



Universidade Federal do Paraná
Dep. Química – Curso de Licenciatura e Bacharelado em Química
Quarta Lista de Exercícios de Química Quântica (CQ115)
Professor Eduardo Lemos de Sá

1ª Questão: A energia da maioria das estrelas provem da fusão de núcleos de H, produzindo núcleos de He. A temperatura no interior do sol (uma estrela típica) é 15×10^6 K. Nesta temperatura, virtualmente nenhum núcleo possui energia cinética suficiente para vencer a repulsão eletrostática que ocorreria quando dois núcleos de H se aproximam para realizar a fusão. Portanto, a proposição feita por Eddington, em 1920, de que a fusão nuclear era a fonte de energia das estrelas caiu em descrédito. Explique por que a fusão ocorre em estrelas, apesar da dificuldade acima mencionada.

2ª Questão: Para um elétron encerrado em uma caixa de energia potencial de altura igual a 2,00 aJ, há três estados quânticos ligados. Encontre o menor e o maior valor da largura desta caixa. (Obs.: $1 \text{ aJ} = 1 \times 10^{-18} \text{ J}$).

3ª Questão: Para um elétron inserido em uma caixa de potencial unidimensional de 15,0 eV de altura e 2,00 Å de largura, determine o número de estados ligados. Mostre que a energia do estado fundamental para este sistema é $6,436491252 \times 10^{-19} \text{ J}$.

4ª Questão: A molécula de 1,4-butadieno pode ser aproximadamente tratada como uma caixa de potencial de paredes infinitas. Baseado nisso e considerando que a largura da caixa seria igual a 7,00 Å, calcule o comprimento de onda do fóton que excitaria o elétron π do último orbital ocupado para o primeiro vazio. Compare o valor obtido com o valor experimental, 217 nm, para esta medida.

5ª Questão: Quando uma partícula, cuja massa é $9,10 \times 10^{-28} \text{ g}$, confinada em uma caixa unidimensional de paredes infinitas, decai do nível $n=5$ para $n=2$, ocorre a emissão de um fóton de frequência $6,0 \times 10^{14} \text{ Hz}$. Encontre a largura desta caixa.

Bom trabalho