

1ª Lista de Exercícios - Química Quântica

1 - Calcule a potência irradiada por uma superfície de 2.0 m por 3.0 m de um corpo negro a 1500K.

2 - Qual a potência média lida por um detector que coleta 8.0×10^7 fótons em 3,8 ms de uma fonte monocromática de $\lambda = 297$ nm?

3 - Calcule a velocidade de um elétron de $\lambda = 3$ cm.

4 - A função trabalho do césio metálico é 2,14 eV. Calcule a energia cinética e a velocidade de elétrons ejetados pela luz de $\lambda = 700$ nm e $\lambda = 300$ nm.

5 - A distribuição de Planck nos dá a energia na faixa de comprimentos de onda $d\lambda$, para um determinado comprimento de onda λ . Calcule a densidade de energia na faixa de 650 nm até 655 nm no interior de uma cavidade de volume 100 cm^3 quando sua temperatura é de (a) 25°C e (b) 3000°C .

6 - O comprimento de onda do máximo de emissão de um pequeno orifício em um recipiente aquecido foi determinado em uma série de temperaturas, e os resultados são dados abaixo. Deduza o valor da constante de Planck.

Temp./ $^\circ\text{C}$	1000	1500	2000	2500	3000	3500
$\lambda_{\text{max}}/\text{nm}$	2181	1600	1240	1035	878	763

7 - Faça o download do programa em FORTRAN Planck_dist.f disponível na página do curso para calcular a distribuição de Planck em qualquer temperatura ou comprimento de onda ou frequência. Utilize esse mesmo programa para calcular a densidade total de energia na região visível do espectro eletromagnético (350 nm até 600 nm) para o corpo negro nas seguintes temperaturas: (a) 100°C, (b) 500°C; (c) 700°C. Quais são os valores clássicos para essas temperaturas?

8 - A frequência Einstein é expressa em termos de um equivalente em temperatura, $\theta_E = hv/k$. Demonstre que θ_E tem a dimensão de temperatura e expresse o critério para a validade da forma da equação de Einstein em temperaturas altas. Calcule a θ_E para (a) diamante, com $\nu = 4,65 \times 10^{13}$ Hz e (b) para o cobre, para o qual $\nu = 7,15 \times 10^{12}$ Hz. Qual fração do valor previsto pela Lei Dulong-Petit para a capacidade calorífica cada substância possui à temperatura de 25°C.

9 - A função de onda para o estado fundamental de uma partícula confinada em uma caixa unidimensional de comprimento L é:

$$\psi = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Suponha que a caixa tenha comprimento de 10,0 nm. Calcule a probabilidade de que a partícula esteja (a) entre $x = 4,95$ nm e 5,05 nm, (b) entre $x = 1,95$ nm e 2,05 nm e (c) entre $x = 9,90$ nm e 10,0 nm.

10 - A função de onda para o estado fundamental do átomo de hidrogênio é:

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

Onde $a_0 = 53$ pm (o raio de Bohr). (a) Calcule a probabilidade para encontramos o elétron em uma pequena esfera de raio 1.0 pm centrada no núcleo. (b) Agora considere que essa pequena esfera esteja tenha um raio igual a a_0 e calcule a respectiva probabilidade.