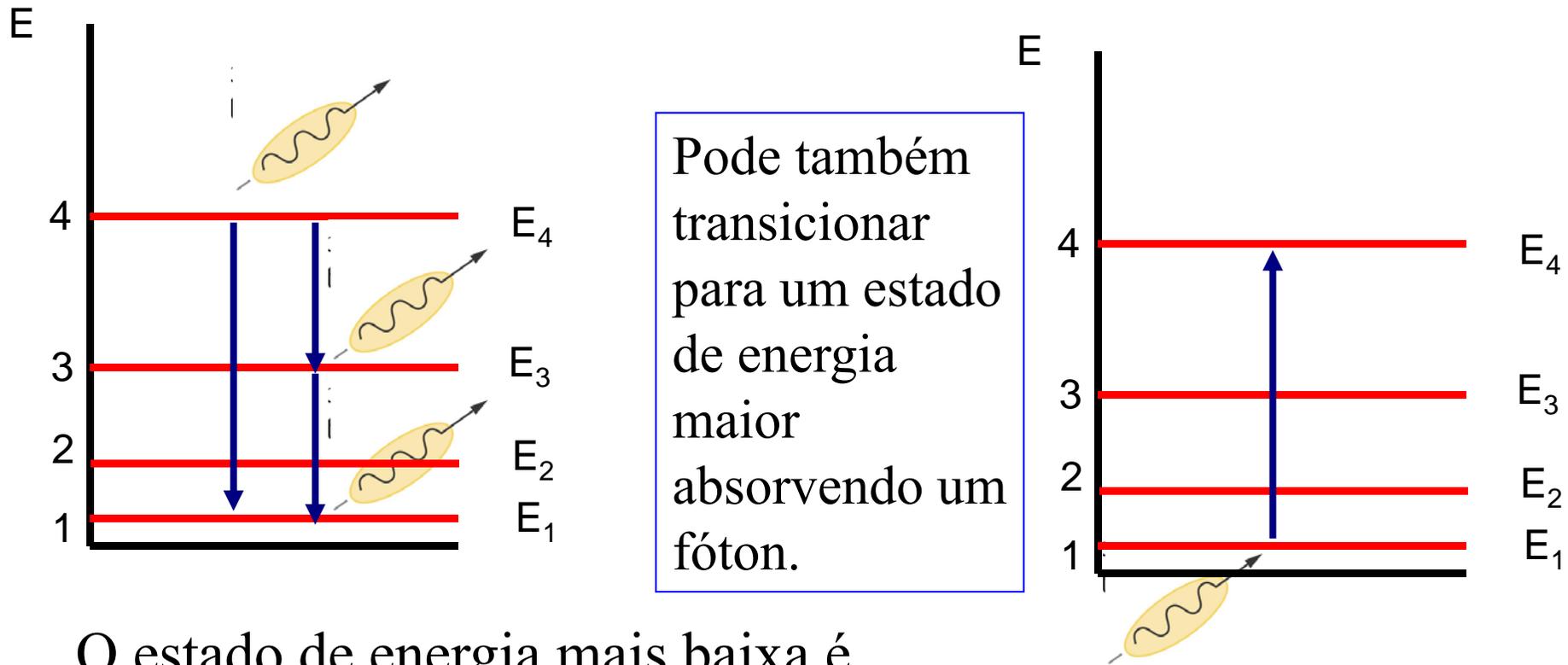
O sistema pode passar de um estado  $n$  para um  $n'$ , de energia menor, emitindo um fóton de frequência:

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$



O sistema pode passar de um estado  $n$  para um  $n'$ , de energia menor, emitindo um fóton de frequência:

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$



O estado de energia mais baixa é chamado de *estado fundamental*.

## Normalização da Função de Onda

A probabilidade de encontrarmos uma partícula, descrita por  $\Psi(x)$ , em um ponto qualquer do espaço (com  $x$  entre  $-\infty$  e  $+\infty$ ) deve ser igual a um. Portanto, devemos ter:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$$

Esta é a condição de normalização da função de onda.

No caso de uma **partícula no interior de uma caixa**, por exemplo, obtivemos:

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(k_n x) = A_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

A condição de normalização é o que nos permite determinar  $A_n$ .

Devemos ter:

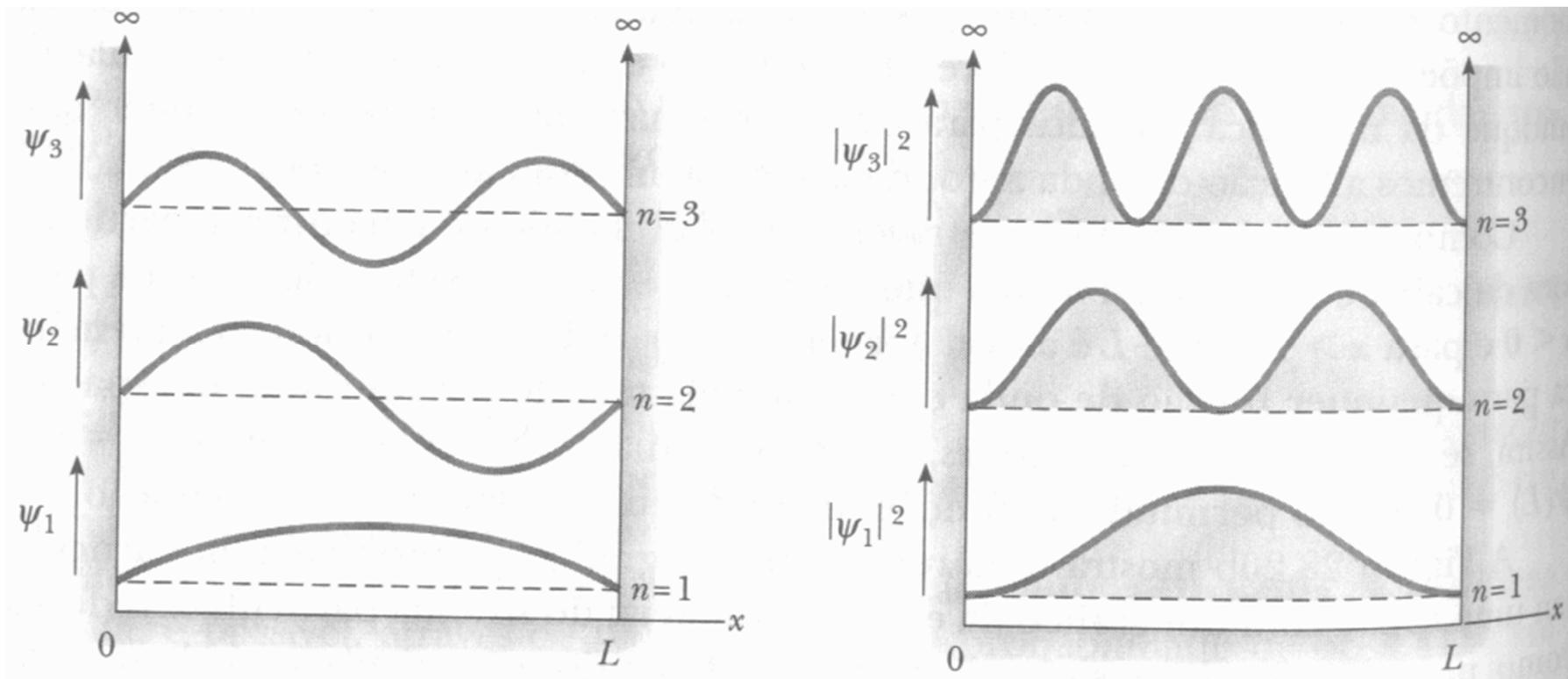
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = A_n^2 \int_0^L \left| \text{sen} \left( \frac{n\pi x}{L} \right) \right|^2 dx = 1$$

Portanto, temos:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \rightarrow \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left( \frac{n\pi x}{L} \right)$$

