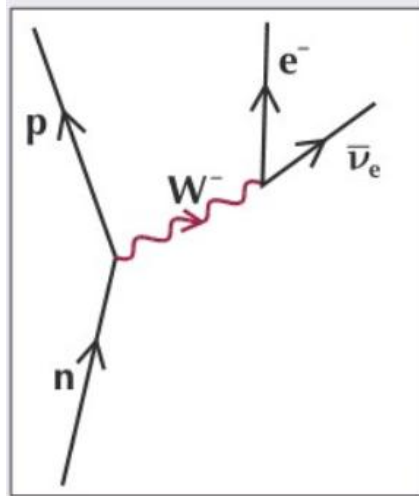




Física Atómica, Nuclear e de Partículas



David Berry
Departamento de Física - Universidade de Évora

2024

Programa

1. Introdução

O modelo nuclear do átomo. Teoria do átomo de Bohr.
Problemas.

2. Átomos com um único eletrão

A teoria quântica do átomo de hidrogénio. As funções de onda do átomo de hidrogénio. Momento magnético e de spin do eletrão.
Problemas.

3. Átomos com vários eletrões

Partículas idênticas e o Princípio de Exclusão de Pauli. Configurações dos eletrões e a tabela periódica dos elementos. Espectros óticos. Espectros de raios X. A experiência de Stern-Gerlach. O laser.
Problemas.

4. Moléculas

Ligações moleculares. Espectros moleculares.
Problemas.

5. Núcleos

Propriedades básicas do núcleo. Energia de ligação do núcleo. Modelos do núcleo. Ressonância magnética nuclear.
Problemas.

6. Processos nucleares

Decaimento nuclear. Decaimento α , β , e γ . Reações nucleares. Fissão, fusão e reatores nucleares. Efeitos biológicos de radiações ionizantes.
Problemas.

7. Partículas elementares

Partículas e anti-partículas. Forças e partículas de troca. Classificação das partículas. Quarks.
Problemas.

Bibliografia

Alonso, M. & Finn, E.J. (2012). Física. Escolar Editora.
Brehm, J.J. & Mullin, W.J. (1989). Introduction to the Structure of Matter. New York: John Wiley.
Das, A. & Ferbel, T. (2003). Introduction to Nuclear and Particle Physics. Singapore: World Scientific.
Krane, K.S. (1988). Introductory Nuclear Physics. New York: John Wiley.
Thomson, M. (2013). Modern Particle Physics. Cambridge University Press.
Tipler, P. & Mosca, G. (2009). Física Para Cientistas e Engenheiros. LTC.

Avaliação

A aprovação nesta UC implica uma Nota Final (NF) igual ou superior a 10 valores. A NF resulta de uma média ponderada entre as notas das componentes teórica (NT) e prática (NP):

$$NF = (2/3) \times NT + (1/3) \times NP$$

A avaliação teórica (NT) tem uma classificação mínima de 10 valores. Pode ser obtida de duas formas alternativas, à escolha do estudante: realização de duas frequências, ou realização de exame final. Todos os estudantes podem comparecer à primeira frequência (a qual não é obrigatória), que será realizada a meio do semestre. A segunda frequência é realizada na data do exame de época normal, podendo o estudante nessa data escolher qual das provas quer realizar - normalmente opta por fazer o exame caso a nota da primeira frequência não lhe seja favorável. No caso da opção por frequências a nota mínima exigida em cada frequência é de 8 valores. A nota NT será a média das duas frequências e terá de ser igual ou superior a 10 valores. Todos os estudantes podem ir a exame de recurso: tanto os que quiserem fazer uma melhoria de nota NT, como os que anteriormente não obtiveram NT positiva.

A avaliação prática (NP) tem uma classificação mínima de 10 valores e baseia-se na avaliação dos relatórios dos trabalhos práticos e participação nas aulas laboratoriais.

Aviso importante: Os alunos não devem faltar às aulas laboratoriais, porque tal prejudica a avaliação prática. Os trabalhadores-estudantes que não puderem comparecer às aulas práticas regularmente devem falar com o docente, no início do semestre, sobre a possibilidade de comparecerem noutra hora, para realizarem as experiências.

Outras informações

Os alunos devem consultar regularmente a plataforma moodle. Aí podem encontrar material de estudo adicional bem como informação sobre as datas e resultados das frequências e exames. Esta plataforma é ainda utilizada para enviar emails aos estudantes com informações relevantes.

De acordo com o artigo 97º do Regulamento Académico, “A frequência de aulas é um direito e um dever do estudante. O estudante deve frequentar pelo menos 75% da totalidade das aulas práticas e teórico-práticas sem prejuízo do disposto no presente regulamento sobre regimes especiais de frequência.”

Regras para as provas de avaliação: Os estudantes devem obrigatoriamente desligar os telemóveis em todas as provas de avaliação. Em nenhuma destas provas é permitido o uso de formulários.

Chama-se ainda a atenção: “A utilização nas aulas de telemóveis, computadores pessoais e outros dispositivos eletrónicos só é permitida se contribuir positivamente para o processo de ensino e aprendizagem e deve ser explicitamente autorizada pelo docente.”

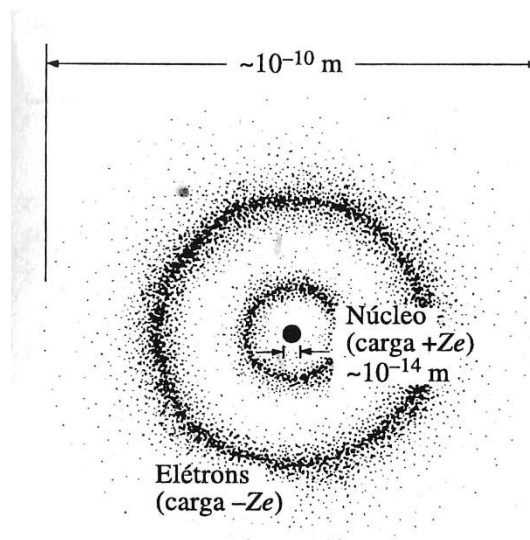
1. Introdução

1.1 O modelo nuclear do átomo

Todos os átomos consistem em três partículas elementares: próton, neutrão, elétron.

O átomo tem

- um núcleo carregado positivamente com prótons e neutrões
- elétrons em orbitas à volta do núcleo.



Os prótons têm carga positiva, os neutrões são eletricamente neutros, e os elétrons têm carga negativa.

<i>Particle</i>	<i>Charge (C)</i>	<i>Mass (kg)</i>
<i>Proton</i>	$+1.60 \times 10^{-19}$	1.67×10^{-27}
<i>Neutron</i>	0	1.67×10^{-27}
<i>Electron</i>	-1.60×10^{-19}	9.11×10^{-31}

e - carga elementar, $1e = 1.602 \times 10^{-19}$ C; u - unidade de massa, $1u = 1.67 \times 10^{-27}$ kg

Como os átomos são eletricamente neutros, então

número de elétrons = número de prótons.

Os neutrões são importantes para manter a estabilidade (os prótons repelem-se).

Por vezes, usamos carga relativa e massa relativa, e

<i>Particle</i>	<i>Relative Charge</i>	<i>Relative Mass</i>
<i>Proton</i>	<i>Positive, +1</i>	<i>1</i>
<i>Neutron</i>	<i>Neutral, 0</i>	<i>1</i>
<i>Electron</i>	<i>Negative, -1</i>	<i>0.0005</i>

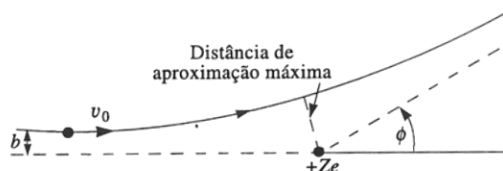
Os elementos podem ter núcleos com diferentes números de neutrões: os isótopos (por exemplo, hidrogénio, deutério, trítio ...)

Na estrutura do átomo devemos considerar:

- Número de massa A é o número de protões e neutrões
- Número atómico Z é o número de protões
- Número de neutrões N é igual a $A - Z$.

Podemos representar o átomo como A_ZX onde X é o elemento químico.

Para conhecer a distribuição dos eletrões e dos protões num átomo, devemos sondar o seu interior:



O desvio das partículas depende do seu parâmetro de impacto, b .

Quanto menor for o parâmetro de impacto, mais próximo do centro do átomo passará a partícula e maior será o desvio ϕ , se a carga elétrica positiva estiver concentrada no centro.

O método experimental consiste em dirigir várias partículas para uma partícula muito delgada e observar as partículas desviadas. Como b não pode ser controlado, temos de fazer uma análise estatística para interpretar os resultados experimentais.

Exemplo

Determine a distância de aproximação máxima, para uma colisão frontal, de um próton, dirigido contra um núcleo de ouro ($Z = 79$) com uma energia de 10 MeV.

Solução

A energia total do sistema projétil + núcleo é

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{e(Ze)}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Quando a partícula está muito afastada, toda a sua energia é cinética e igual a $\frac{1}{2}mv_0^2$. A conservação da energia exige que

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{e(Ze)}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{1}{2}mv_0^2$$

No ponto de máxima aproximação R a velocidade v é nula e então

$$R = \frac{e(Ze)}{4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2}mv_0^2}$$

Substituindo,

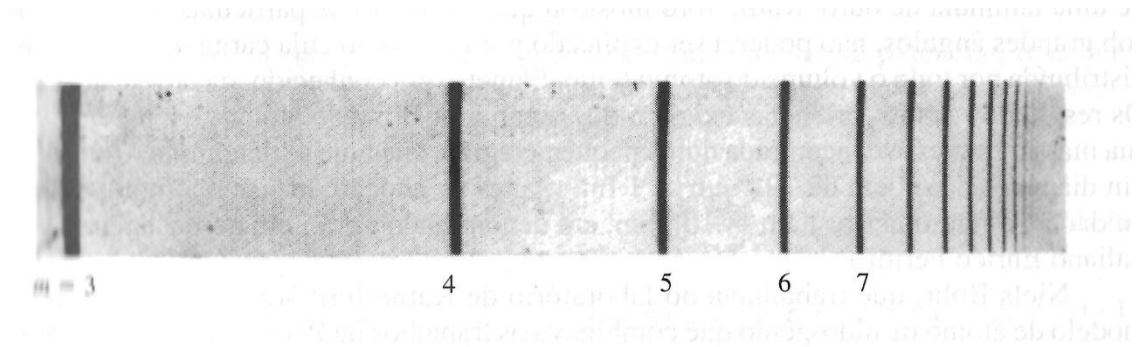
$$R = 1.139 \times 10^{-14} \text{m}$$

Como o raio de um núcleo de ouro é de $8.15 \times 10^{-15} \text{ m}$, os prótons são detidos e refletidos antes de atingir o núcleo.

1.2 Teoria do átomo de Bohr

Em 1913, Bohr formulou uma teoria para o átomo de hidrogénio que explicava as séries de linhas nos espectros de infravermelho e de ultravioleta.

A série de Balmer:



Os comprimentos de onda do espectro atómico do hidrogénio seguem séries simples:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

onde R é a constante de Rydberg e

$$R = 10.973 \mu\text{m}^{-1}$$

Com $n_2 = 1$, temos a série de Lyman:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$n_2 = 2$, a série de Balmer:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$n_2 = 3$, a série de Paschen:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$n_2 = 4$, a série de Brackett:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$n_2 = 5$, a série de Pfund:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

Baseado na série de Balmer, Bohr propôs quatro postulados básicos:

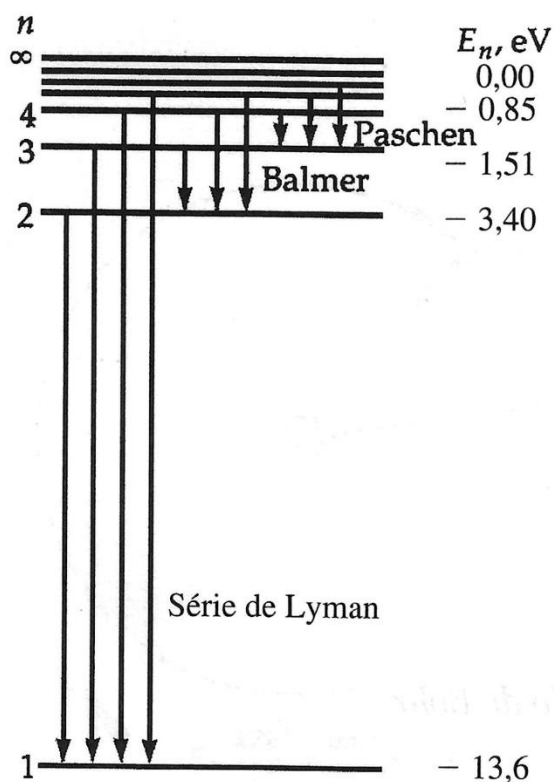
1. Um eletrão num átomo move-se numa órbita circular em torno do núcleo sob a influência da atração elétrica entre o eletrão e o núcleo.
2. É possível para um eletrão mover-se somente numa órbita para a qual o seu momento angular L é dado por

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

onde n é o número quântico principal, h é a constante de Planck e m é a massa do eletrão.

3. Apesar de estar constantemente acelerado, um eletrão ao mover-se nesta órbita permitida não irradia energia eletromagnética. Portanto, a sua energia total permanece constante.
4. Radiação eletromagnética é emitida se um eletrão inicialmente movendo-se numa órbita de energia total E_i , muda descontinuamente o seu movimento de modo que passa a mover-se numa órbita de energia total E_f . A frequência da radiação emitida é dada por

$$hf = E_i - E_f$$



O facto da energia e do momento angular estarem quantizados é uma indicação de que devem ser considerados certos princípios novos ao analisar o movimento dos eletrões. A teoria correspondente é a

Mecânica Quântica

Detalhes da teoria de Bohr

Suponhamos, para simplificar, que o elétron se move em volta do núcleo, numa órbita circular. Suponhamos também que podemos utilizar a mecânica newtoniana, em vez da quântica, para analisar o movimento. Então, a equação do movimento do elétron, segundo a equação 8.2, é $m_e v^2/r = F$, onde $F = Ze^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ é a força de atração produzida pelo núcleo. Então,

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \text{ou} \quad m_e v^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Quando se introduz esta relação na expressão para a energia, $E = \frac{1}{2}mv^2 - Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$, obtemos

$$E = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{ou} \quad E = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 (2r)}$$

Note-se que esta expressão concorda com a equação 11.10 para o caso gravitacional, se substituirmos o conjunto de fatores gravitacionais GMm pelo conjunto de fatores elétricos $Ze^2/4\pi\epsilon_0$. Podemos expressar a equação 23.10 em termos de momento angular do elétron, que é uma constante do movimento, uma vez que a força é central. Recordemos que $L = m_e v r$; então,

$$L^2 = m_e (m_e v^2) r^2 = \frac{m_e Ze^2 r}{4\pi\epsilon_0}$$

Utilizamos esta equação para eliminar r da equação 23.10 e obter

$$E = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 L^2} = -\text{const.} \frac{Z^2}{L^2}$$

Esta expressão é válida apenas para órbitas circulares. Ao comparar este resultado com a equação 23.8 para os níveis de energia determinados experimentalmente, verifica-se que L^2 deve ser proporcional a n^2 ; isto é, o momento angular está quantizado de acordo com a equação 23.9, $L = n\hbar$ onde \hbar é uma constante. Então, a equação 23.12 para os níveis de energia possíveis converte-se em

$$E = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

Quando comparamos a equação 23.13 com o resultado experimental dado pela equação 23.8, obtém-se o valor de \hbar . Fazendo $L = n\hbar$ na equação 23.11, verificamos que o raio das órbitas possíveis é

$$r = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{Ze^2 m_e} n^2 = \frac{a_0}{Z} n^2$$

onde

$$a_0 = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{e^2 m_e} = 5,292 \times 10^{-11} \text{ m}$$

é designado como **raio de Bohr** e corresponde ao raio do átomo de hidrogênio ($Z = 1$) no seu estado fundamental ($n = 1$). No entanto, deve-se fazer notar que o valor de r obtido na equação 23.14 não deve ser tomado literalmente. De acordo com a mecânica quântica, dever-se-ia considerar apenas como uma indicação da ordem de grandeza da região em que o elétron tem maior probabilidade de ser encontrado.