## Densidade de Probabilidade para o Potencial Infinito

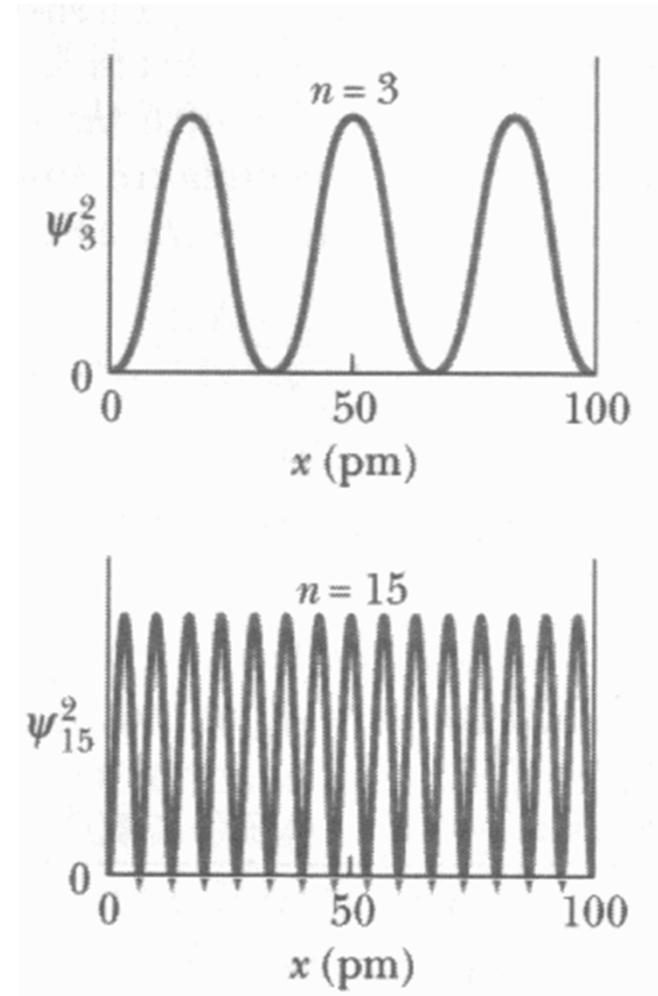
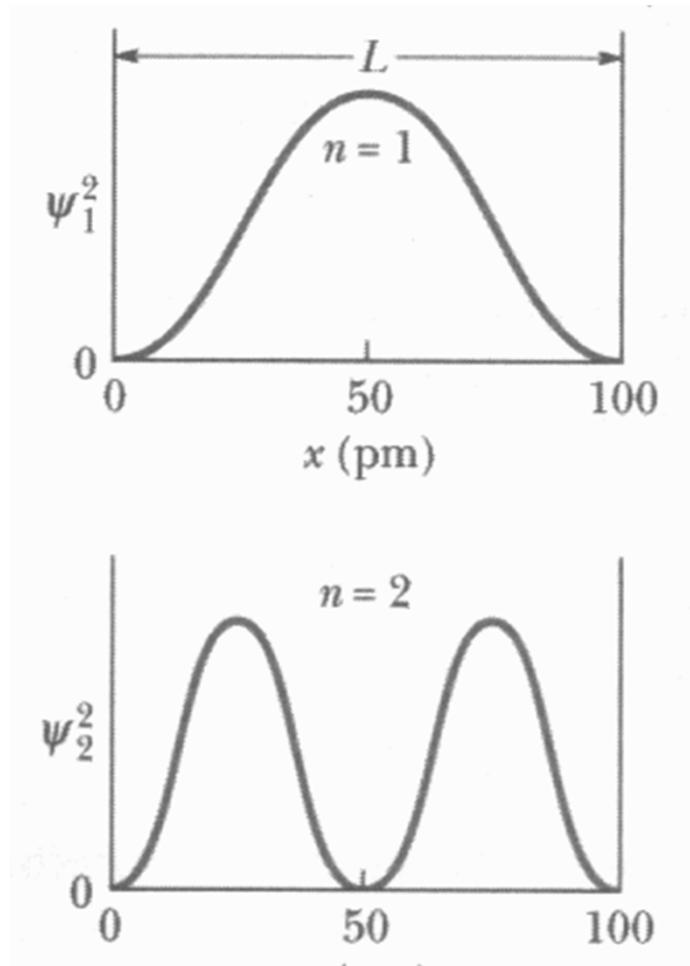
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



Poço quadrado

## *Princípio da Correspondência de Bohr:*

No limite dos números quânticos muito elevados, os resultados da física quântica tendem para os resultados da física clássica.



## Prob. 1:

(a) Achar a energia de um elétron, confinado numa caixa unidimensional, de comprimento  $L = 0,1 \text{ nm}$ , no seu estado fundamental. (Esta caixa tem, aproximadamente, o tamanho de um átomo.)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \qquad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left( \frac{n\pi x}{L} \right)$$

$$E_1 = \left( \frac{[6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}]^2}{8[9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}][10^{-10} \text{ m}]^2} \right) \approx \frac{4,39 \times 10^{-67}}{7,29 \times 10^{-50}}$$

$$E_1 \approx 6,02 \times 10^{-18} \text{ J} \approx 37,63 \text{ eV}$$

## Prob. 1:

(b) Fazer um diagrama dos níveis de energia e achar os comprimentos de onda dos fótons emitidos em todas as transições, que principiam no estado  $n = 3$ , ou num estado mais baixo, e terminam em qualquer estado mais baixo.

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2$$

$$h\nu_{n \rightarrow n'} = (E_n - E_{n'}) \rightarrow \nu_{n \rightarrow n'} = \frac{E_n - E_{n'}}{h}$$

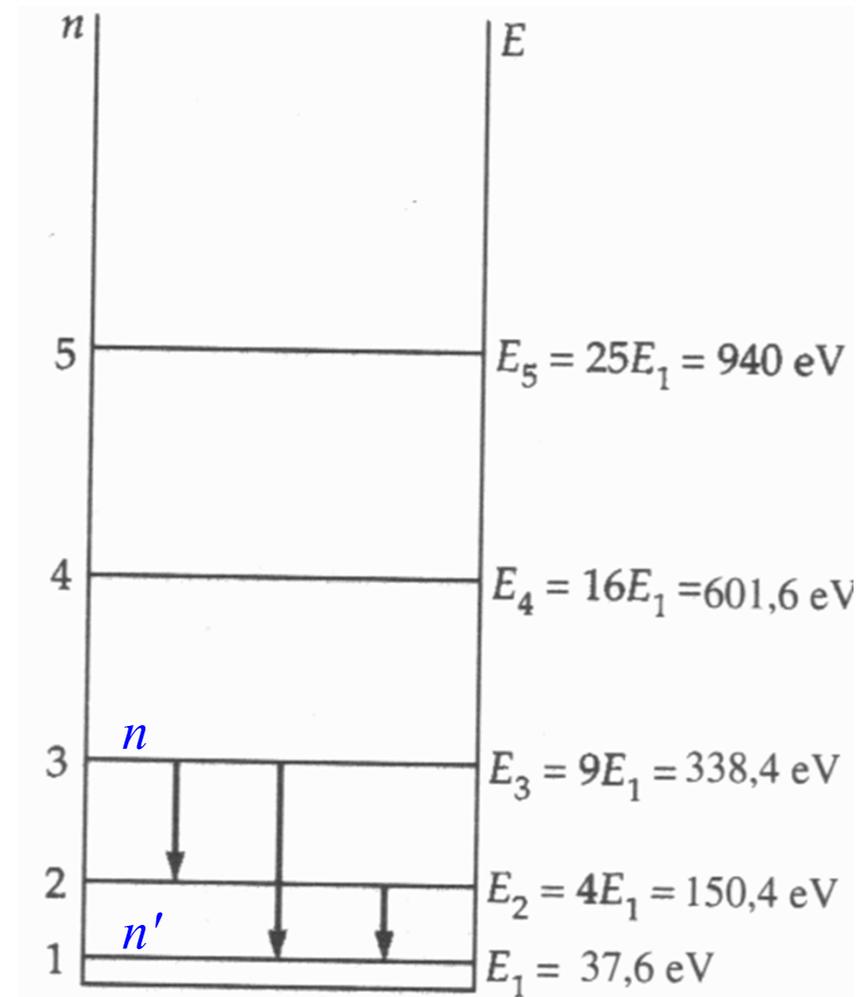
$$\frac{1}{\lambda_{n \rightarrow n'}} = \frac{E_n - E_{n'}}{hc} \rightarrow \lambda_{n \rightarrow n'} = \frac{hc}{(E_n - E_{n'})}$$