Então, os valores possíveis da energia de hidrogénio são

$$E = -\frac{e^4 m Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 (h/2\pi)^2 (n^2)} = -\frac{E_0}{n^2}$$

onde $E_0 = 13.6 \text{ eV}$

Exemplo

Determine a energia e o comprimento de onda da raia de maior comprimento de onda na série de Lyman.

Solução

Transição $n = 2$ a $n = 1$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 121.6 \text{ nm}$$

Problemas

1. Um átomo de oxigénio tem 8 prótons e 8 neutrões.
 - (a) Qual é o número de prótons desse átomo?
 - (b) Qual é o número de núcleos deste átomo?
 - (c) Escreva esta informação em notação de núclídeos.
2. Elemento X tem 21 prótons e 24 neutrões.
 - (a) Escreva isso em notação de núclídeo.
 - (b) Sugira a notação de núclídeo para um isótopo diferente do elemento X.
3. O hélio é representado em notação de núclídeo como: ${}^4_2\text{He}$
 - (a) Quantos prótons tem um átomo de hélio?

Um isótopo de hélio tem um número de núcleos 3.

- (b) Quantos prótons possui esse isótopo?
 - (c) Calcule a carga específica de um núcleo deste isótopo.
4. Um ião magnésio contém 12 prótons, 12 neutrões e 10 eletrões. Calcule a carga específica deste ião magnésio.
 5. Um próton produzido num acelerador de Van de Graaf de 1 MeV é lançado contra uma película de ouro. Calcule a distância de aproximação máxima para uma colisão frontal e para colisões de parâmetros de impacto de 10^{-15} m e 10^{-14} m.
 6. Deduza a expressão para os valores permitidos da energia total do eletrão usando a teoria de Bohr. Calcule a energia total em eV da órbita mais pequena para o berílio.
 7. Um átomo de hidrogénio no seu estado fundamental absorve um fóton de 20 eV. Qual é a velocidade do eletrão libertado?
 8. Um eletrão com 3.0 eV é capturado por um núcleo nu de hélio. Se for emitido um fóton de 2400 Å, em que nível é o eletrão capturado?
 9. No átomo de hidrogénio calcule a velocidade do próton no estado fundamental.
 10. Considere o modelo clássico e o modelo de Bohr para a estrutura do átomo.
 - (a) Deduza a expressão para o raio da órbita de um eletrão no átomo de hidrogénio e calcule o seu valor.
 - (b) Deduza a expressão para a frequência da radiação eletromagnética considerando que a radiação é emitida por este eletrão circulante e calcule o seu valor.
 - (c) Mostre que no limite $n \rightarrow \infty$, o número de ondas coincide com a previsão do modelo clássico (Princípio de Correspondência).

2. Átomos com um único eletrão

2.1 A teoria quântica do átomo de hidrogénio

O modelo de Bohr prevê vários aspetos elementares do espectro atómico de átomos com um único eletrão.

Contudo, uma compreensão completa só pode ser atingida com a aplicação da mecânica quântica ao átomo de hidrogénio.

Suposições do modelo:

1. O núcleo tem massa M localizada na origem.
2. O eletrão tem massa m e carga e^- e encontra-se numa posição (x, y, z) .
3. O eletrão está a mover-se sob a influência da força elétrica, com a energia cinética $p^2/2m$ e tem a energia potencial $U(r)$:

$$U(r) = -k \frac{Ze^2}{r}$$

A equação de Schrödinger independente do tempo, para uma partícula que se move em três dimensões e tem massa m é

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

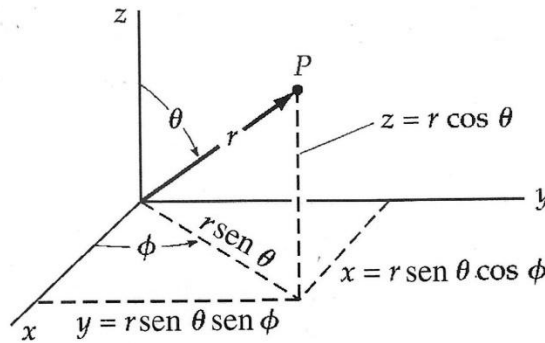
Ψ é a função de onda do eletrão - o quadrado do módulo da função de onda $|\Psi|^2$ dá a probabilidade de se encontrar o eletrão numa certa região do espaço. As condições de contorno impostas às funções de onda levam à quantização dos comprimentos de onda e das frequências, e assim, à quantização da energia do eletrão.

Em virtude de a energia potencial $U(r)$ só depender da distância radial r o problema aborda-se com mais conveniência em coordenadas esféricas, r , θ e ϕ e

$$z = r \cos \theta$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$



e temos

$$\nabla^2 \Psi(r, \theta, \phi) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi(r, \theta, \phi) = 0$$

onde

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

A solução deve ter a forma

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Substituindo, temos um conjunto de três equações diferenciais ordinárias.

$$\frac{\Theta \Phi}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R \Phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{R \Phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) R \Theta \Phi = 0$$

A solução desta equação leva a três números quânticos que são simbolizados por n , l , e m e são interdependentes.

Multiplicando por

$$\frac{r^2 \sin^2 \theta}{R \Theta \Phi}$$

temos

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta (E - V(r))$$

Como o membro esquerdo dessa equação não depende de r ou θ , enquanto o direito não depende de ϕ , o valor comum de ambos não pode depender de nenhuma dessas variáveis. O valor comum deverá, portanto, ser uma constante, que por conveniência chamaremos de $-m_l^2$. Obtemos duas equações:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2\Phi$$

- Equação (a)

e

$$-\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{2m}{\hbar^2}r^2(E - V(r)) = -\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}$$

Transpondo termos podemos escrever a segunda equação como

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(E - V(r)) = \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)$$

Como temos aqui uma equação cujo membro esquerdo não depende de uma das variáveis e cujo membro direito não depende da outra variável, concluímos novamente que ambos os membros devem ser iguais a uma constante: $l(l+1)$, por conveniência.

Então, temos duas equações

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} = l(l+1)\Theta$$

- Equação (b)

e

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))R = l(l+1)\frac{R}{r^2}$$

- Equação (c).

Então, a função de onda total do eletrão em qualquer estado é dada por

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Resolvendo estas equações, (a), (b), (c), encontraremos que a equação para $\Phi(\phi)$ só tem soluções aceitáveis

- para certos valores de m_l .

Usando esses valores de m_l na Equação (b), ocorre que essa equação também só tem soluções

- para certos valores de l .

Usando esses valores de l na Equação (c), essa equação só tem soluções

- para certos valores de energia total E - a energia do átomo é quantizada.

2.1.1 Soluções das equações

1. A solução de

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2\Phi$$

tem a forma

$$\Phi(\phi) = e^{im_l\phi}$$

Esta função deve ser **unívoca** e m_l só pode ter os seguintes valores

$$|m_l| = 0, 1, 2, 3 \dots$$

2. A solução de

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \Theta = l(l+1)\Theta$$

envolve um tratamento laborioso. Encontram-se soluções aceitáveis somente se l tiver os valores

$$l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots$$

e as soluções podem ser escritas

$$\Theta(\theta) = \sin^{|m_l|}\theta F(\cos\theta)$$

$F(\cos\theta)$ são polinómios em $\cos\theta$, cujas formas dependem do valor do número quântico l e do valor absoluto do número quântico m_l .

3. A solução de

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))R = l(l+1) \frac{R}{r^2}$$

é igualmente complicada. Tem a forma

$$R(r) = e^{-Zr/na_0} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^l G_{nl} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)$$

onde a_0 tem o valor

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

$G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)$ são polinómios em $\frac{Zr}{a_0}$, com formas diferentes para os diferentes valores de n e l .

Um dos resultados importantes da teoria de Schrödinger do átomo de um único eletrão é a previsão para os valores permitidos para a energia total dos estados ligados do átomo:

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^22\hbar^2n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

Nesta expressão, o número quântico n , é

$$n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots$$

Então a solução da equação de em coordenadas esféricas leva a três números quânticos:

$$|m_l| = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots$$

$$n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots$$

Essas condições são expressas mais convenientemente sob a forma

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

- o número quântico principal

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

- o número quântico do momento angular

$$m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, +l - 1, l$$

- o número quântico orbital magnético.

O momento angular orbital do eletrão \mathbf{L} tem uma magnitude definida como

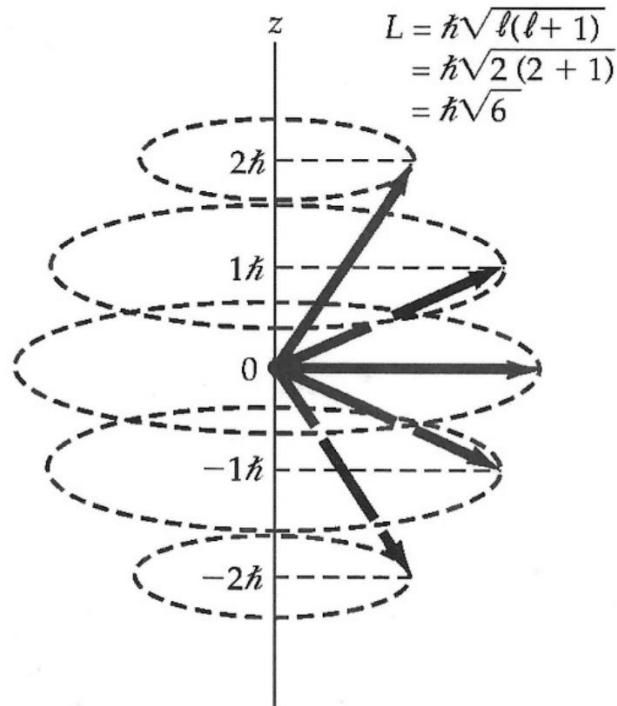
$$L = \sqrt{l(l + 1)}\hbar$$

onde $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$, n sendo o número quântico principal.

O número quântico m está relacionado com a componente do momento angular numa certa direção, por exemplo por colocando o átomo num campo magnético. Se a direção z for a do campo magnético, a componente z do momento angular do eletrão é

$$L_z = m\hbar$$

Se medirmos o momento angular do eletrão em unidades \hbar , vemos que o momento angular é quantizado e assume valores $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ e a componente numa certa direção só pode assumir $2l+1$ valores, que vão, por inteiros, de $-l$ até l , nas unidades \hbar :



Exemplo

Se um átomo tiver o momento angular caracterizado pelo número quântico orbital $l = 2$, quais os valores possíveis de L_z , e qual o menor ângulo possível entre \mathbf{L} e os eixos dos z ?

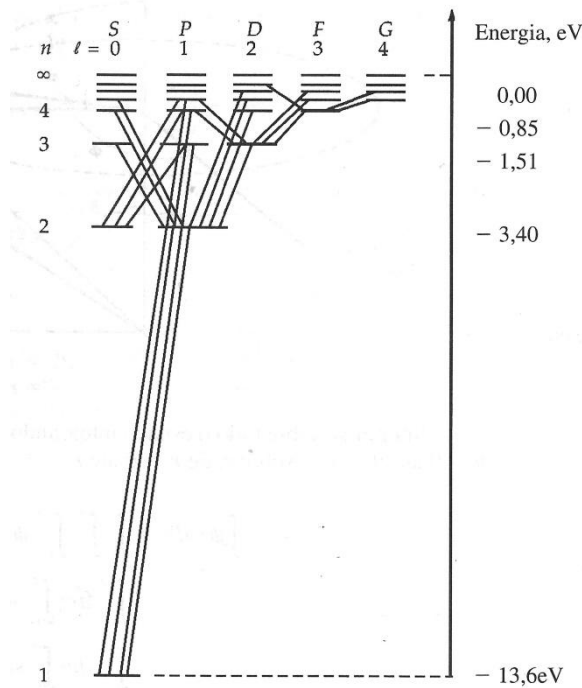
Solução

Os valores possíveis de L_z são $m\hbar$ onde $m = -2, -1, 0, 1, 2$.

O módulo de \mathbf{L} é $\sqrt{6}\hbar$.

$\theta = 35.3^\circ$.

Os níveis de energia do hidrogénio são:



Uma notação espectroscópica para distinguir entre os valores diferentes de l é

l : 0 1 2 3 4 5 6 ...

Notação: s p d f g h i ...

e, por exemplo, o estado

2p \equiv $n = 2, l = 1$

4d \equiv $n = 4, l = 2$

Quando o átomo faz uma transição de um estado de energia permitido, para um outro estado, há emissão ou absorção de radiação. Estas transições provocam as linhas (raias) espectrais características do átomo.

As transições obedecem as regras de seleção

$$\Delta m = 0 \text{ ou } \mp 1$$

Estas regras estão relacionadas com a conservação do momento angular e ao fato de o fóton ter um momento angular intrínseco cuja componente máxima é $1\hbar$.

Os comprimentos de onda das linhas espectrais estão assim relacionados:

$$hf = \frac{hc}{\lambda} = E_i - E_f$$

2.2 As funções de onda do átomo de hidrogénio

As funções de onda, soluções da equação de Schrödinger, são caracterizadas pelos números quânticos e escrevem-se $\Psi(r, \theta, \phi)$

Para um dado valor de n existem geralmente vários valores diferentes possíveis para l e m_l .

É claro que haverá situações em que duas ou mais funções totalmente diferentes corresponderão a exatamente o mesmo valor de E_n . Este fenómeno chama-se degenerescência.