Como:  $hc \approx 2 \times 10^{-25} \text{ Jm} \approx 1,24 \text{ eV}\mu\text{m}$

$$\lambda_{3 \rightarrow 1} = 1,24/(300,8) \mu\text{m} \approx 4,12 \text{ nm}$$

$$\lambda_{3 \rightarrow 2} = 1,24/(188,0) \mu\text{m} \approx 6,60 \text{ nm}$$

$$\lambda_{2 \rightarrow 1} = 1,24/(112,8) \mu\text{m} \approx 11,0 \text{ nm}$$



# Energia de ponto zero

A energia do estado fundamental acontece para  $n = 1$

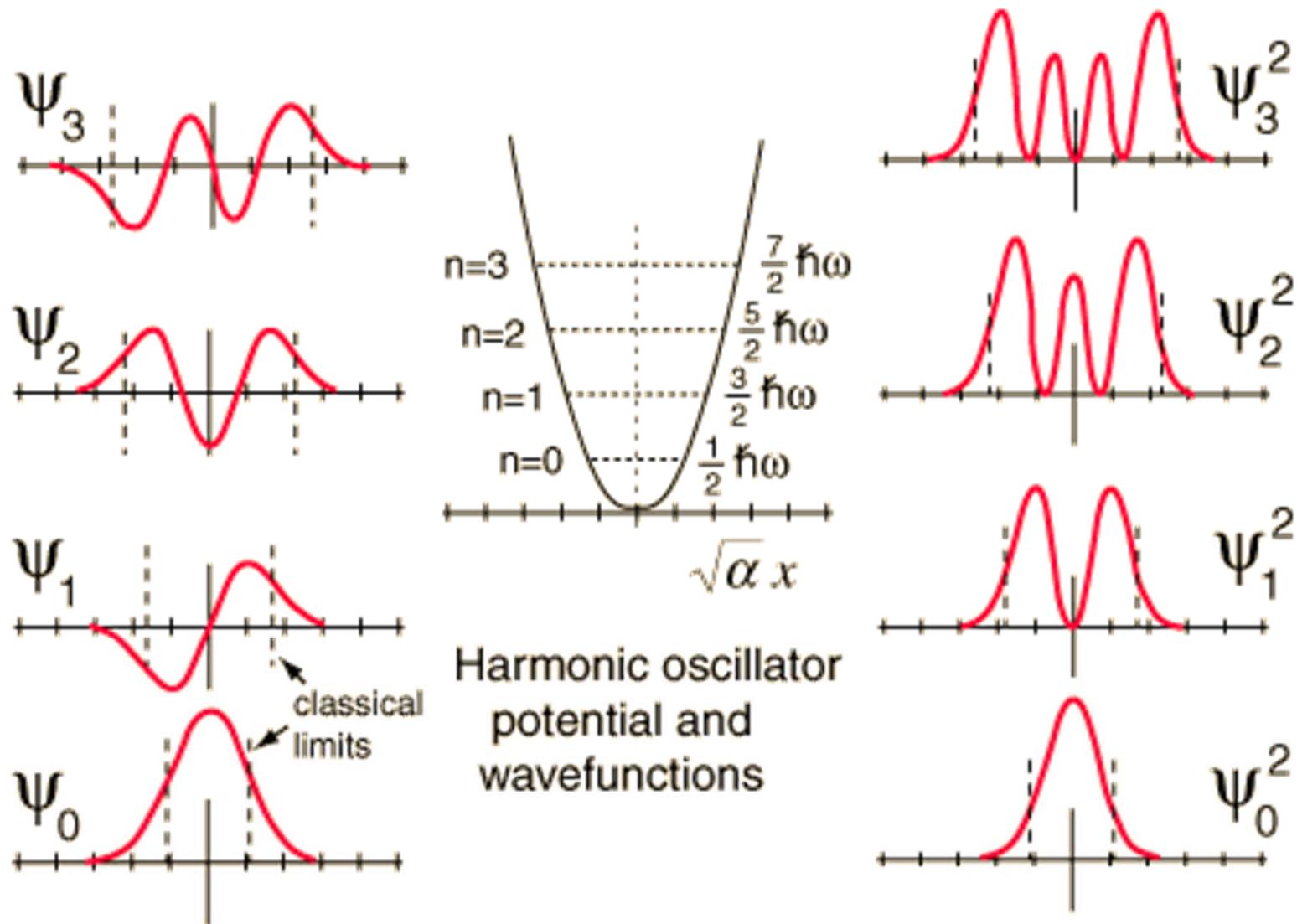
$$E_1 = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right)$$

Estados confinados não podem ter  $n = 0$  pois isto daria  $\Psi_n(\mathbf{x}) = 0$ , ausência de elétrons no poço todo.

Sistemas confinados não podem ter energia zero, existe sempre uma energia mínima, chamada **energia de ponto zero**

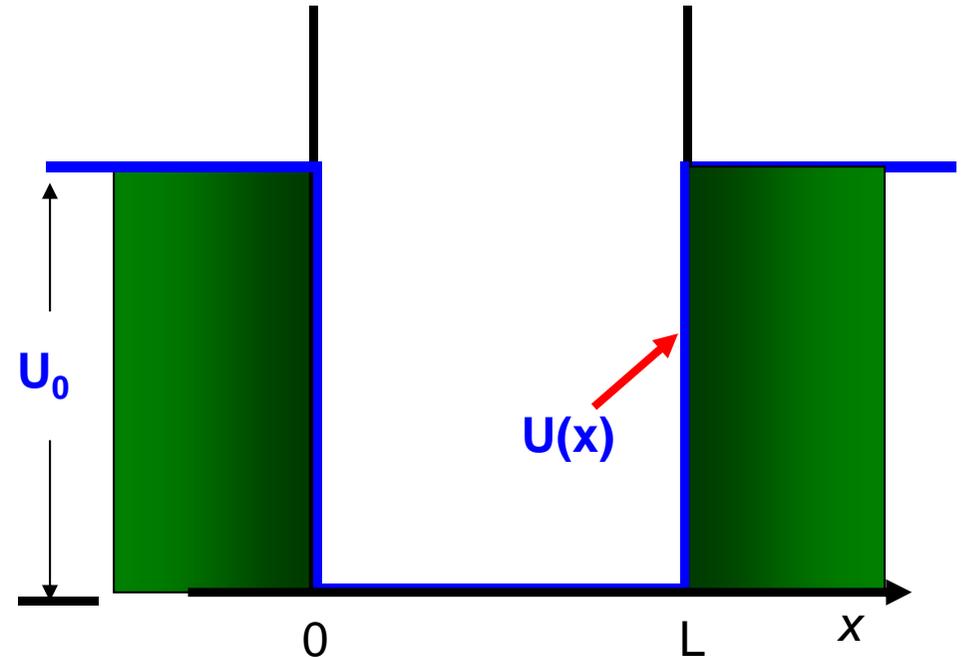
# Partícula sujeita a um potencial harmônico:

## Oscilador harmônico e estados coerentes



# Partícula em um Poço Finito

Considere agora uma partícula classicamente aprisionada em um poço de potencial, com profundidade finita  $U_0$ :



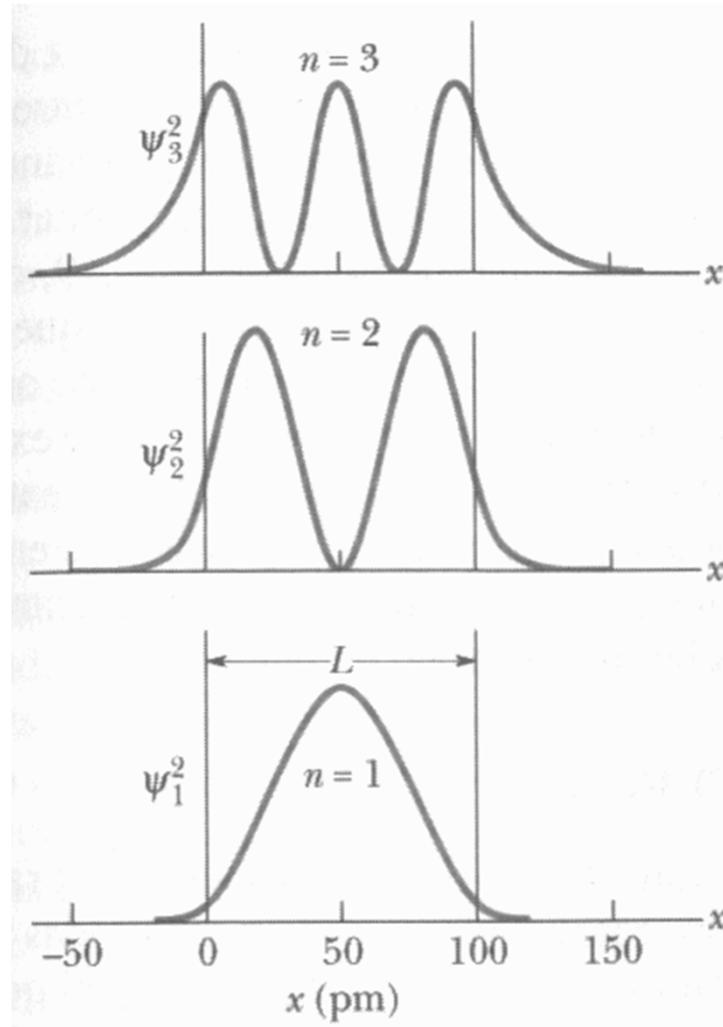
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

As funções de onda **não se anulam** mais em  $x = 0$  ou  $x = L$ .

# Partícula em um Poço Finito

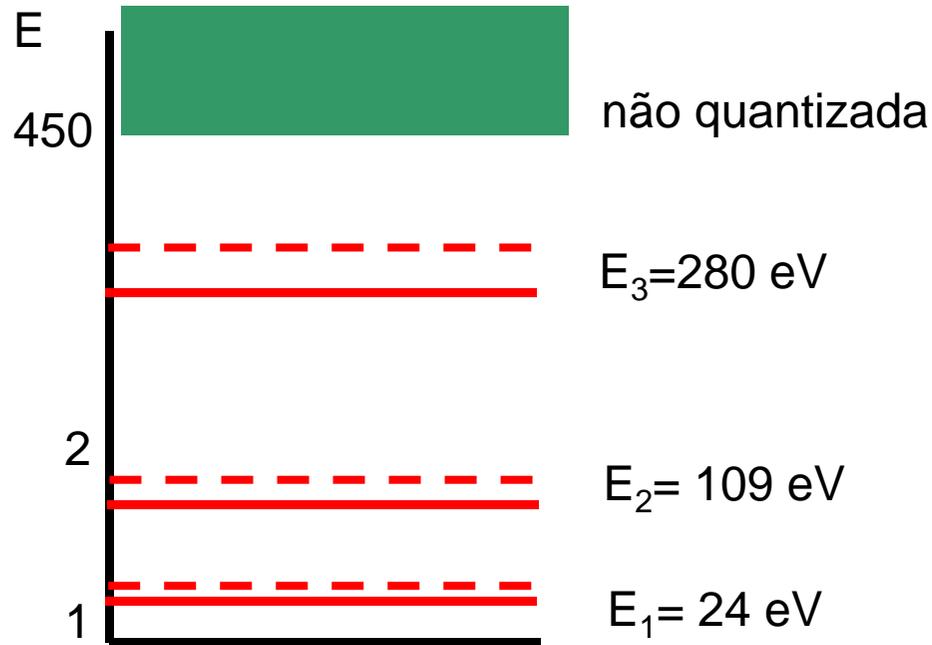
As funções de onda apresentarão a forma ao lado.

Terão energias um pouco menores que para  $U_0$  infinito.



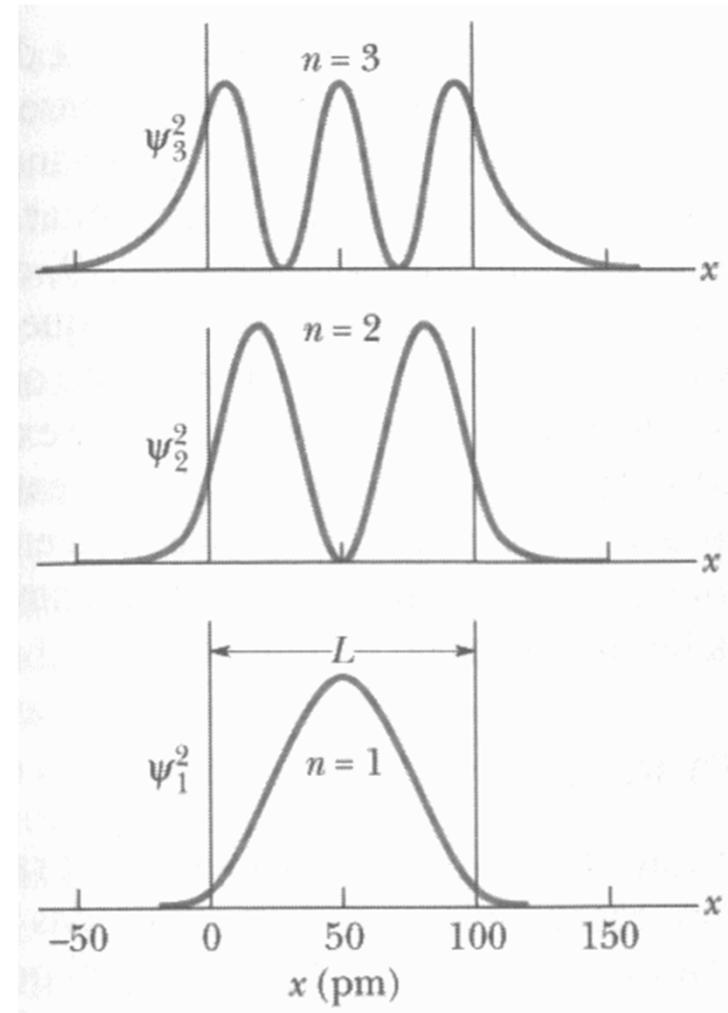
- **Várias formas de poços são construídas em laboratório, para se estudar propriedades quânticas da matéria.**

# Partícula em um Poço Finito



Energias em um poço  
com  $L = 100 \text{ pm}$  e  
 $U_0 = 450 \text{ eV}$ .

(linhas tracejadas:  
Poço Infinito )



Existem aplicações de poços finitos?

# Poços Quânticos (QW)

Poços quânticos foram primeiro apresentados (1970) pelos físicos L. Esaki e R. Tsu.

Usando técnicas como MBE ou MOCVD podemos produzir heteroestruturas de cristais  $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ -GaAs que se comportam como poços quânticos (QW)

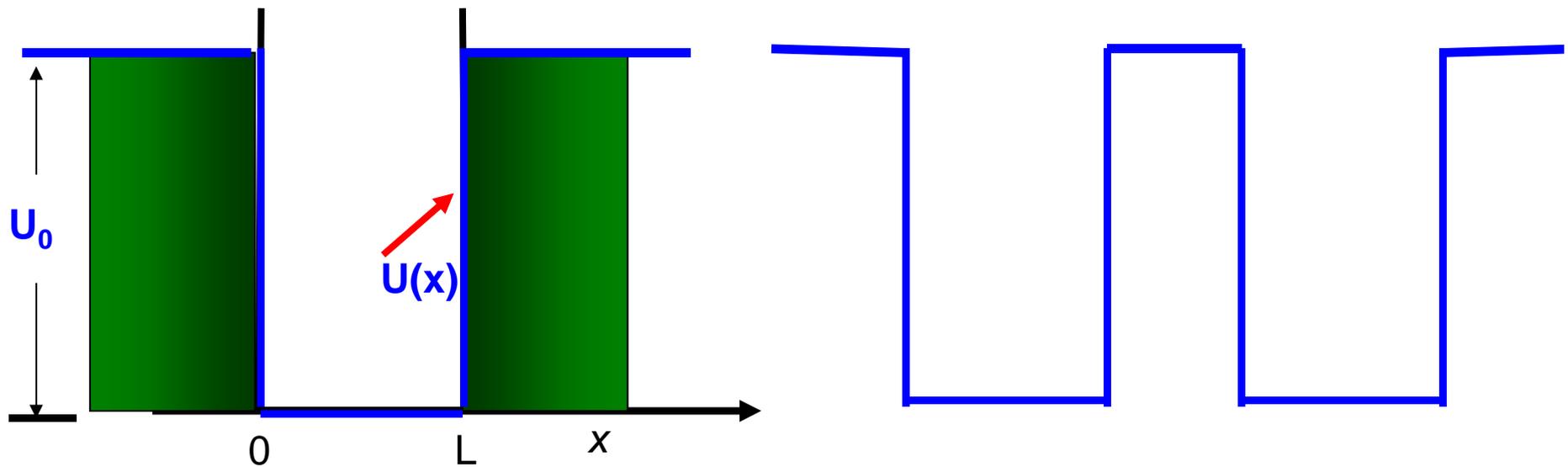
**MBE** (Molecular Beam Epitaxy) ou **MOCVD** (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) produzem nanoestruturas, depositando camadas de espessura em escala atômica (controle de monocamada).