Valores possíveis de l e m_l para $n = 1, 2, 3$

n	1	2		3		
l	0	0	1	0	1	2
m_l	0	0	-1, 0, +1	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2
Número de autofunções degeneradas para l	1	1	3	1	3	5
Número de autofunções degeneradas para cada n	1	4		9		

No estado mais baixo, o estado fundamental, o número quântico principal n tem o valor 1, l é 0 e m é 0. A função de onda é

$$\psi_{100} = C_{100}e^{-Zr/a_0}$$

e

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

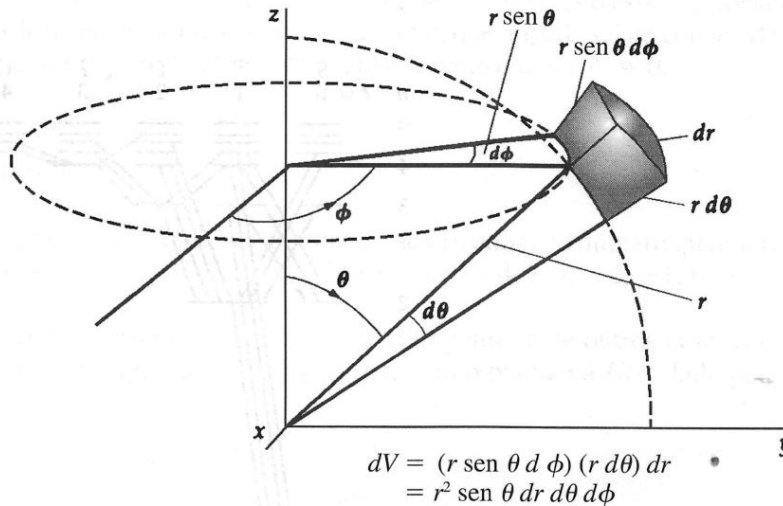
e C_{100} é uma constante determinada pela condição de normalização:

Em três dimensões, a condição de normalização é

$$\int \psi^2 dV = 1$$

onde dV é o elemento de volume e a integração se faz sobre todo o espaço. Em coordenadas esféricas, o elemento de volume (Figura 37-4) é

$$dV = (r \sin \theta d\phi) (r d\theta) dr = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$



Integra-se sobre todo o espaço integrando sobre ϕ , de $\phi = 0$ até $\phi = 2\pi$, sobre $\theta = 0$ até $\theta = \pi$, e sobre r , de $r = 0$ até $r = \infty$. A condição de normalização é então

$$\begin{aligned} \int \psi^2 dV &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^2 r^2 \sin \theta d\phi d\theta dr \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty \psi^2 r^2 dr \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty C_{100}^2 r^2 e^{-2Zr/a_0} dr = 1 \end{aligned}$$

Uma vez que não há dependência em θ ou em ϕ , na função ψ_{100} , a integração sobre os ângulos dá 4π . Por uma tabela de integrais, vem

$$\int_0^\infty r^2 e^{-2Zr/a_0} dr = \frac{a_0^3}{4Z^3}$$

Então

$$4\pi C_{100}^2 \left(\frac{a_0^3}{4Z^3} \right) = 1$$

e

$$C_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$$

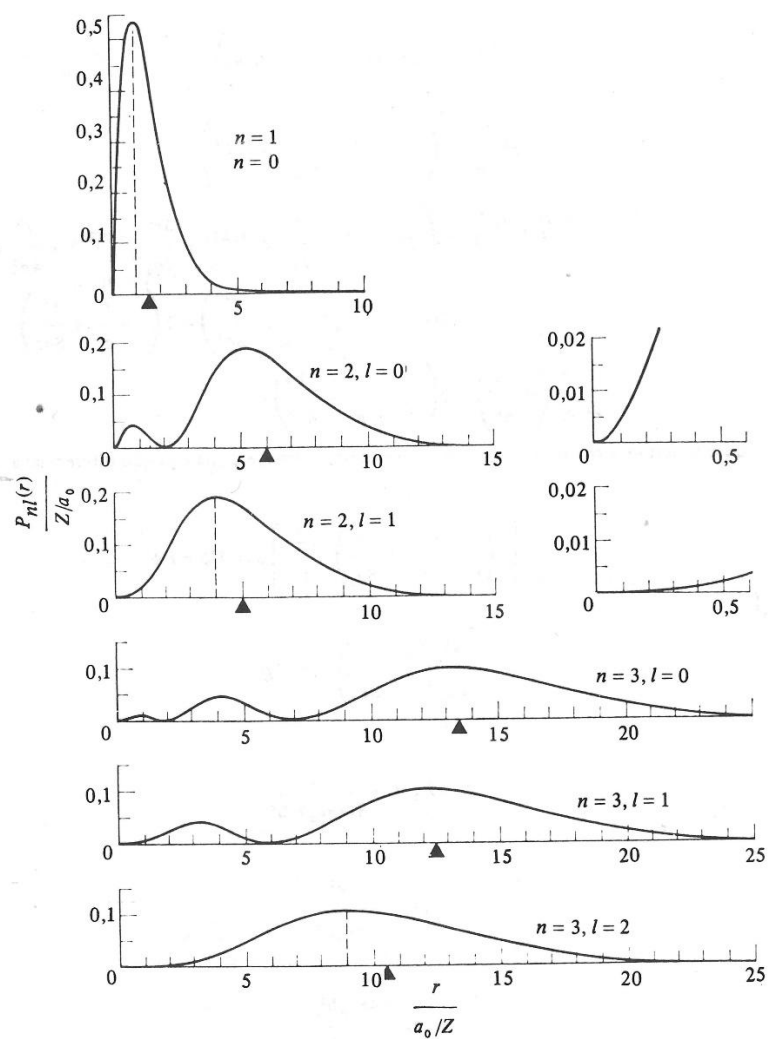
ver a tabela:

Números Quânticos			Autofunções
n	l	m_l	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$
3	1	± 1	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	± 1	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

Na teoria de Schrödinger, a densidade de probabilidade de encontrar o elétron é dada por

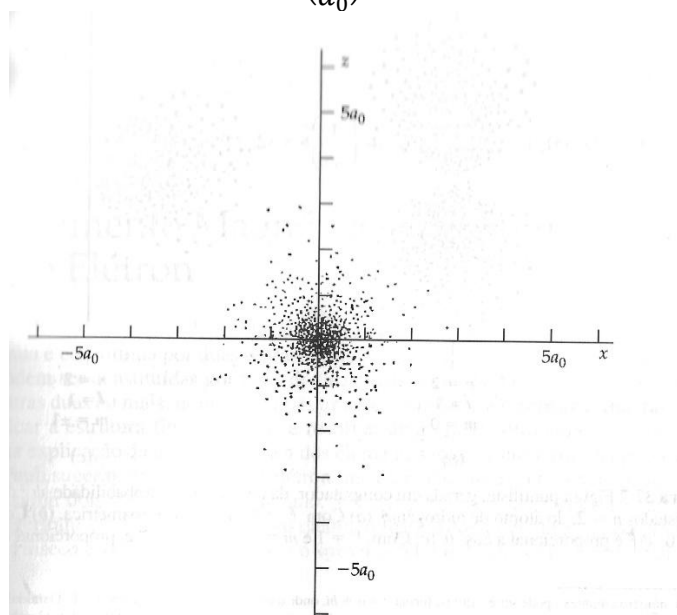
$$P(r) = 4\pi r^2 R^* R \Theta^* \Theta \Phi^* \Phi$$

Como estas são funções de três coordenadas, não podemos visualizar a representação gráfica em duas dimensões. Podemos, no entanto, estudar os seus comportamentos tridimensionais considerando separadamente as suas dependências em cada coordenada:

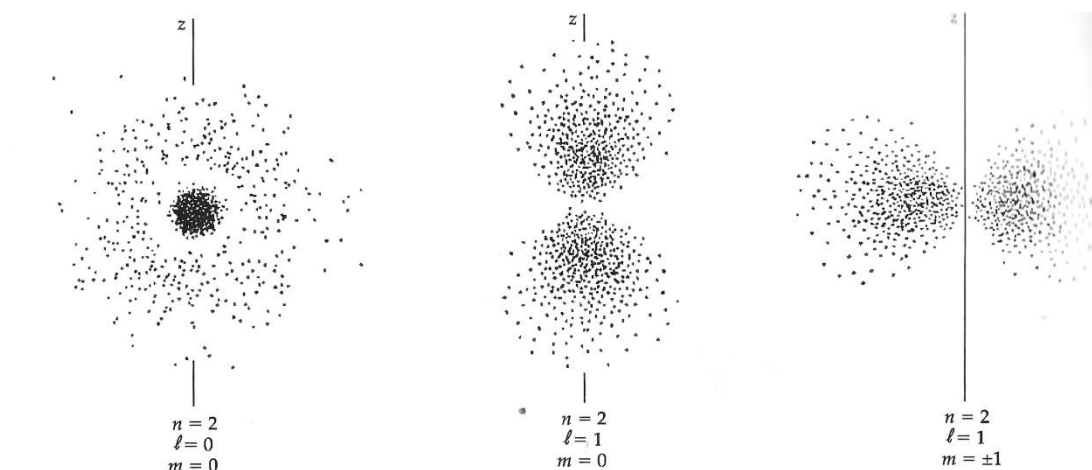


No átomo de hidrogénio, no estado fundamental, a densidade de probabilidade radial é

$$P(r) = 4 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 r^2 e^{-Zr/a_0}$$



Para o estado $n = 2$



Exemplo

Num átomo de hidrogénio no estado fundamental, determine a probabilidade de se encontrar o eletrão no intervalo $\Delta r = 0.02a_0$ em (a) $r = a_0$ e (b) $r = 2a_0$

Solução

(a) $P(r)\Delta r = 0.0108$

(b) $P(r)\Delta r = 0.00586$

2.3 Momento magnético e o spin do eletrão

O momento angular orbital \mathbf{L} tem uma magnitude definida como

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

onde $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$, n sendo o número quântico principal.

Há evidência que o eletrão tem um momento angular intrínseco \mathbf{S} , chamado spin caracterizado pelo número quântico s .

A evidência encontra-se:

1. Espectroscopia - desdobramento das linhas.
2. A experiência de Stern Gerlach - o efeito de um campo elétrico

Classicamente, o momento angular total \mathbf{J} de um eletrão num átomo é dado por

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Num sistema clássico, o módulo do momento angular total \mathbf{J} pode ter qualquer valor entre $L + S$ e $L - S$.

Aqui, os dois momentos angulares \mathbf{L} e \mathbf{S} são ambos quantizados e as respetivas direções são restritas. Para um eletrão, com momento angular orbital caracterizado pelo número quântico l e spin $s = 1/2$, o momento angular total \mathbf{J} tem módulo

$$\sqrt{j(j+1)}\hbar$$

onde o número quântico pode ter

$$j = l + \frac{1}{2}$$

ou

$$j = l - \frac{1}{2}$$

$l \neq 0$

Os dois diagramas vetoriais ilustram as combinações possíveis de $J = 3/2$ e $j = 1/2$ para o caso $l = 1$. Os comprimentos dos vetores são proporcionais a $\sqrt{l(l+1)}\hbar$, $\sqrt{s(s+1)}\hbar$ e $\sqrt{j(j+1)}\hbar$

Os estados atómicos que têm os mesmos valores de n e l , porém diferentes valores de j têm energias ligeiramente diferentes, em virtude da interação entre o spin do eletrão e o seu momento angular orbital - o efeito de spin-orbita.

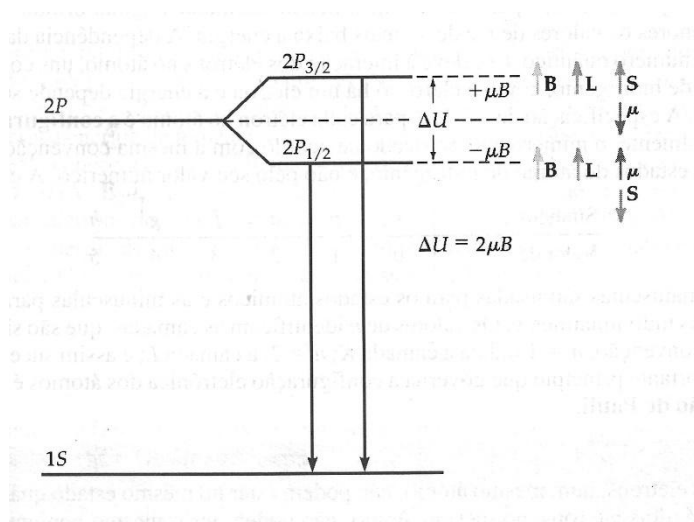
A divisão de uma linha espectral, como por exemplo a que resulta das transições

$$2P_{3/2} \rightarrow 2S_{1/2}$$

e

$$2P_{1/2} \rightarrow 2S_{1/2}$$

é denominada divisão da estrutura fina.



A energia de um momento magnético, num campo magnético, depende da sua orientação e é dada por

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B$$

Exemplo

A estrutura fina da separação dos níveis $2P_{3/2}$ e $2P_{1/2}$ no hidrogénio, é 4.5×10^{-5} eV. Se um eletrão sente um campo magnético interno \mathbf{B} , a divisão dos níveis de energia provocada pela interação spin-orbita será da ordem de $\Delta E = 2\mu_B B$ onde μ_B é o magnetão de Bohr. A partir disto, estime o campo magnético que atua sobre o eletrão $2p$ no átomo de hidrogénio.

Solução

$$B = 0.39 \text{ T}$$

Problemas

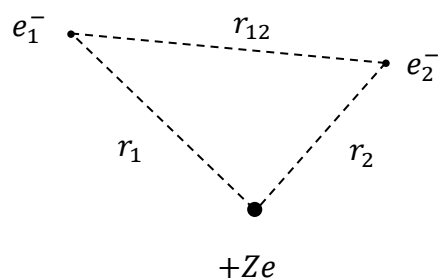
1. Com $l = 1$, determine
 - (a) O módulo do momento angular L e
 - (b) os valores possíveis de m .
 - (c) Escreva esta informação em notação de núclídeos.
2. Se $n = 3$
 - (a) quais são os valores possíveis de l ?
 - (b) Para cada valor de l em (a), relaciona os valores possíveis de m .
 - (c) Levando em conta que existem dois estados quânticos para cada par de valores de l e m , em virtude do spin do elétron, determine o número total de estados possíveis de um elétron com $n = 3$.
3. Quais os valores possíveis de n e de m se
 - (a) $l = 3$
 - (b) $l = 4$
 - (c) $l = 0$
4. Para o estado fundamental do átomo de hidrogénio, determine os valores de
 - (a) Ψ
 - (b) Ψ^2
 - (c) a densidade de probabilidade radial $P(r)$ em $r = a_0$.
Dê as respostas em termos de a_0 .
5. Para o estado fundamental do átomo de hidrogénio, determine a probabilidade de se encontrar um elétron no intervalo $\Delta r = 0.03a_0$ em
 - (a) $r = a_0$
 - (b) $r = 2a_0$
6. Determine os valores de
 - (a) Ψ_{200}
 - (b) Ψ_{200}^2
 - (c) da densidade de probabilidade radial $P(r)$ em $r = a_0$ para o estado $n = 2$, $l = 0$ e $m = 0$, no hidrogénio. Dê as respostas em termos de a_0 .
7. O momento angular total do átomo de hidrogénio, num certo estado excitado, tem o número quântico $j = 3/2$. O que se pode dizer sobre o número quântico do momento angular orbital l ?

3. Átomos com vários eletrões

Vamos usar a mecânica quântica de Schrödinger para estudar átomos multi-eletrónicos. A equação de Schrödinger não pode ser resolvida exatamente – portanto aproximações são necessárias.

3.1 Partículas idênticas e o Princípio de Exclusão de Pauli

Considere o átomo de hélio



A energia potencial dos eletrões é

$$E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

Podemos assumir que os eletrões se movem independentemente um do outro e assim podemos ignorar o último termo. Então a função de onda do átomo é o produto das funções de onda de cada eletrão.

Considere os dois eletrões:

- | | | |
|----|----------------|-------------|
| 1. | n, l, m_l | $\psi_a(1)$ |
| 2. | n', l', m'_l | $\psi_a(2)$ |

Então

$$\Psi_{\text{átomo}} = \psi_a(1)\psi_b(2)$$

e

$$\begin{aligned} |\Psi_{\text{átomo}}|^2 &= |\psi_a(1)\psi_b(2)|^2 \\ &= |\psi_a(1)|^2 |\psi_b(2)|^2 \end{aligned}$$

Contudo

$$\Psi'_{\text{átomo}} = \psi_a(2)\psi_b(1)$$

deve representar um estado da mesma energia com a função de onda

$$\Psi_{\text{átomo}} = \psi_a(1)\psi_b(2)$$

Este fenómeno chama-se degenerescência de troca.

Agora, elétrons são idênticos e indistinguíveis e este necessita que $|\Psi_{\text{átomo}}|^2$ seja simétrica em relação aos dois elétrons e as duas funções de onda $\psi_a(1)\psi_b(2)$ e $\psi_a(2)\psi_b(1)$ não satisfazem esta condição.

Então, considere as seguintes duas combinações lineares:

Simétrica:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)]$$

Anti-simétrica:

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)]$$

e $|\Psi_S|^2$ e $|\Psi_A|^2$ são simétricos em relação aos elétrons.

Agora, se os elétrons se trocarem

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)]$$

temos

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(2)\psi_b(1) + \psi_b(2)\psi_a(1)]$$

e

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)]$$

temos

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(2)\psi_b(1) - \psi_b(2)\psi_a(1)]$$

Vemos que a função de onda total simétrica Ψ_S não se altera com a permutação e que a função de onda total antissimétrica Ψ_A fica multiplicada por -1.

Agora, como resultado de uma análise de dados referentes a níveis de energia de átomos, Pauli em 1925 enunciou o seu famoso princípio de exclusão:

Num átomo multi-eletrónico nunca pode haver mais de um elétron ocupando o mesmo estado quântico.