# $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}-\text{GaAs}$



Aplicações QW: laser  
para leitores de CD e DVD

QW duplo



## Equação de Schrödinger em 3D

A generalização da eq. de Schrödinger de uma para três dimensões é direta:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + [E - V(x, y, z)] \psi = 0$$

## Caixa Retangular

Se tivermos uma caixa retangular com potenciais infinitos, a solução da eq. de Schrödinger, no interior da caixa, pode ser escrita como:

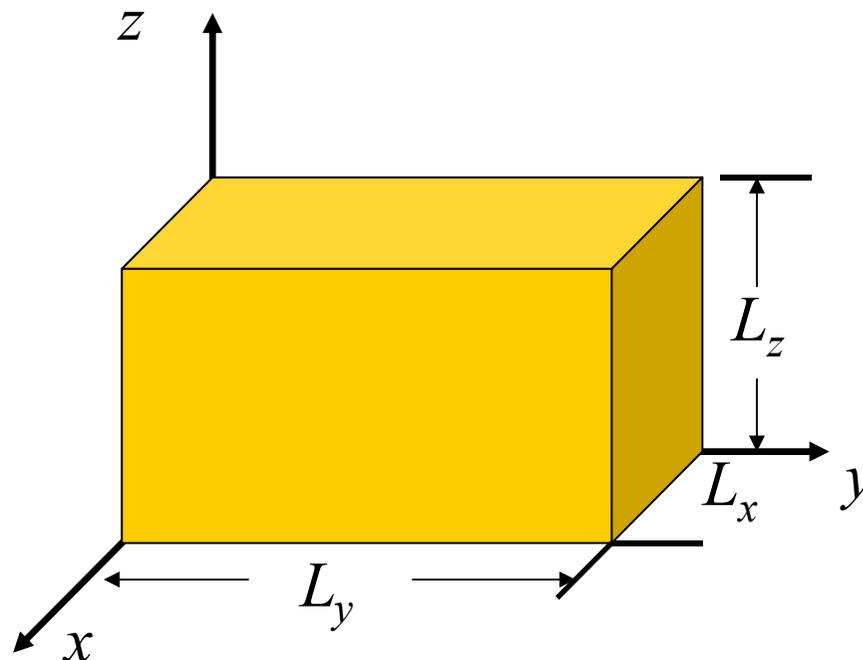
$$\psi_n(x, y, z) = A \text{sen}(k_1 x) \text{sen}(k_2 y) \text{sen}(k_3 z)$$

As condições de contorno :

$$k_1 = n_1 \frac{\pi}{L_x}$$

$$k_2 = n_2 \frac{\pi}{L_y}$$

$$k_3 = n_3 \frac{\pi}{L_z}$$



Assim, temos como solução:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = A \operatorname{sen}\left(n_1 \frac{\pi x}{L_x}\right) \operatorname{sen}\left(n_2 \frac{\pi y}{L_y}\right) \operatorname{sen}\left(n_3 \frac{\pi z}{L_z}\right)$$

Observe que agora temos um sistema tridimensional e portanto são necessários três números quânticos para definir cada estado:  $\psi_{n_1, n_2, n_3}$

O níveis de energia serão então dados por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

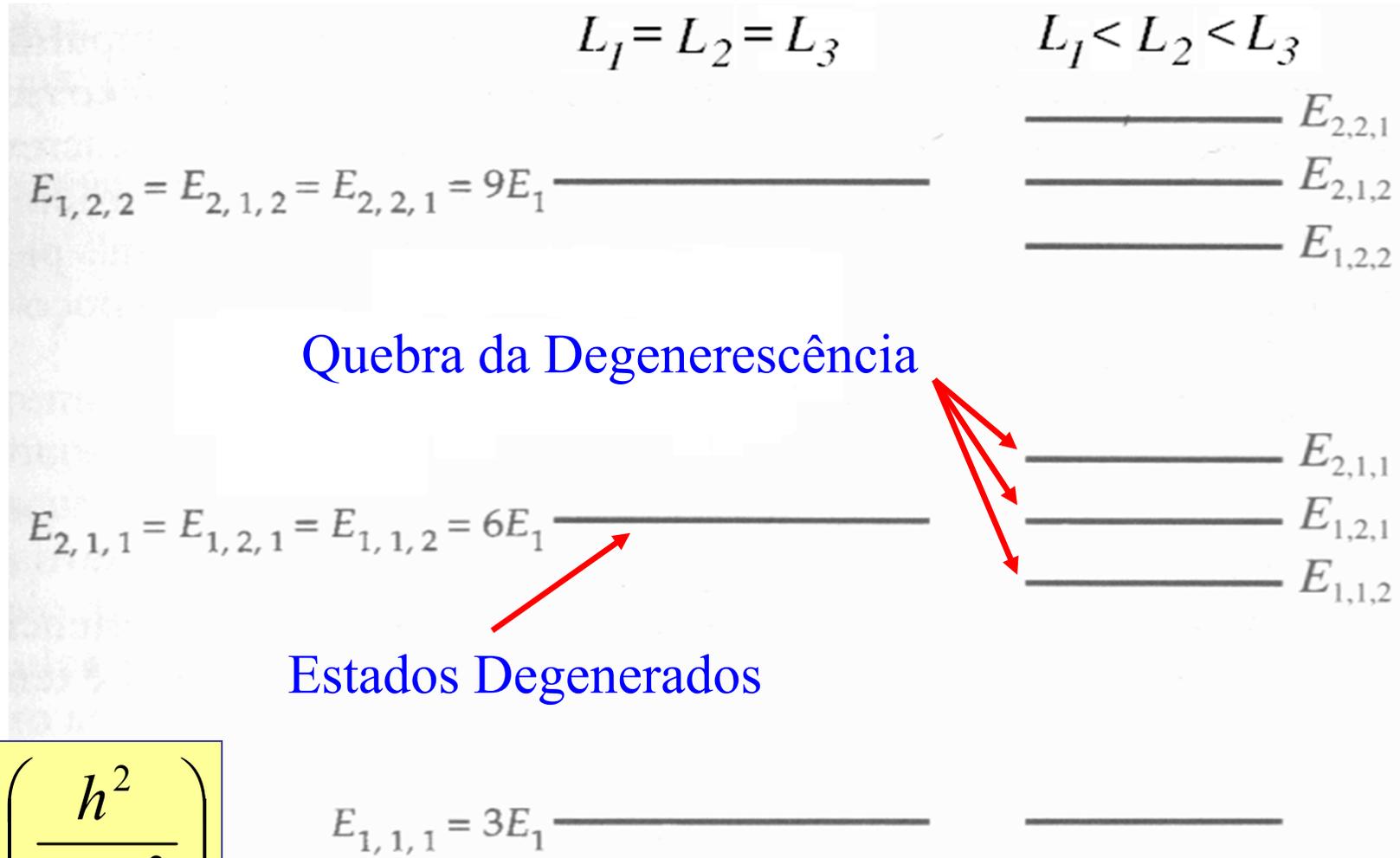
$$k_i = \frac{n_i \pi}{L_i}$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n_1^2}{L_x} + \frac{n_2^2}{L_y} + \frac{n_3^2}{L_z} \right)$$

Se:  $L_x = L_y = L_z = L$  :

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

O níveis de energia são então dados por:



$$E_1 \equiv \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right)$$

## Prob. 2

Um elétron de massa  $m$  está confinado em uma caixa cúbica de dimensões  $L_x = L_y = L_z = L$ . **a)** Quantas frequências diferentes o elétron é capaz de emitir, ou absorver, ao sofrer uma transição entre dois níveis que estejam entre os tres de menor energia? Que múltiplo de  $h/8mL^2$  corresponde **(b)** à menor, e **(c)** à maior frequência?

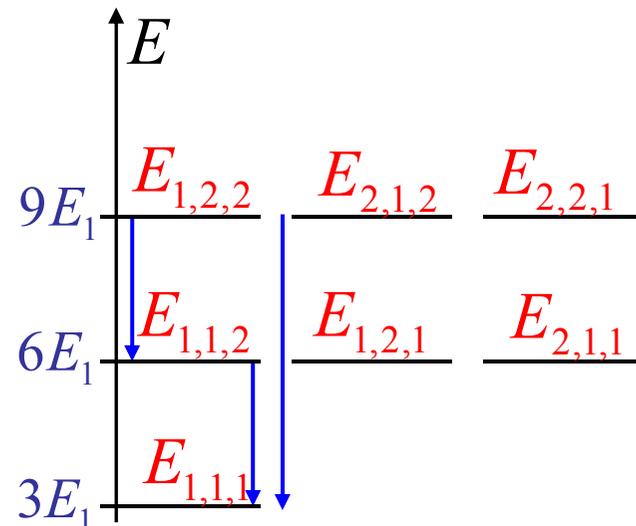
$$E_{n_1, n_2, n_3} = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \Rightarrow \frac{E_{n_1, n_2, n_3}}{E_1} = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad \boxed{E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}}$$

$$h\nu_{i \rightarrow f} = |E_f - E_i| \quad ; \quad \frac{\nu_{i \rightarrow f}}{(h/8mL^2)} = \frac{|E_f - E_i|}{(h^2/8mL^2)} = |\Delta(n_{1 \rightarrow 1'}^2 + n_{2 \rightarrow 2'}^2 + n_{3 \rightarrow 3'}^2)|$$

**a)** 3 frequências: Ver Figura

$$\mathbf{b)} \quad \frac{\nu_{\min}}{(h/8mL^2)} = \frac{6E_1 - 3E_1}{E_1} = \frac{9E_1 - 6E_1}{E_1} = 3$$

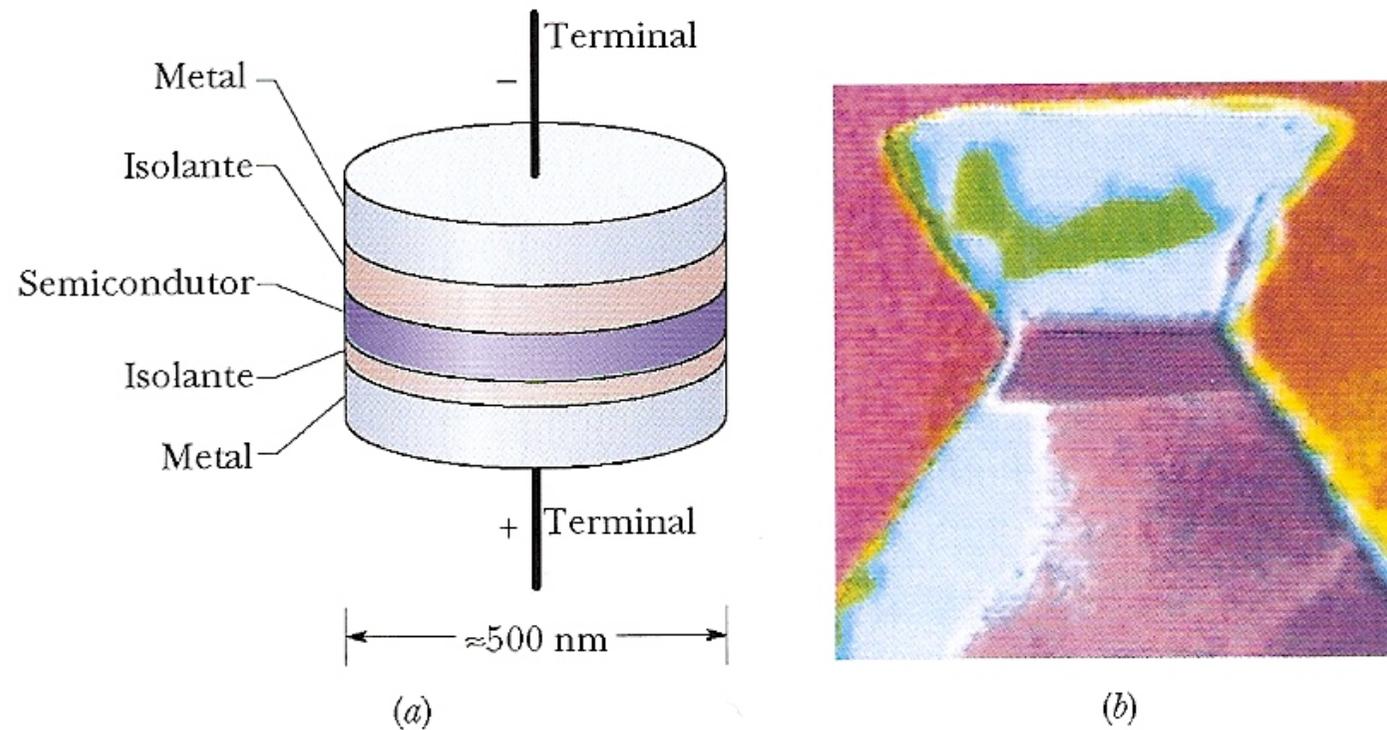
$$\mathbf{c)} \quad \frac{\nu_{\max}}{(h/8mL^2)} = \frac{9E_1 - 3E_1}{E_1} = 6$$



# Outras Armadilhas

- Pontos Quânticos (0-D)
- Fios Quânticos (1-D)
- Gás de elétrons em 2-D
- Currais

# Pontos Quânticos

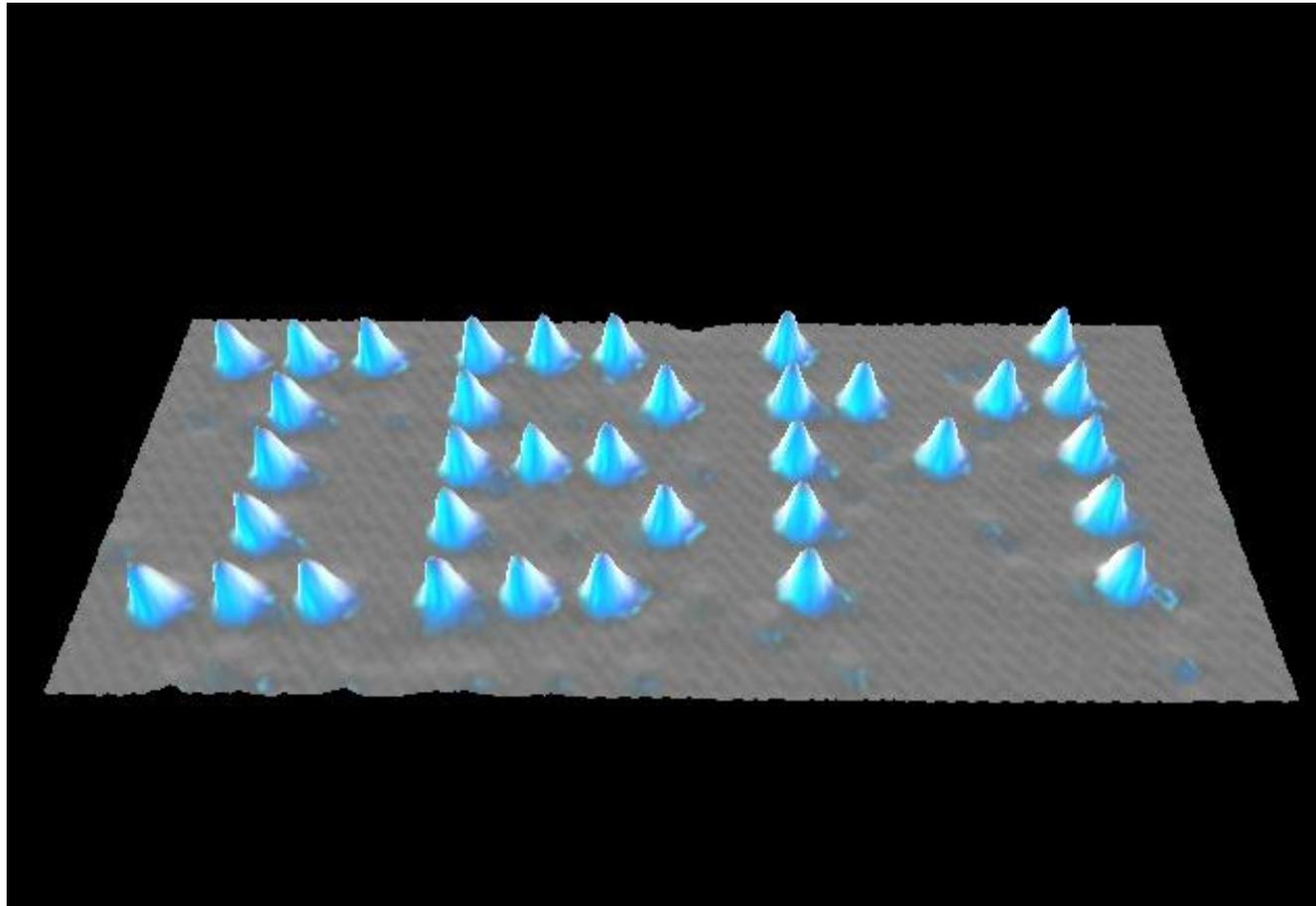


**Fig. 39-11** Um ponto quântico ou “átomo artificial”. (a) A camada semicondutora central forma um poço de energia potencial no qual o elétron é confinado. A camada isolante de baixo é suficientemente estreita para permitir que elétrons sejam introduzidos ou retirados da camada central por tunelamento quando uma tensão apropriada é aplicada aos terminais do dispositivo. (b) Fotografia de um ponto quântico real. A faixa central é a região onde os elétrons são confinados.

# Microscópio de Tunelamento (STM)

Como tudo começou (1985)...