3.2 Configurações dos eletrões e a tabela periódica dos elementos

Vamos agora usar o Princípio de exclusão de Pauli para determinar as configurações dos átomos.

Primeiro, há duas regras básicas:

1. O sistema está estável quando a sua energia total é mínima;
2. Somente pode existir um eletrão por estado quântico.

Agora, eletrões com o mesmo valor de n pertencem à mesma *camada*. Para um valor de n eletrões que apresentam o mesmo valor de l encontram-se na mesma sub-camada.

Assim, para cada valor de l há $(2l+1)$ valores de m_l e para cada m_l há dois valores de m_s .

Então, numa sub-camada, pode haver um máximo de

$$N_s = 2(2l + 1)$$

eletrões.

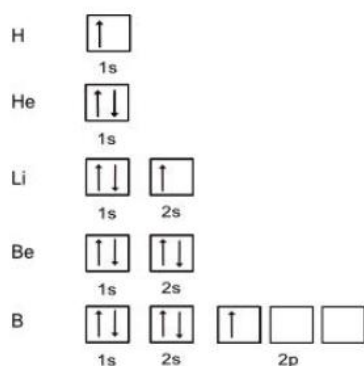
l	0	1	2	3	4
Símbolo	s	p	d	f	g
N_s	2	6	10	14	18

Para um dado n pode haver um máximo de

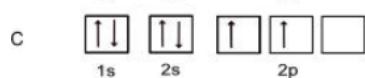
$$N_s = \sum_{l=0}^{l=n-1} 2(2l + 1) = 2n^2$$

eletrões.

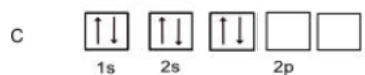
A notação de estrutura eletrónica é:



Para carbono



ou



Para resolver este problema, usamos a regra de Hund:

No estado fundamental do átomo, o spin total dos eletrões apresenta sempre o valor mais alto possível.

Finalmente, há uma ordem de preenchimento das camadas:

N. de eletrões:	2	8	8	18	18	32	32
Ordenação	$1s^2$	$2s2p$	$3s3p$	$4s3d4p$	$5s4d5p$	$6s4f5d6p$	$7s5f6p7d$

e tem esta forma por causa da ausência de degenerescência. A partir disto, podemos construir a tabela periódica dos elementos.

3.3 Espectros óticos

Um átomo é levado do seu estado fundamental a um dos seus estados excitados das suas camadas exteriores por uma quantidade pequena de energia.

No processo de de-excitação, há emissão de um fóton de baixa energia na região ótica.

3.3.1 Os átomos alcalinos

Átomos alcalinos são constituídos por três partes:

1. O núcleo
2. Um conjunto de subcamadas completamente preenchidas
3. Um eletrão de valência

Por exemplo

H	$1s^1$					
Li	$1s^2$	$2s^1$				
Na	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^1$		
K	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$4s^1$

Os espectros óticos de um átomo alcalino podem ser descritos em termos do eletrão de valência ou o “eletrão óticamente ativo” e a energia do átomo é igual à energia deste eletrão.

Considere o átomo de Na e os estados excitados 3p e 3d.

Quando o eletrão de valência está no estado 3s, sofre uma força atrativa maior do que quando está no nível 3p ou 3d – o efeito de blindagem é mais importante com estados com valores grandes de l .

Para o estado 3d, a carga efetiva líquida é

$$11e^+ - 10e^- = 1e^+$$

e então a energia do estado 3d do Na é equivalente à energia do estado 3d do H

MAS

a energia dos estados 3s / 3p do Na \neq a energia dos estados 3s / 3p do H.

Então, o estado 3p está abaixo do estado 3d porque agora a energia é dada por

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} Z_{eff}^2$$

ou em termos da constante de Rydberg,

$$E_n = -\frac{Rch}{n^2} Z_{eff}^2 = -\frac{Rch}{n^2} (Z - \sigma)^2$$

onde Z_{eff} é a carga efetiva líquida e

$$(Z_{eff})_{3s} > (Z_{eff})_{3p} > (Z_{eff})_{3d}$$

e σ é a constante de blindagem.

Agora,

um átomo está num estado excitado

- quando um ou mais dos seus eletrões, está num estado de energia mais elevado que o estado fundamental,

os eletrões fazem transições para os estados de energia mais baixa com a emissão de um fóton com frequência

$$f = \frac{(E_i - E_f)}{h}$$

Um átomo pode ser excitado para um estado de energia mais elevado mediante o bombardeamento do átomo por um feixe de eletrões.

Uma vez que os estados de energia excitados são discretos, e não contínuos, somente alguns comprimentos de onda são emitidos.

As energias de excitação dos eletrões mais externos

- os eletrões de valência

são da ordem de grandeza de alguns eletrão-volts.

As transições que envolvem estes eletrões provocam fótons com o comprimento no

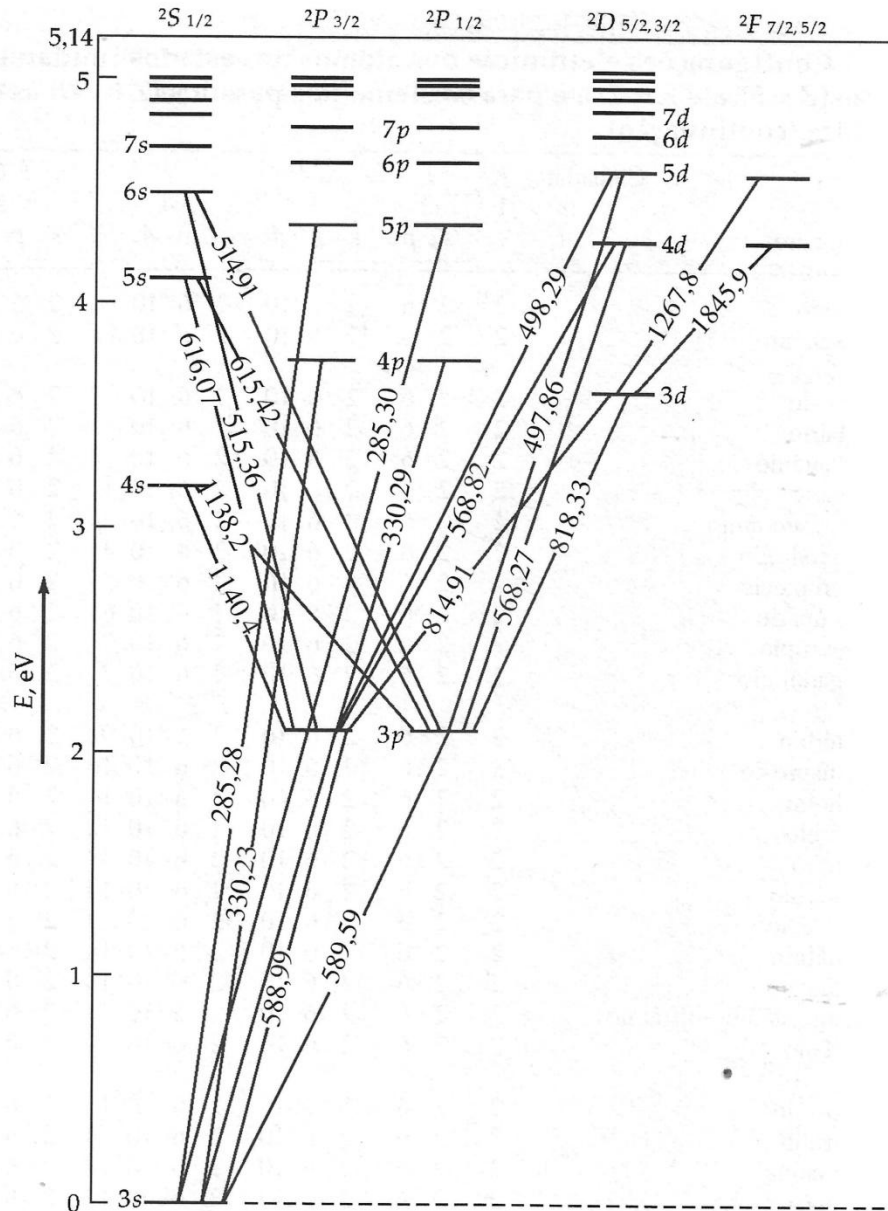
- espectro visível ou o espectro ótico (energias entre 1.8 eV e 3 eV).

O diagrama mostra os níveis de energia das transições óticas de sódio – cujos eletrões constituem um núcleo de néon mais um eletrão de valência.

De vez que o momento angular do spin do núcleo é nulo, o spin de cada estado de sódio é $\frac{1}{2}$. Em virtude do efeito spin-orbita, os estados com $j = l - 1/2$ têm energia ligeiramente inferior que os estados com $j = l + 1/2$.

Cada estado (exceto os estados S) constitui, portanto um dubleto.

Os estados são identificados, na notação espectroscópica, pelo índice superior 2.



Devido à interação spin-orbita do eletrão, há um desdobramento dos níveis excitados do eletrão de valência num duplete exceto quando $l = 0$ (singleto).

Finalmente, as regras de seleção entre os níveis são

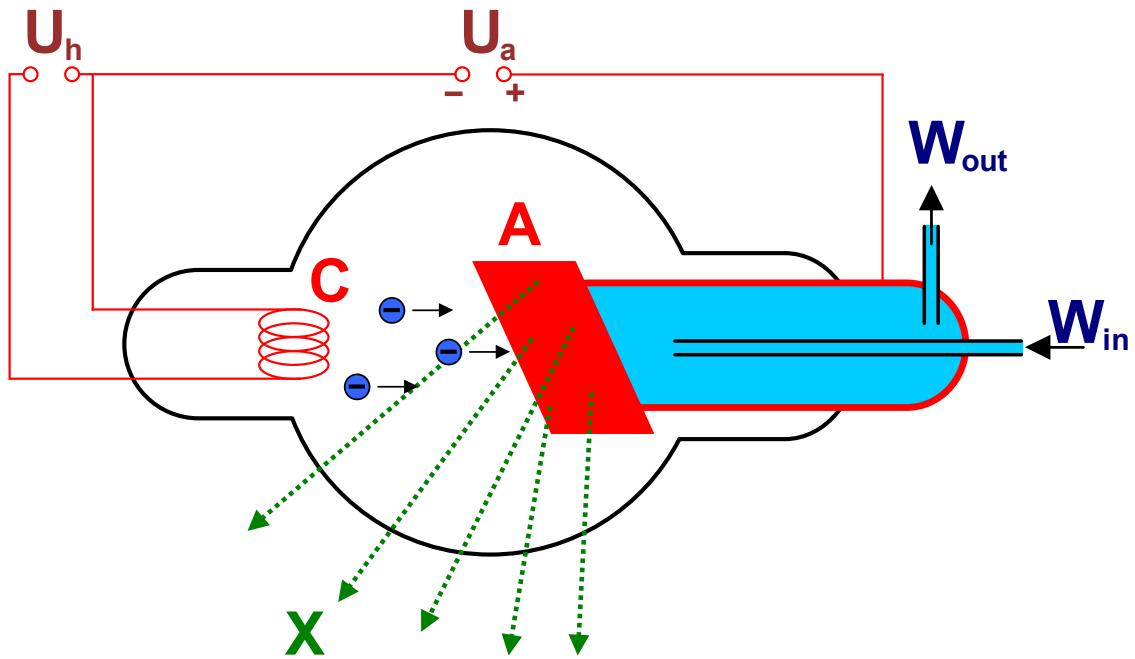
1. $\Delta l = \pm 1$
2. $\Delta j = 0, \pm 1$ mas $j_i = 0 \rightarrow j_f = 0$ é proibido
3. Não há restrições na variação de n .

3.4 Espectros de raios-X

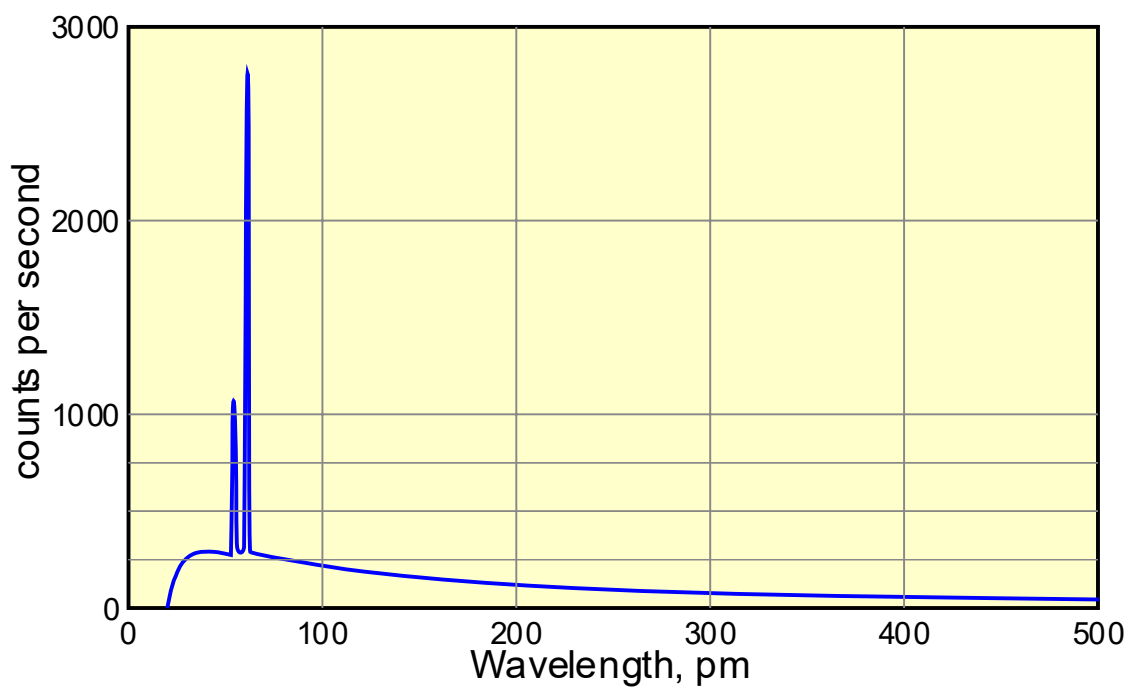
Raios-X são radiações eletromagnéticas com

$$\lambda < 1.0 \text{ \AA}$$

e foram descobertas por Roentgen em 1895

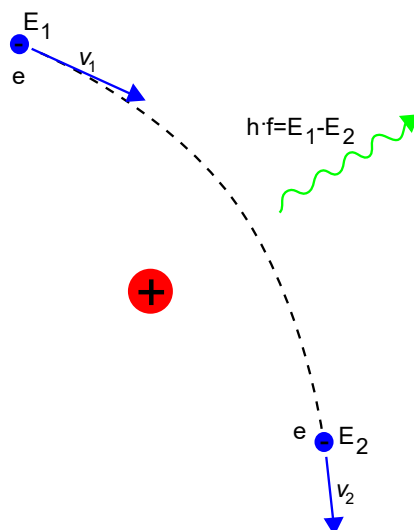


Os raios-X são produzidos quando os eletrões, emitidos do cátodo com $\sim 10^4$ eV batem no ânodo. O espectro produzido para qualquer matéria do cátodo tem uma forma contínua.



O espectro tem dois componentes

1. espectro de raios-X contínuo, devido ao processo de



O eletrão perde velocidade quando atravessa um núcleo, havendo em consequência emissão de raios-X. λ_{min} deste espectro é dado por

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = eV$$

então

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{V} \text{ m}$$

2. espectro de raios-X caraterístico:

Este espectro deve-se às transições eletrónicas entre níveis de energia internos (camadas profundas) dos átomos do material alvo. Um eletrão muito energético arranca um eletrão de uma camada interna do átomo (K ou L) deixando uma lacuna nessa camada. Um eletrão de uma camada mais externa cai para preencher essa lacuna.

O átomo está agora num estado excitado e volta ao seu estado fundamental emitindo uma série de fótons de alta frequência originando as linhas caraterísticas.