# Manipulação de átomos



**35 átomos de Xenônio em superfície de Ni (D. Eigler et al, IBM)**

# Manipulando átomos

Esquema do STM

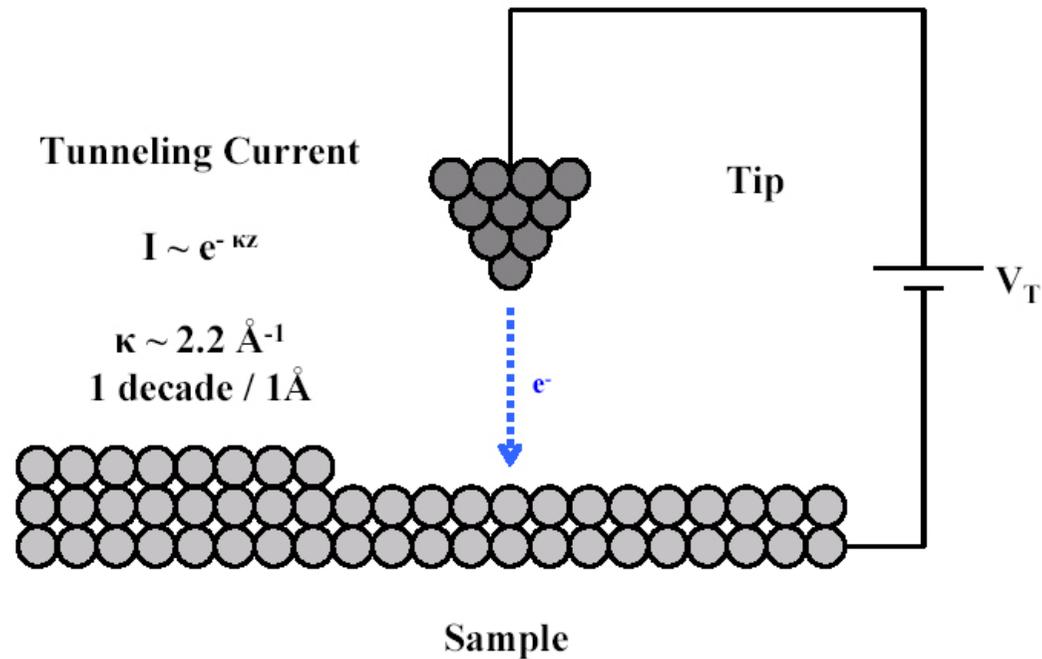
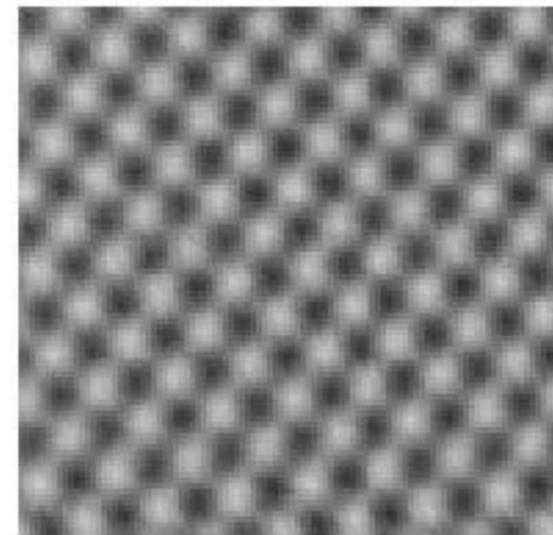
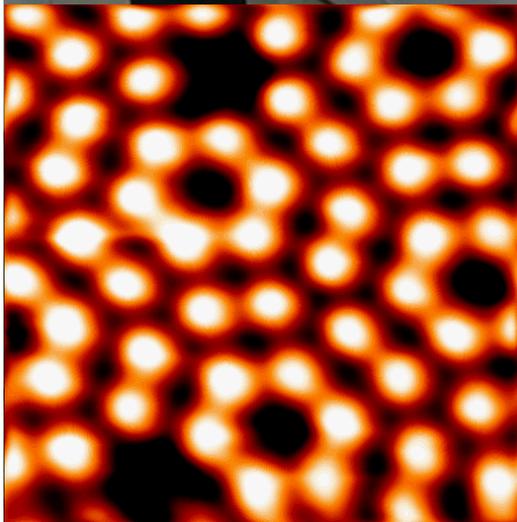


Imagem STM de Ag(001)

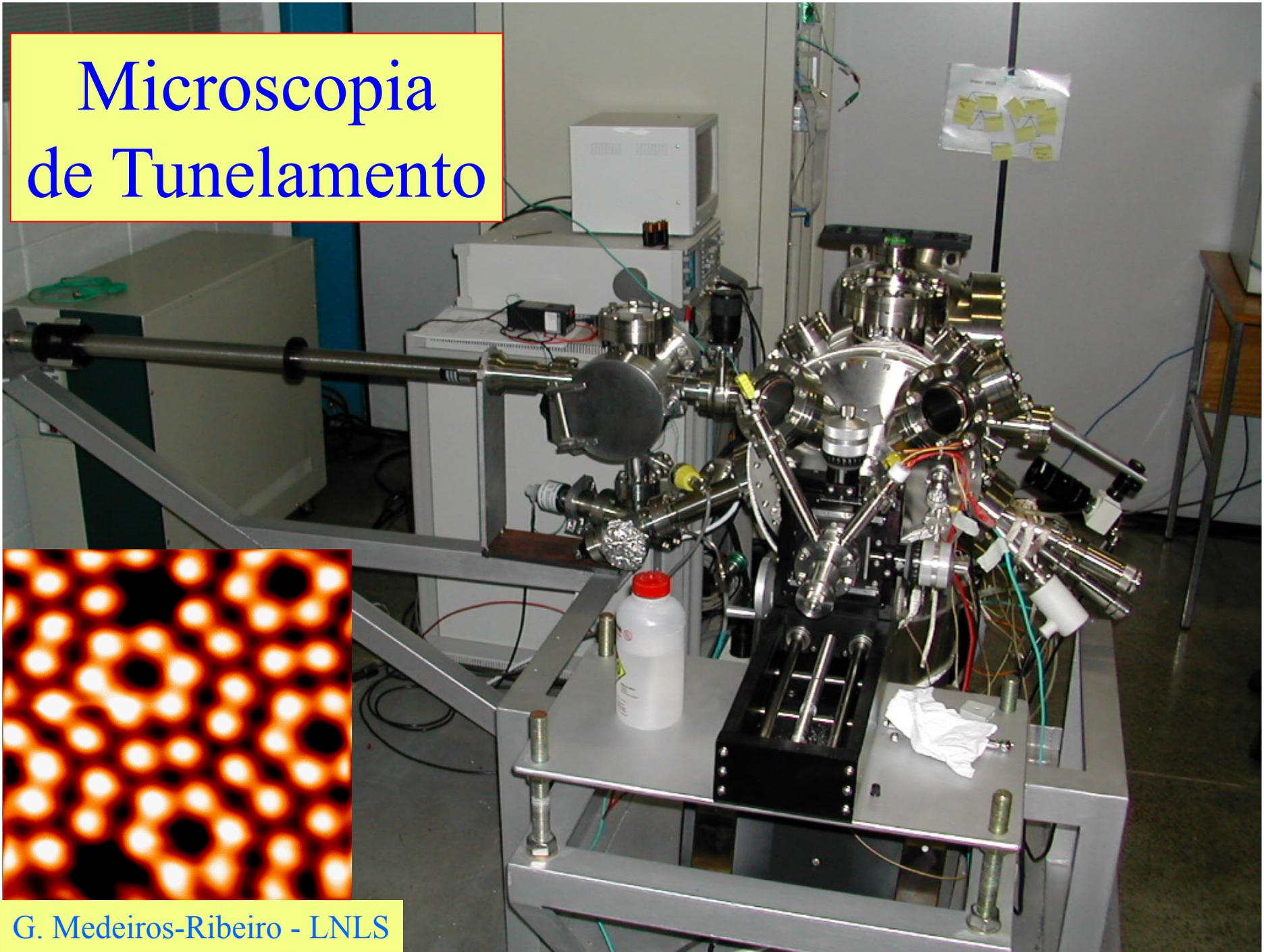


1 nm

# Microscopia de Tunelamento

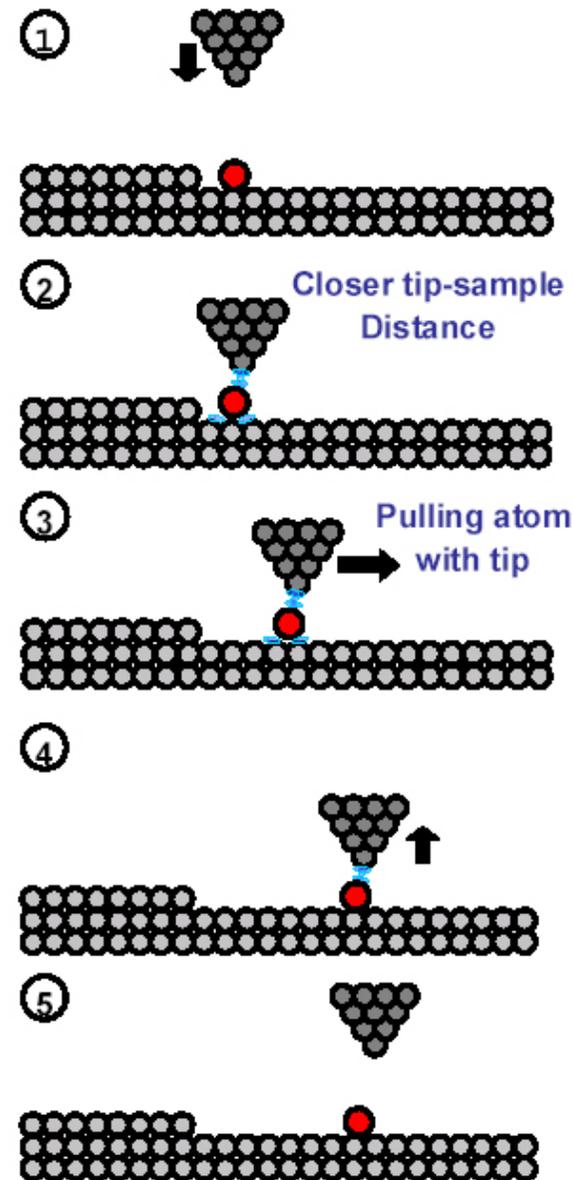


G. Medeiros-Ribeiro - LNLS



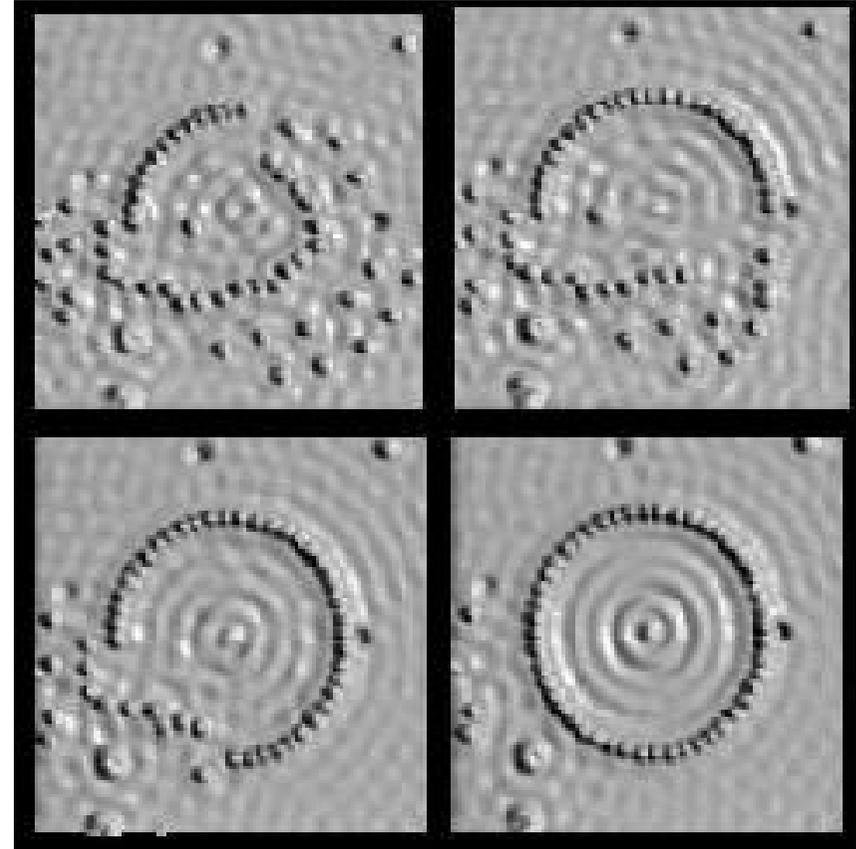
# Manipulando átomos com STM

- 1- STM identifica átomo
- 2- com a ponta próxima seleciona o átomo
- 3- com a ponta próxima movimentada o átomo
- 4-5 libera o átomo na posição desejada

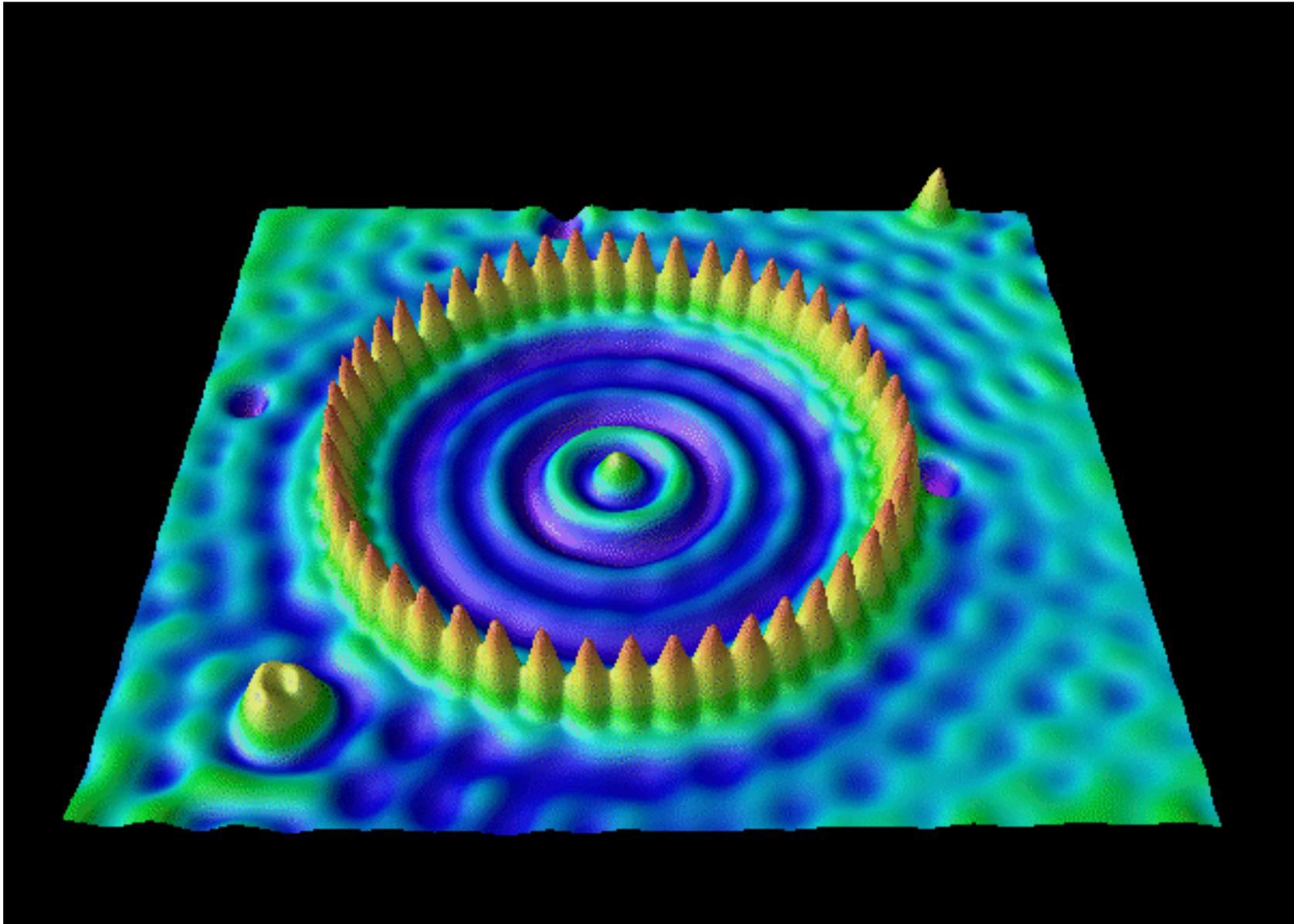


# Currais Quânticos

- Superfície de Cu(111)
- Átomos de Fe são depositados (physisorbed)
- A ponta do STM é aproximada de um Fe a TC aumentada
- Átomo de Fe é levado até posição
- Atomo liberado abaixando a TC.

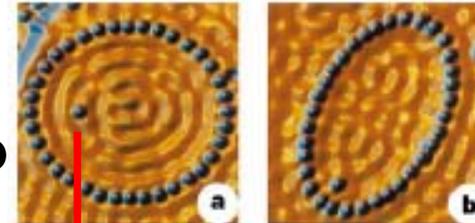


# Curral de 48 átomos de Fe

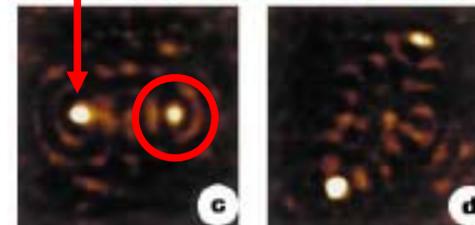


# Miragem quântica

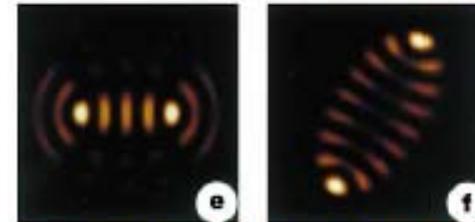
**Imagem de STM com Co no foco**



**Resposta magnética com Co no foco**



**Imagem de STM com Co fora do foco**



**Resposta magnética com Co fora do foco**