Vamos considerar um eletrão removido da subcamada 1s de um átomo no ânodo.

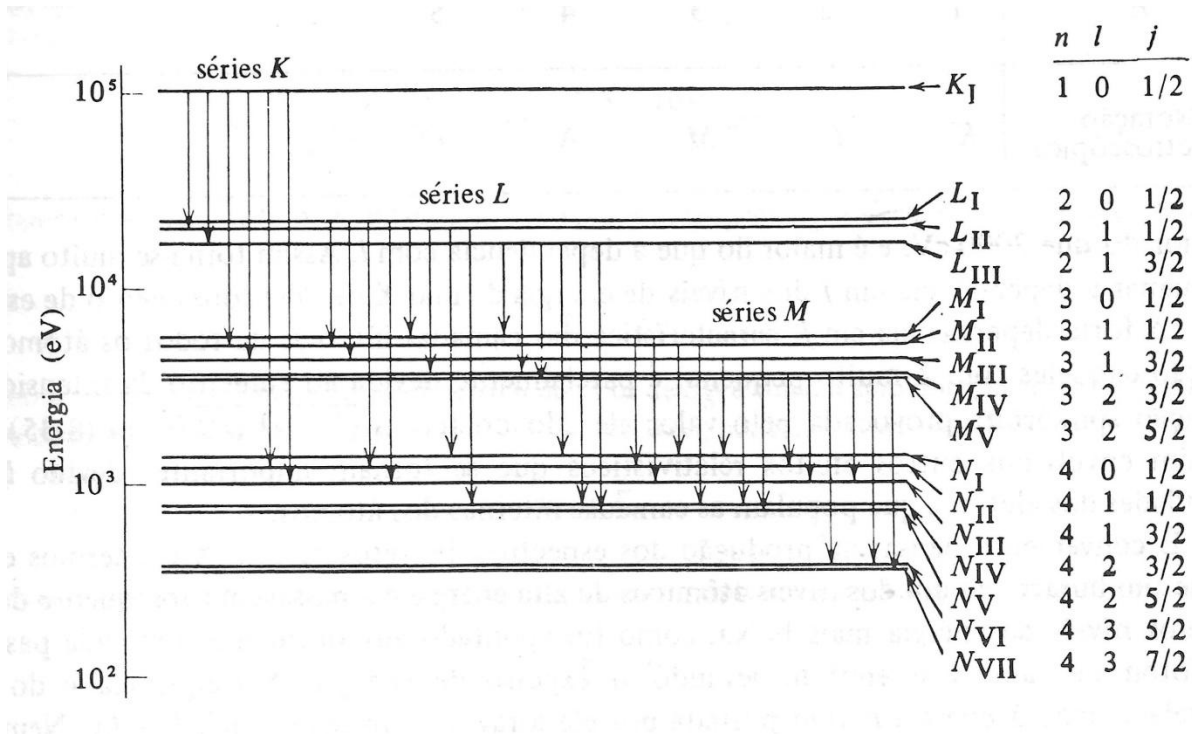
A energia deste eletrão é muito negativa, então a energia do eletrão incidente deve ser alta.

O átomo está num estado excitado e agora um eletrão de uma subcamada de energia negativa menor – por exemplo, um eletrão 2p – pode saltar para ocupar o lugar vago na camada 1s com uma emissão de um fóton.

A energia de excitação do átomo é então reduzida.

Há depois um outro processo semelhante para preencher o lugar vago na camada 2p.

Uma maneira conveniente de descrever estas transições é dizer que um **buraco** salta de uma camada para outra.



Existem as seguintes regras de seleção para a variação dos números quânticos do buraco:

$$\Delta l = \pm 1$$

e

$$\Delta j = 0, \pm 1$$

Exemplo

Determine a tensão de aceleração mínima necessária para um tubo de raio X com um ânodo de ^{26}Fe emitir uma linha K_α do espectro. Determine também o comprimento de onda de um fóton K_α . (Para $n = 1$, $\sigma = 2$, e para $n = 2$, $\sigma = 10$)

Solução

Agora

$$E_K = +13.6 \frac{Z_{eff}^2}{n^2} = 13.6 \frac{(26 - 2)^2}{1^2} = +7.8 \times 10^3 \text{ eV}$$

também

$$E_L = +13.6 \frac{Z_{eff}^2}{n^2} = 13.6 \frac{(26 - 10)^2}{2^2} = +8.7 \times 10^2 \text{ eV}$$

O fóton tem uma energia

$$hf = E_K - E_L$$

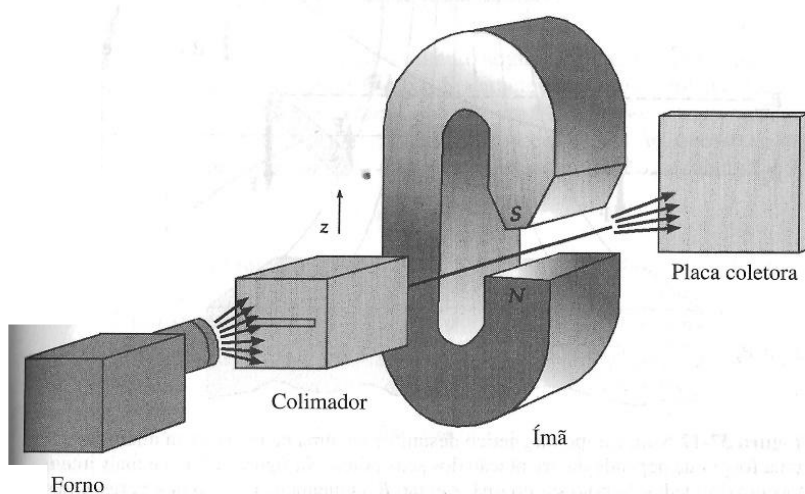
e assim,

$$\lambda = \frac{ch}{E_K - E_L} = \frac{3 \times 10^8 \cdot 6.63 \times 10^{-34}}{(7.8 \times 10^3 - 8.7 \times 10^2) \cdot 1.6 \times 10^{-19}} = 1.6 \times 10^{-10} \text{ m}$$

3.5 A experiência de Stern Gerlach:

A Experiência de Stern-Gerlach

Além de explicar a estrutura fina das raías espectrais, e também a tabela periódica dos elementos, o spin do elétron explicou interessante experiência realizada pela primeira vez por O. Stern e W. Gerlach, em 1922. Nesta experiência, átomos de um elemento aquecido num forno são colimados e passam entre os pólos de um ímã, cujo campo magnético, no entreferro, não é uniforme, mas varia ligeiramente com a coordenada z (Figura 37-10). O comportamento de um momento magnético no campo magnético desuniforme pode ser entendido pela análise do comportamento de uma pequenina barra imantada (Figura 37-11). Quando o pequeno ímã estiver num campo magnético externo uniforme \mathbf{B} , há um torque $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$ que tende a alinhar o ímã na direção do campo \mathbf{B} . Se o ímã estiver girando em torno do seu próprio eixo, o efeito do torque é o de fazer o eixo de rotação do ímã precessar em torno da direção do campo externo. Se o campo magnético não for uniforme, a força sobre um dos pólos do ímã será maior ou menor que a força sobre o outro pólo, dependendo da orientação do ímã. A Figura 37-12 ilustra o efeito de um campo magnético desuniforme sobre três



Na experiência de Stern-Gerlach, átomos de um elemento aquecido num forno são colimados e passam através de um campo magnético desuniforme, sendo detectados por uma chapa coletora.

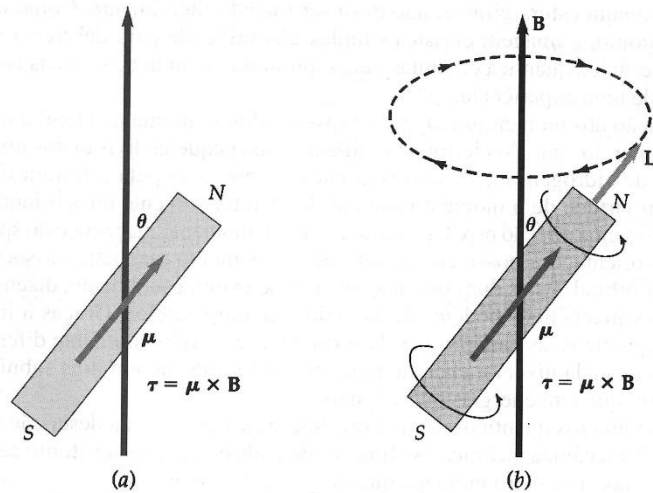


Figura 37-11 Modelagem de um momento magnético mediante uma pequena barra imantada. (a) Num campo magnético externo, o momento sofre um torque que tende a alinhar o momento e o campo. (b) Se o pequeno ímã estiver girando em torno do próprio eixo, o torque provoca a precessão do eixo do movimento de rotação do ímã (direção do spin) em torno da direção do campo magnético externo.

pequenas barras imantadas, com diferentes orientações. Além do torque, que provoca a precessão do momento magnético em torno da direção do campo, há também uma força na direção positiva ou negativa de z , dada por

$$F_z = \mu_z \frac{dB_z}{dz}$$

Esta força desvia o ímã, para cima ou para baixo, de acordo com a desuniformidade do campo magnético e da componente z do momento magnético.

Conforme a física clássica, seria de esperar um contínuo de deflexões, correspondendo ao contínuo de orientações possíveis dos momentos magnéticos. No entanto, uma vez que

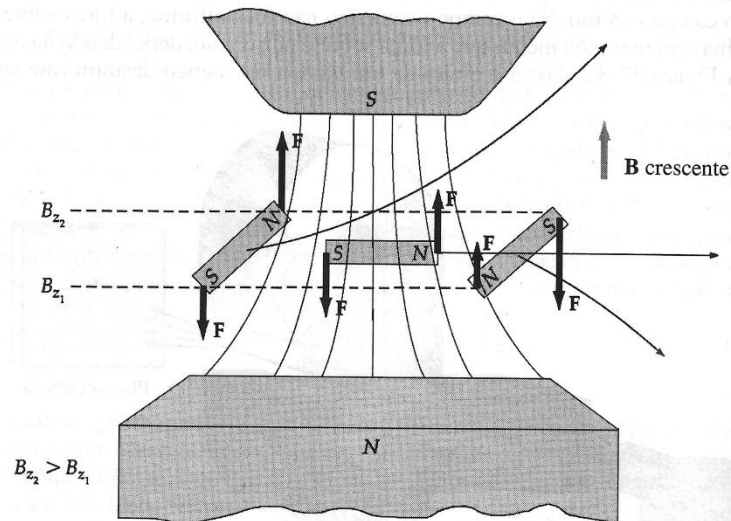
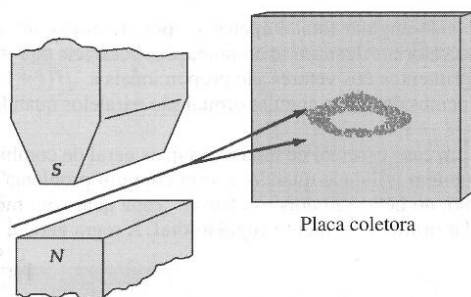


Figura 37-12 Num campo magnético desuniforme, uma pequena barra imantada sofre uma força que depende da orientação dos seus pólos. Na figura, a força é mais intensa nas proximidades do pólo sul do ímã, e então B_z aumenta na direção dos z crescentes.

momento magnético de um átomo é quantizado, a mecânica quântica prevê que a componente z do momento magnético possa ter $2j + 1$ valores, onde j é o número quântico associado ao momento angular total do átomo, que é o resultado da combinação do momento angular orbital e do momento angular do spin dos elétrons do átomo. A experiência de Stern-Gerlach mede, então, o momento angular do átomo. Se $j = 0$, correspondente ao momento angular zero do átomo, o momento magnético será zero e não haverá deflexão dos átomos. Se $j = 1$, existirão três orientações possíveis da componente z do momento magnético, e o feixe original dos átomos será dividido em três feixes. Se $j = \frac{1}{2}$, o feixe original será dividido em dois feixes, correspondentes às duas orientações possíveis do momento magnético.



Resultados da experiência de Stern-Gerlach. O feixe atômico é dividido em dois feixes, indicando que os momentos magnéticos dos átomos são quantizados em duas orientações no espaço. A forma da linha superior se deve à maior desuniformidade do campo magnético nas vizinhanças da face polar superior.

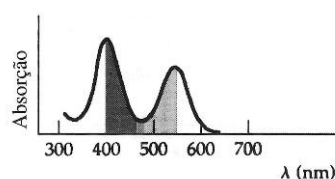
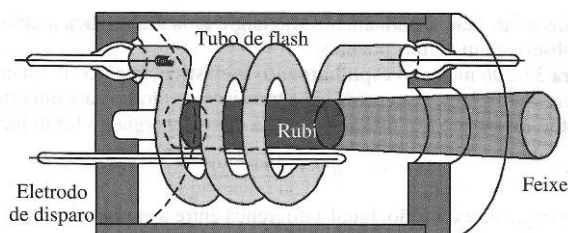
Esta experiência foi realizada por Stern e Gerlach, em 1922, com átomos de prata, e por Stapp e Taylor, em 1927, com átomos de hidrogênio. Em cada caso, o feixe foi dividido em dois outros, conforme mostra a Figura 37-13. Uma vez que o estado fundamental do hidrogênio tem $\ell = 0$, esperaríamos que não houvesse a divisão do feixe, não fosse pelo spin do elétron. O momento angular total do átomo de hidrogênio no seu estado fundamental é igual, exatamente, ao momento angular do spin do elétron. A divisão do feixe de hidrogênio em dois feixes confirma que o momento angular do spin do elétron pode ter apenas duas orientações, correspondentes ao número quântico $s = 1/2$. A quantização da orientação do momento magnético do elétron em duas direções no espaço é chamada a **quantização do espaço**.

3.6 O laser

O Laser

O laser (sigla da expressão inglesa *light amplification by stimulated emission of radiation*) é um dispositivo que produz um intenso feixe de fótons coerentes graças à emissão estimulada. Consideremos um sistema de átomos que tem a energia E_1 no estado fundamental e a energia E_2 num estado excitado. Se estes átomos forem irradiados por fótons com a energia $E_2 - E_1$, os átomos que estiverem no estado fundamental podem absorver um fóton, e fazer uma transição para o estado E_2 , enquanto os átomos que já estiverem no estado excitado podem ser estimulados a decair para o estado fundamental. As probabilidades relativas da absorção e da emissão estimulada foram calculadas pela primeira vez por Einstein, que mostrou serem as duas iguais. Ordinariamente, em temperaturas normais, quase todos os átomos estão no estado fundamental, de modo que a absorção será o efeito principal. A fim de as tran-

Diagrama esquemático do primeiro laser a rubi.

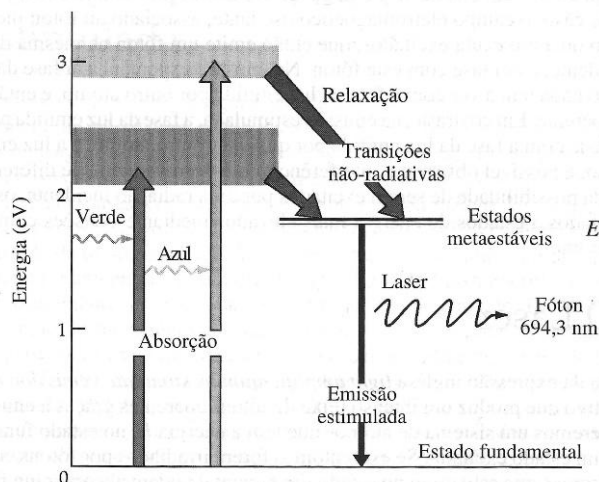


Absorção contra comprimento de onda do íon Cr^{3+} no rubi. O rubi aparece vermelho em virtude da forte absorção, pelos íons cromo, da luz verde e da luz azul.

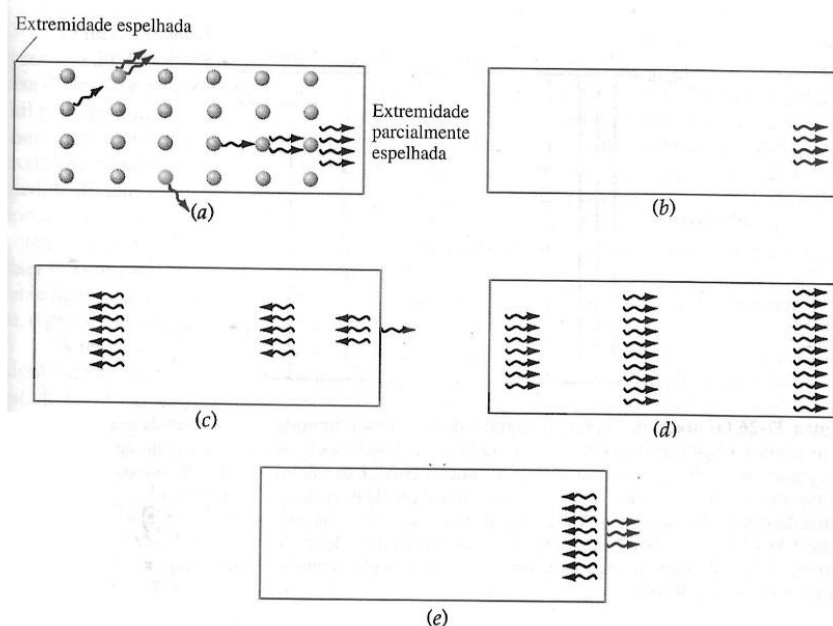
sições da emissão estimulada serem mais numerosas que as transições de absorção, devemos ter maior número de átomos no estado excitado do que no estado fundamental. Essa condição é conhecida como a **inversão de população**. Pode ser conseguida se o estado excitado for um estado metaestável. A inversão de população é conseguida, muitas vezes, por um método conhecido como o **bombeamento óptico**. Neste método, os átomos são “bombeados” para níveis de energia mais elevados que E_2 pela absorção de uma intensa radiação auxiliar. Os átomos então decaem para o estado E_2 seja por emissão espontânea, seja por transições não-radiativas, como as que ocorrem nas colisões.

A Figura 37-21 mostra o diagrama esquemático do primeiro laser operativo, um laser de rubi, construído por Theodore Maiman, em 1960. O laser é constituído por um pequeno cilindro de rubi (com alguns centímetros de comprimento) em torno da qual se enrola um tubo de flash helicoidal, contendo gás rarefeito. As extremidades do cilindro de rubi são planas e perpendiculares ao eixo do cilindro. O rubi é um cristal transparente de Al_2O_3 , com pequena fração (cerca de 0,05%) de cromo. O cristal é vermelho pois os íons cromo (Cr^{3+}) têm intensas bandas de absorção nas regiões do verde e do azul do espectro visível, como mostra a Figura 37-22. Os níveis de energia do cromo são importantes para a operação do laser de rubi, e aparecem na Figura 37-23.

Quando o tubo de flash dispara, há uma intensa emissão de luz, que dura alguns milissegundos. A absorção excita muitos íons cromo até as bandas de níveis de energia que aparecem na Figura 37-23. Os íons cromo perdem parte da energia por um processo de relaxação, com transições não-radiativas, cedendo parte da energia para o cristal e caindo para um par de estados metaestáveis identificados por E_2 na figura. Estes estados metaestáveis estão cerca de 1,79 eV acima do estado fundamental. Se a radiação for suficientemente intensa, o número de átomos que fazem a transição para os estados E_2 será maior que o número de átomos que ficam no



Í Níveis de energia num laser de rubi. A fim de fazer a população dos estados metaestáveis mais numerosa que a do estado fundamental, o cristal de rubi é sujeito a uma radiação intensa (nos comprimentos de onda do verde e do azul). Desta forma, os átomos são excitados do estado fundamental para as bandas de níveis de energia que aparecem na figura, e decaem destes níveis para os estados metaestáveis, através de transições não-radiativas.

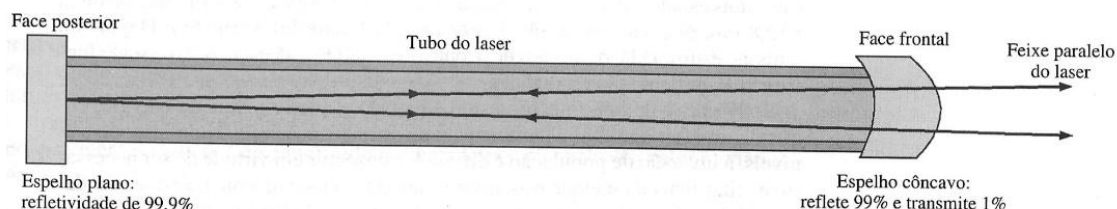


Acumulação do feixe de fótons num laser. Em (a) parte dos átomos emite fótons espontaneamente, alguns dos quais deslocam-se para a direita e estimulam a emissão de fótons por outros átomos, paralelamente ao eixo do cristal. Em (b) quatro fótons atingem a face da direita do cristal, parcialmente espelhada. Em (c), um fóton foi transmitido e os outros refletidos. Quando estes fótons atravessam o cristal do laser, estimulam a emissão de mais fótons e o feixe se acumula. Quando o feixe atinge outra vez a face da direita, em (d), está constituído por muitos fótons. Em (e), parte destes fótons é transmitida e a parte restante é refletida.

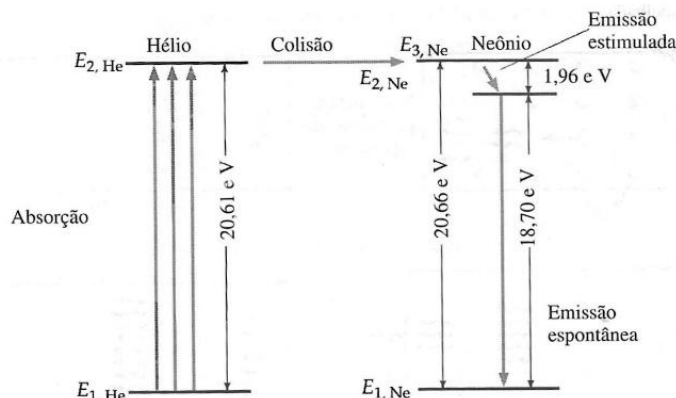
estado fundamental. Desta maneira, as populações do estado fundamental e dos estados metaestáveis ficam invertidas. Quando um destes átomos nos estados E_2 decai para o estado fundamental, por emissão espontânea, emite fótons com a energia de 1,79 eV e comprimento de onda 694,3 nm. Parte destes fótons estimula a emissão de outros fótons por outros átomos excitados, e os fótons emitidos têm a mesma energia e o mesmo comprimento de onda.

No laser de rubi, as duas extremidades do cristal são espelhadas: uma delas é quase totalmente refletora (cerca de 99,9%) e a outra é apenas parcialmente refletora (cerca de 99%), de modo que parte do feixe é transmitida. Se as extremidades do rubi forem paralelas, instalam-se ondas estacionárias, e um intenso feixe de luz coerente emerge pela extremidade parcialmente espelhada. A Figura 37-24 ilustra a acumulação do feixe no interior do laser. Quando os fótons, que se movem paralelamente ao eixo do cristal, atingem a extremidade espelhada, todos são refletidos pela face posterior, e a maior parte é refletida pela face frontal, com apenas uns poucos escapando pela superfície semi-espelhada. Durante cada passagem através do cristal, os fótons estimulam mais e mais átomos a emitirem, de modo que o feixe de fótons se acumula e há emissão de um intenso feixe de luz.

Os lasers de rubi, modernos, geram intensos feixes luminosos, com energias que vão de 50 J a 100 J, durando alguns poucos milissegundos. O feixe pode ter um diâmetro tão



Esquema de um laser de hélio-neônio. O espelho côncavo em lugar de um espelho plano, faz com que seja menos crítico do que o laser de rubi, o alinhamento dos espelhos. O espelho côncavo da direita serve também como lente que colima a luz do feixe.



Os níveis de energia do hélio e do neônio são importantes no laser de hélio-neônio. Os átomos de hélio são excitados pela descarga elétrica até um estado de energia que está 20,61 eV acima do estado fundamental. Estes átomos colidem com os átomos do neônio, e excitam alguns deles a um estado de energia que está 20,66 eV acima do estado fundamental. A inversão de população se consegue entre este nível e o que está 1,96 eV abaixo dele. A emissão espontânea dos fótons de energia 1,96 eV estimula outros átomos, no estado de energia mais elevado, a também emitir fótons com a energia de 1,96 eV.

pequeno quanto 1 mm e divergência angular tão pequena quanto 0,25 milirradianos, até cerca de 7 milirradianos.

Em 1961 foi anunciada, por Ali Javan, W.R. Bennet, Jr., e D.R. Herriott, a primeira operação bem-sucedida de um laser contínuo, de hélio-neônio. A Figura 37-25 mostra o esquema do laser de hélio-neônio comumente utilizado em demonstrações de laboratório. É constituído por um gás que tem 15% de hélio e 85% de neônio. Numa das faces terminais do tubo de gás está montado um espelho plano, totalmente refletor; na outra face está montado um espelho côncavo, parcialmente refletor. O espelho côncavo focaliza a luz paralela no espelho plano e também atua como uma lente que transmite parte da luz, de modo que ela emerge num feixe colimado.

No laser de hélio-neônio, a inversão de população ocorre de forma um tanto diferente da que ocorre no laser de rubi. A Figura 37-26 mostra os níveis de energia do hélio e os do neônio que são importantes na operação do laser. (Os diagramas completos dos níveis de energia são consideravelmente mais complicados.) O hélio tem um estado excitado $E_{2,He}$, que está 20,61 eV acima do estado fundamental. Os átomos de hélio são excitados até este estado $E_{2,He}$ por uma descarga elétrica. O neônio tem um estado excitado $E_{3,Ne}$ que está 20,66 eV acima do seu estado fundamental. Este estado está apenas 0,05 eV acima do primeiro estado excitado do hélio. Os átomos de neônio são excitados até o estado $E_{3,Ne}$ pelas colisões com os átomos de hélio excitados. A energia cinética dos átomos de hélio proporciona a energia extra de 0,05 eV necessária para excitar os átomos de neônio. Há um outro estado excitado do neônio, $E_{2,Ne}$, que está 18,70 eV acima do estado fundamental e 1,96 eV abaixo do estado $E_{3,Ne}$. Uma vez que o estado $E_{2,Ne}$ está normalmente desocupado, a inversão de população entre os estados $E_{3,Ne}$ e $E_{2,Ne}$ se obtém imediatamente. A emissão estimulada que ocorre entre estes dois estados leva a fótons com a energia de 1,96 eV e comprimento de onda 632,8 nm, que são responsáveis por uma brilhante luz vermelha. Depois da emissão estimulada, os átomos de neônio no estado $E_{2,Ne}$ decaem para o estado fundamental, por emissão espontânea.

No laser de hélio-neônio estão envolvidos quatro níveis de energia, enquanto no laser de rubi há participação de apenas três níveis. Num laser de três níveis, a inversão de população é difícil de conseguir em virtude de ser necessário excitar mais da metade dos átomos que estava inicialmente no estado fundamental. Num laser de quatro níveis, a inversão de população é fácil de atingir, pois o estado, depois da emissão estimulada, não é o estado fundamental mas um estado excitado que, normalmente, não está ocupado.

O feixe de um laser é coerente, muito estreito e intenso. A sua coerência faz com que o laser seja útil na produção de hologramas, que foram discutidos na Seção 33.11. A direção precisa do feixe, e a sua pequena abertura angular, faz com que o feixe seja instrumento cirúrgico útil para destruir células cancerosas ou para tratar do descolamento da retina. Os agrimensores usam lasers para conseguir alinhamento perfeito sobre grandes distâncias. Podem-se medir, com exatidão, grandes distâncias mediante a reflexão de um pulso de laser por um espelho e pela medida do tempo de ida e de volta do pulso. A distância entre a terra e a lua foi medida com aproximação de alguns centímetros graças à reflexão num espelho colocado na lua com este objetivo. Feixes de laser também se usam na pesquisa da fusão nuclear. Um intenso pulso de laser é focalizado sobre pequenas pastilhas de deutério-trício, numa câmara de combustão. O feixe aquece as pastilhas a temperaturas da ordem de 10^8K , num intervalo de tempo muito curto, e provoca a fusão do deutério com o trício, com libertação de energia.

A tecnologia dos lasers avança com tanta rapidez que só é possível mencionar apenas alguns desenvolvimentos recentes. Além do laser de rubi, existem muitos outros lasers de estado sólido, que têm comprimentos de onda na saída que vão de 170 nm até 3900 nm. Já se construíram lasers que geram mais de 1 kW de potência contínua. Lasers pulsados podem gerar pulsos de nanossegundos com potência maior que 10^9W . Diversos lasers de gás podem produzir feixes com os comprimentos de onda indo do infravermelho remoto até o ultravioleta. Os lasers de semicondutores (também conhecidos como lasers de diodo ou lasers de junção), com o tamanho de uma cabeça de alfinete, podem desenvolver 200 mW de potência. Os lasers líquidos, com corantes químicos, podem ser afinados sobre uma faixa de comprimentos de onda (cerca de 70 nm para os lasers contínuos e mais de 170 nm para os lasers pulsados). Um tipo de laser relativamente recente, o laser de elétron livre, extrai energia luminosa de um feixe de elétrons livres que se movem através de um campo magnético variável. O laser de elétron livre tem a possibilidade de gerar potência muito elevada com alta eficiência e pode ser afinado sobre uma ampla faixa de comprimentos de onda. Parece não haver limites à variedade e aos usos dos lasers modernos.

Problemas

1. Suponha que poderia formar átomos cujos eletrões apresentavam número quântico principal até $n = 8$
 - (a) Quantos elementos poderia formar?
 - (b) Porque não há elementos estáveis apresentando $Z > 92$?
2. Considere um átomo de lítio, Li.
 - (a) Qual é a sua configuração eletrónica?
 - (b) Assumindo que o átomo de Li é semelhante ao átomo de hidrogénio, calcule a energia de ionização do eletrão de valência 2s. Compare este valor com o valor experimental de 5.39 eV.
 - (c) Quais são os valores da constante de blindagem e da carga positiva efetiva?
3. A energia de ionização de um átomo de sódio é 5.13 eV. Calcule
 - (a) a carga positiva efetiva.
 - (b) a constante de blindagem para o eletrão de valência do sódio no estado fundamental.
4. Considere os raios X caraterísticos.
 - (a) Usando a Teoria de Bohr e usando um fator de blindagem $\sigma = 1$, deduza uma expressão para a frequência da linha K_α .
 - (b) Agora, considere a emissão da linha K_α da prata, Ag ($Z = 47$), calcule a razão entre a energia do átomo de prata e a energia do fóton emitido.

4. Moléculas

Normalmente, os átomos combinam-se para formar moléculas. Contudo, neste processo, os núcleos dos átomos nunca se aproximam muito uns dos outros – por isso, ignoram interações intermoleculares.

4.1 Ligações moleculares

Há cinco tipos de ligações:

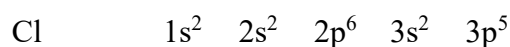
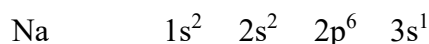
- Ligações iónica
- Ligações covalente
- Ligações Van de Waals
- Ligações metálicas
- Ligações de hidrogénio

Em muitos casos, a ligação é uma mistura destes tipos.

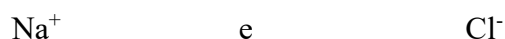
4.1.1 Ligações iónicas

Exemplos de ligações iónicas encontram-se no cloreto de sódio e outros sais.

Considere os dois átomos de Na e Cl:



Forma-se uma molécula de NaCl quando um eletrão se desloca do átomo de sódio para o átomo de cloro com a formação de



os quais se atraem um ao outro por forças eletrostáticas, formando uma molécula estável de

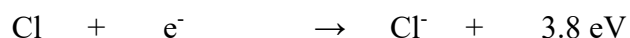


Agora, para remover o eletrão exterior 3s do átomo de sódio é necessária energia de ionização:



mas

o átomo de cloro tem uma alta **afinidade eletrónica** (o ião de camadas fechadas é mais estável do que o átomo neutro):



A remoção de um eletrão do sódio deixa um ião positivo que tem uma configuração eletrónica com camadas completas.

A aquisição de um eletrão por um átomo de cloro forma um ião negativo que tem uma configuração eletrónica com camadas completas.

Assim, a formação de um ião Na^+ e de um ião de Cl^- necessita

$$5.1 \text{ eV} - 3.8 \text{ eV} = 1.3 \text{ eV}$$

numa separação **infinita**.

De onde vem a energia para formar uma molécula de NaCl?

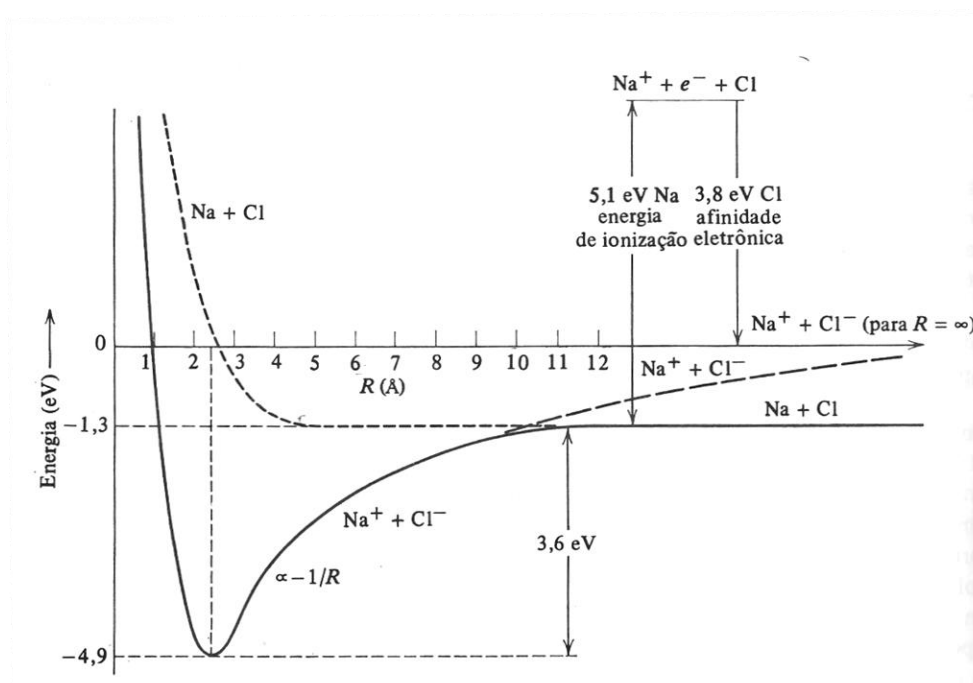
Exemplo

Qual é a energia potencial entre os iões a uma distância de 1.1 nm?

Solução

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{9 \times 10^9 (1.6 \times 10^{-19})^2}{1.1 \times 10^{-9}} \times \frac{1}{1.6 \times 10^{-19}} = -1.3 \text{ eV}$$

Então, nas separações menores que 1.1 nm, é energeticamente favorável para o átomo de sódio doar um eletrão ao cloro a fim de formar o NaCl.



Quando a separação dos iões for muito pequena, a distribuição de carga elétrica dos iões começa a superpor-se.

Há dois efeitos, ambos no sentido de aumentar a energia potencial:

1. os núcleos tornam-se menos blindados do que antes e começam a repelir-se mutuamente e
2. para pequenas separações teremos na verdade um único sistema para o qual se aplica o princípio de exclusão e alguns eletrões passarão para estados de maior energia de modo a não violar este princípio.

A curva de energia potencial traduz, portanto, a existência de uma força repulsiva para pequenas distâncias.

Então

Há uma distância internuclear para a qual essa energia é mínima: -4.9 eV e a separação internuclear de equilíbrio vale 0.24 nm.

Exemplo

Calcule aproximadamente a profundidade do mínimo da figura supondo que à distância internuclear de equilíbrio 0.24 nm para o NaCl, os iões de Na^+ e Cl^- têm distribuições de carga esfericamente simétricas que não se superpõem.

Solução

Usando

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

temos

$$V = -\frac{9 \times 10^9 (1.6 \times 10^{-19})^2}{2.4 \times 10^{-10}} \times \frac{1}{1.6 \times 10^{-19}} = -6.0 \text{ eV}$$

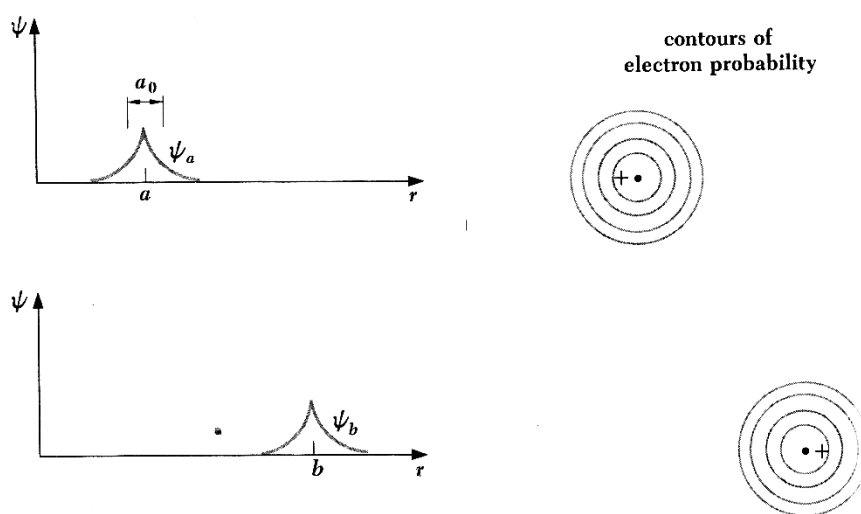
Extrapolando ligeiramente o comportamento em $1/R$ da figura até 0.24 nm, podemos ver que o resultado do cálculo é consistente com as hipóteses assumidas.

4.1.2 Ligações covalentes

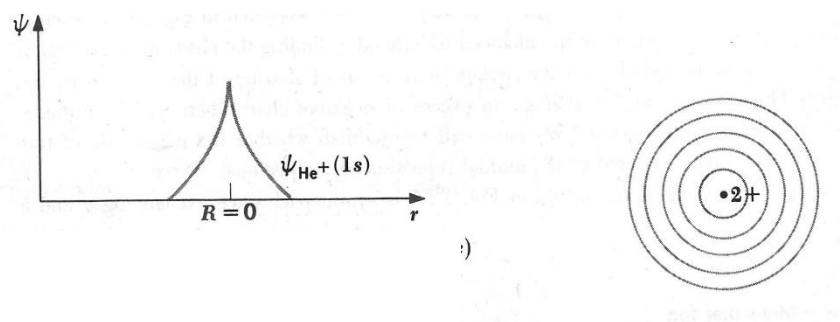
Este tipo de ligação é responsável pela ligação de átomos idênticos ou semelhantes para formar moléculas como as do H_2 , N_2 , e CO .

Vamos considerar o ião de H_2^+ e determinar a função de onda ψ do átomo.

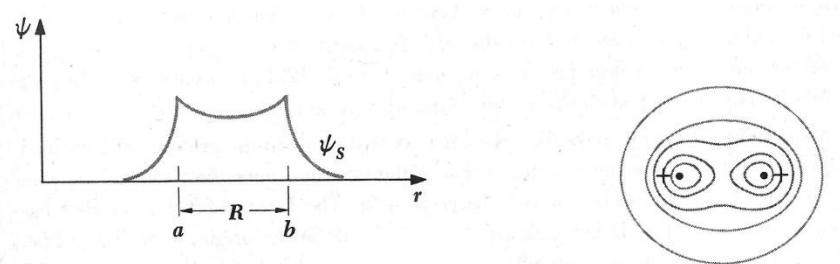
Considere as duas funções de onda ψ_a e ψ_b de dois protões bastante afastados um do outro (a separação dos protões, $R > a_0$ - o raio de Bohr do átomo de hidrogénio). ψ_a e ψ_b assemelham-se a função de onda 1s do átomo de hidrogénio.



Quando $R = 0$, temos um ião de He^+



Quando $R \approx a_0$, temos



Podemos ver que a densidade de carga eletrónica é grande entre os protões.

Esta densidade de carga negativa mantém os protões ligados na molécula de hidrogénio, H_2^+ .

A combinação de ψ_a e ψ_b é

simétrica

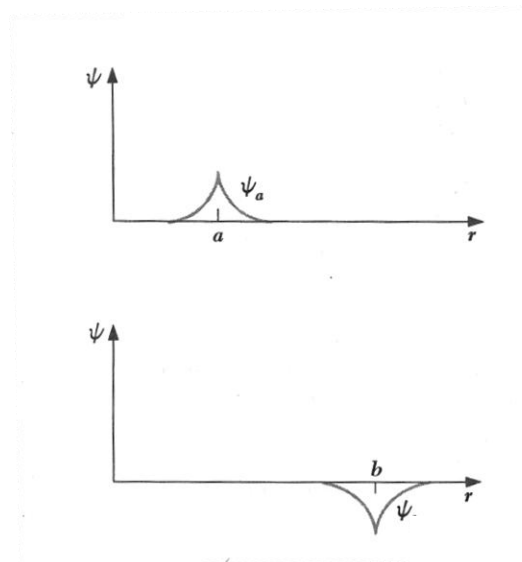
pois a troca de a e b não afeta ψ .

Contudo,

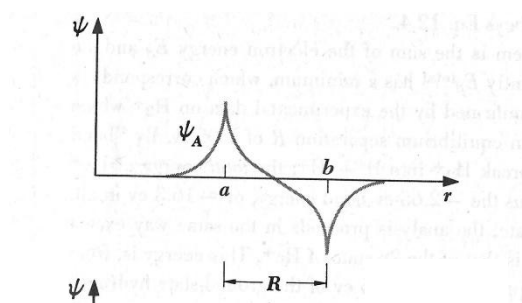
é igualmente possível ter uma combinação

antissimétrica

de ψ_a e ψ_b :



Aqui há um nó entre a e b onde $\psi = 0$:



Há uma probabilidade menor de encontrar o eletrão entre os protões.

Agora existe, em média, uma deficiência de carga negativa entre os prótons e, consequentemente, uma força repulsiva - e

nenhuma ligação pode ocorrer.

Vamos agora determinar a variação da energia total do sistema H_2^+ com R e com a combinação de ψ_a e ψ_b **simétrica**:

Com R grande a energia do eletrão deve ser -13.6 eV do átomo de hidrogénio, enquanto a energia potencial do próton é

$$V_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \rightarrow 0$$

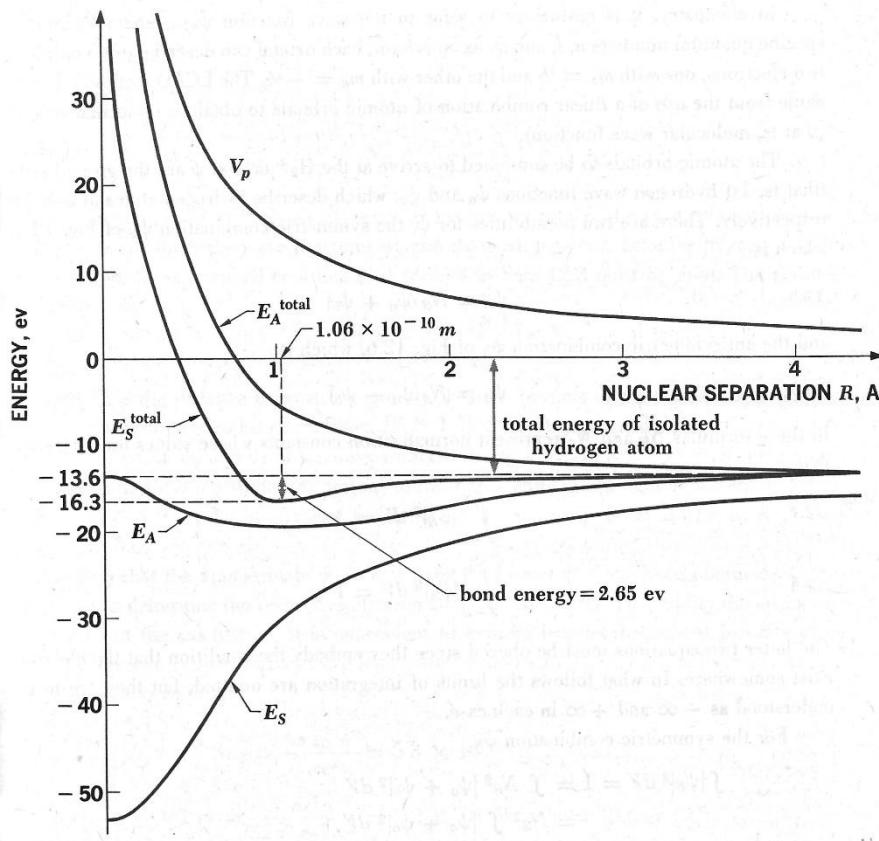
como $R \rightarrow \infty$.

Com R pequeno, a energia do eletrão deve ser $-2^2 13.6$ eV = -54.4 eV átomo de hidrogénio, enquanto a energia potencial do próton é

$$V_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \rightarrow \infty$$

e

$$V_p \rightarrow \infty$$



Agora

$$E_s^{Tot} = E_s + V_p$$

e tem um mínimo (experimental) que corresponde a um estado molecular estável com energia de ligação 2.65 eV e uma separação de 0.106 nm.

Vamos agora considerar a molécula de hidrogénio H_2 . A molécula contém dois eletrões e estes podem ter a mesma função de onda ψ se os seus spins estão antiparalelos.

Basicamente temos a mesma situação, mas aqui há uma repulsão entre os dois eletrões que enfraquece a ligação. A energia de ligação é agora

$$4.5 \text{ eV}$$

em vez de

$$2 \times 2.65 = 5.3 \text{ eV}$$

e a separação é 0.7 Å. Assim H_2 é mais compacto e mais fortemente ligado do que H_2^+ .

4.2 Espectros moleculares

Os espectros moleculares são conjuntos únicos de comprimentos de onda ou frequências de luz absorvidas ou emitidas pelas moléculas durante a transição entre diferentes níveis de energia.

Esses espectros são criados por vários tipos de transições dentro da molécula, como:

- Transições Eletrônicas:

Envolvem mudanças nos níveis de energia dos elétrons dentro da molécula. Quando uma molécula absorve energia, os elétrons podem passar de um nível de energia mais baixo (estado fundamental) para um nível de energia mais alto (estado excitado).

Os comprimentos de onda associados a essas transições eletrônicas estão geralmente nas regiões

ultravioleta (UV) e de
luz visível.

- Transições Vibracionais:

As moléculas são compostas de átomos com ligações, que podem esticar, dobrar e torcer de maneiras características. Cada movimento vibracional corresponde a um nível de energia diferente. Quando as moléculas absorvem quantidades específicas de energia, elas podem fazer a transição entre níveis vibracionais.

Os espectros vibracionais são geralmente observados na região do

infravermelho (IR).

- Transições Rotacionais:

As moléculas também podem girar, e cada modo rotacional corresponde a um nível de energia distinto. Quando as moléculas absorvem ou emitem energia nas

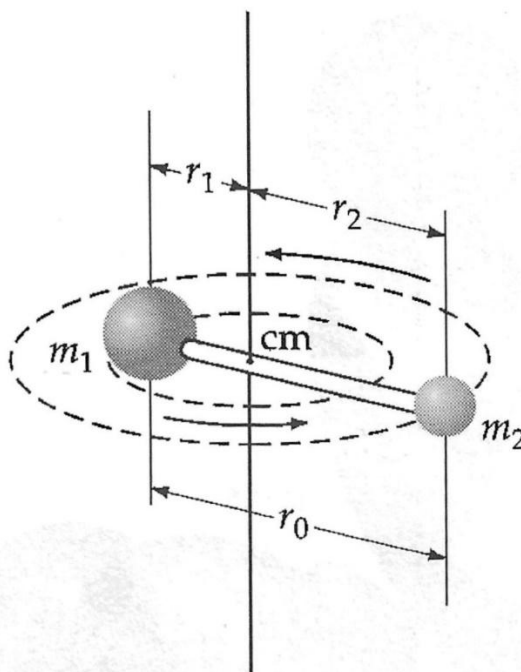
micro-ondas ou na região do
infravermelho distante,

elas podem alterar os seus níveis de energia rotacional. Isso resulta em espectros rotacionais, que são particularmente detalhados para pequenas moléculas na fase gasosa.

Cada uma dessas transições resulta numa “assinatura” distinta para uma molécula, para que os cientistas possam usar espectros moleculares para identificar moléculas, estudar a estrutura molecular e compreender a dinâmica molecular. Técnicas espectroscópicas como espectroscopia UV-Vis, espectroscopia IR e espectroscopia de micro-ondas concentram-se cada uma num desses tipos de espectro molecular.

4.2.1 Níveis de energia rotacionais

Considere a molécula diatómica:



Agora

$$m_1 r_1 = m_2 r_2$$

e

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

e então

$$I = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right) (r_1 + r_2)^2 = \mu r_0^2$$

onde μ é a massa reduzida.

A energia de rotação é

$$E = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} \frac{L^2}{I}$$

onde I é o momento de inércia e ω é a frequência angular de rotação.

A solução da equação de Schrödinger para a rotação leva à quantização do momento angular,

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2$$

onde $l = 0, 1, 2, \dots$, o número quântico rotacional.

E assim

$$E = \frac{1}{2} \frac{l(l+1)\hbar^2}{I} = l(l+1)E_{0r}$$

onde E_{0r} é uma energia rotacional característica de cada molécula.

A medida da energia rotacional de uma molécula, a partir do seu espectro rotacional, pode ser usada para determinar

o momento de inércia da molécula

↓

calcular a separação dos átomos na molécula.

O espectro rotacional é o resultado de transições entre estados de energia rotacionais.

Considere o espectro de absorção/emissão de uma molécula diatómica

$$hf = E_f - E_i = [l_f(l_f + 1) - l_i(l_i + 1)] \frac{\hbar^2}{2I}$$

A regra de seleção é

$$\Delta l = \pm 1$$

onde

+1 corresponde à absorção

-1 corresponde à emissão

Então para absorção, se $l_i = l$ e $l_f = l + 1$ e

$$hf = (l + 1) \frac{\hbar^2}{2I}$$

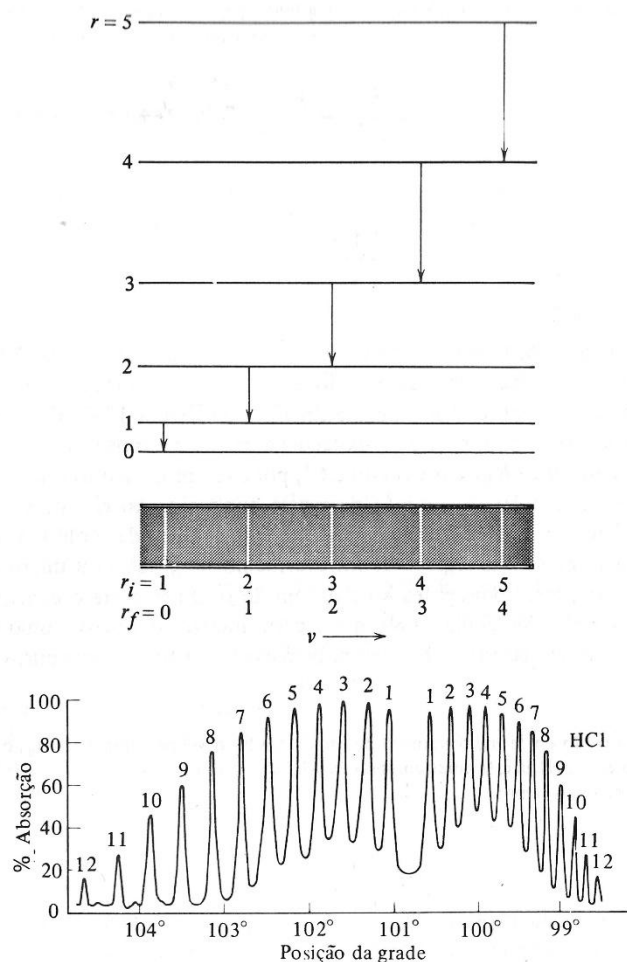
ou

$$f = (l + 1) \frac{\hbar}{2\pi I}$$

onde $l = 0, 1, 2, \dots$

Então, as frequências possíveis são

$$f = \frac{\hbar}{2\pi I}, 2 \frac{\hbar}{2\pi I}, 3 \frac{\hbar}{2\pi I}$$



Exemplo

Determine a energia rotacional caraterística da molécula de O_2 , admitindo seja 0.1 nm a separação dos átomos.

Solução

A energia rotacional caraterística é dada por

$$E_{0r} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{I} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\mu r_0^2} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{(m/2)r_0^2}$$

Com $m = 2.66 \times 10^{-26}$ kg e $r_0 = 10^{-10}$ m

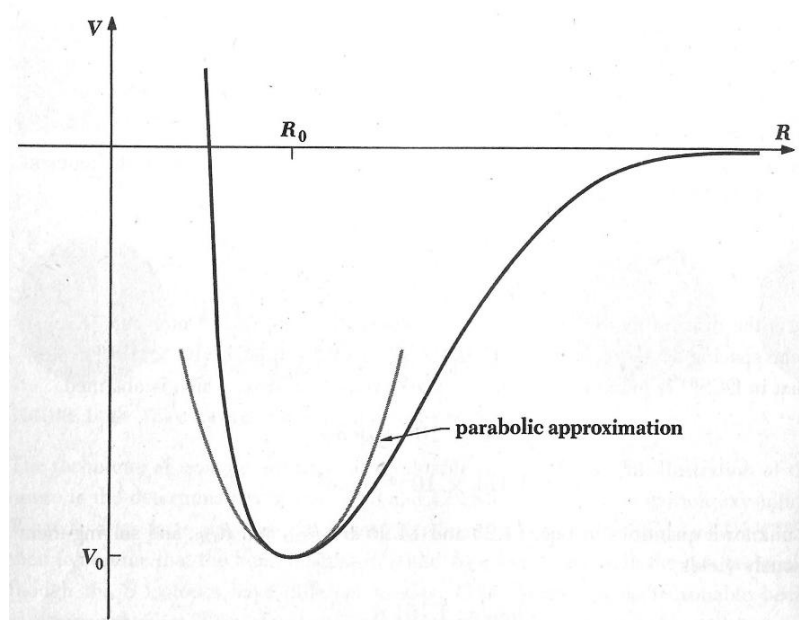
$$E_{0r} = 4.14 \times 10^{-23} \text{ J} = 2.59 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

- os níveis de energias rotacionais são várias ordens de grandeza menores que os níveis de energia de excitação eletrónica.

4.2.2 Níveis de energia rotacionais

Quando suficientemente excitada, uma molécula pode vibrar e também girar.

Para uma molécula diatômica, a energia potencial da molécula varia com a distância interatômica r_0 . Na vizinhança do mínimo desta curva, a forma da curva é quase uma parábola:



Nesta região

$$V(r) = V_0 + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$$

onde k é uma constante. A força interatômica é dada por

$$F = -\frac{dV}{dr} = -k(r - r_0)$$

Esta força resulta em oscilações harmônicas simples com a frequência

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

onde μ é a massa reduzida.

Agora, a energia de um oscilador será quantizada e os níveis de energia vibracional de uma molécula diatômica é dada por

$$E = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0$$

onde ν é o número quântico vibracional.

O espectro vibracional é o resultado de transições entre estados de energia vibracionais. Considere o espectro de absorção de uma molécula diatómica

$$hf = E_f - E_i = \left[\left(\nu_f + \frac{1}{2} \right) - \left(\nu_i + \frac{1}{2} \right) \right] \hbar \omega_0$$

A regra de seleção é

$$\Delta \nu = \pm 1$$

onde

+1 corresponde à absorção

-1 corresponde à emissão

Então para absorção

$$f = \hbar \omega_0$$

Exemplo

Determine a frequência de vibração da molécula de CO e o espaçamento entre os níveis de energia vibracionais, onde $K = 1.86 \times 10^3$ N/m e $\mu = 1.14 \times 10^{-26}$ kg

Solução

$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{\mu}} = \frac{1}{2 \times 3.14} \sqrt{\frac{1.86 \times 10^3}{1.14 \times 10^{-26}}} = 6.42 \times 10^{13} \text{ Hz}$$

e

$$\Delta E = E_{\nu+1} - E_{\nu} = hf_0 = 6.62 \times 10^{-34} \times 6.42 \times 10^{13} = 4.24 \times 10^{-20} \text{ J} = 0.26 \text{ eV}$$

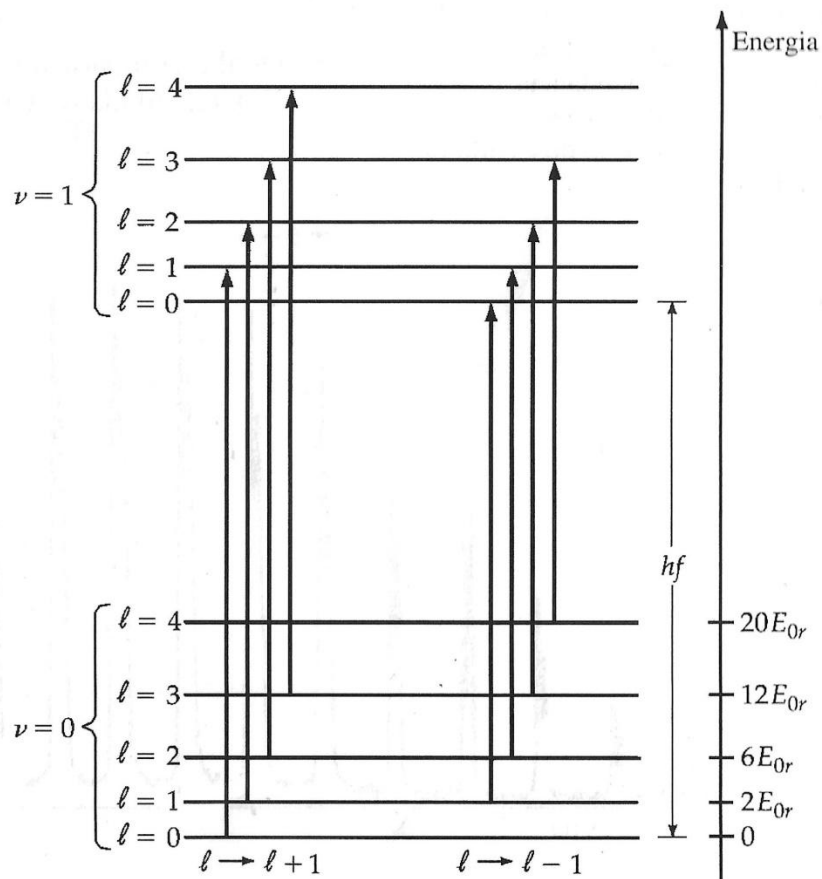
- cerca de 1000 vezes maior que uma energia rotacional típica da molécula de O₂

.

Finalmente, a energia molecular total é:

$$E_{vr} = E_v + E_r = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 + (l + 1) \frac{\hbar^2}{2I}$$

Assim temos uma estrutura fina:



As transições entre estes níveis conduzem a um espectro de vibração-rotacional

$$hf = (E_{vr})_f - (E_{vr})_i = \left[\left(v_f + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 + l_f(l_f + 1) \frac{\hbar^2}{2I} - \left(v_i + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 - l_i(l_i + 1) \frac{\hbar^2}{2I} \right]$$

Com

$$\Delta l = \pm 1 \text{ e } \Delta v = \pm 1$$

obtemos

$$f = f_0 + (l + 1) \frac{\hbar^2}{2\pi I}$$

Problemas

1. Calcule a separação entre os iões Na^+ e Cl^- quando a energia potencial for -1.53 eV .
2. Exprime-se a energia de dissociação, em muitos casos, em quilocalorias por mol.
 - (a) Determine a relação entre o eletrão volt por molécula e a quilocaloria por mol.
 - (b) Determine a energia de dissociação do NaCl molecular em quilocalorias por mol.
3. A distância de equilíbrio dos iões K^+ e Cl^- no KCl , é cerca de 0.267 nm .
 - (a) Calcule a energia potencial de atração dos iões, admitindo que os dois iões sejam, a esta distância, duas cargas elétricas puntiformes.
 - (b) A energia de ionização do potássio é 4.34 eV e a afinidade ao eletrão, do cloro, é 3.82 eV . Determine a energia de dissociação do KCl , desprezando a energia de repulsão.
 - (c) A energia de dissociação medida é 4.43 eV . Qual é a energia devida à repulsão dos iões, na separação de equilíbrio?
4. Preveja a fórmula de um composto iónico formado entre magnésio (Mg) e oxigénio (O) e explique o raciocínio.
5. O espectro de rotação da molécula de HCl apresenta os números de onda para as primeiras riscas de rotação respetivamente: 8100 , 10500 e 12500 m^{-1} . Calcule:
 - (a) o momento de inércia;
 - (b) a distância de equilíbrio da molécula de HCl .
6. Calcule o valor da constante de força da ligação numa molécula de CO considerando que a separação entre os níveis de energia de vibração da molécula é $8.45 \times 10^{-2} \text{ eV}$.
7. Para a molécula de NaCl , a separação dos dois níveis vibracionais é 0.04 eV . Mostre que há à volta de 40 níveis rotacionais entre um par de níveis vibracionais.
8. Qual é a fração de moléculas de HCl a 1000 K que se encontram no primeiro estado fundamental?
9. Considere os espectros vibracionais-rotacionais.
 - (a) Dado que a constante de força de ligação numa molécula de HCl é 470 N m^{-1} , determine a diferença em energia entre o estado mais baixo e o primeiro estado na molécula de HCl ($M(\text{H})=1.008$, $M(\text{Cl})=35.45$).
 - (b) Considerando que a inércia rotacional da molécula de HCl tem o valor $I = 2.66 \times 10^{-47} \text{ kg m}^2$ determine a diferença em energia entre o estado mais baixo e o primeiro estado rotacional de HCl .
 - (c) À temperatura ambiente, colisões de moléculas gasosas de HCl podem transferir energia cinética suficiente para a forma de energia interna provocando a excitação de muitos estados rotacionais. A que temperatura é que o número de moléculas no primeiro estado vibracional é igual a $1/e$ do número que se encontra no estado vibracional fundamental?

5. Núcleos

O mundo é construído a partir de 92 elementos distinguindo-se cada um pela carga elétrica Ze no núcleo atómico. Esta carga é balanceada pela carga dos Z eletrões os quais com o núcleo formam o átomo. Vamos considerar as características do núcleo que explicam os fenómenos como radioatividade, fissão e fusão.

5.1 Propriedades básicas do núcleo

(a) Constituintes

$$\begin{array}{cc} \text{Núcleo} \\ Z \text{ prótons} & N \text{ neutrões} \end{array}$$

onde $N + Z = A$, o número de massa.

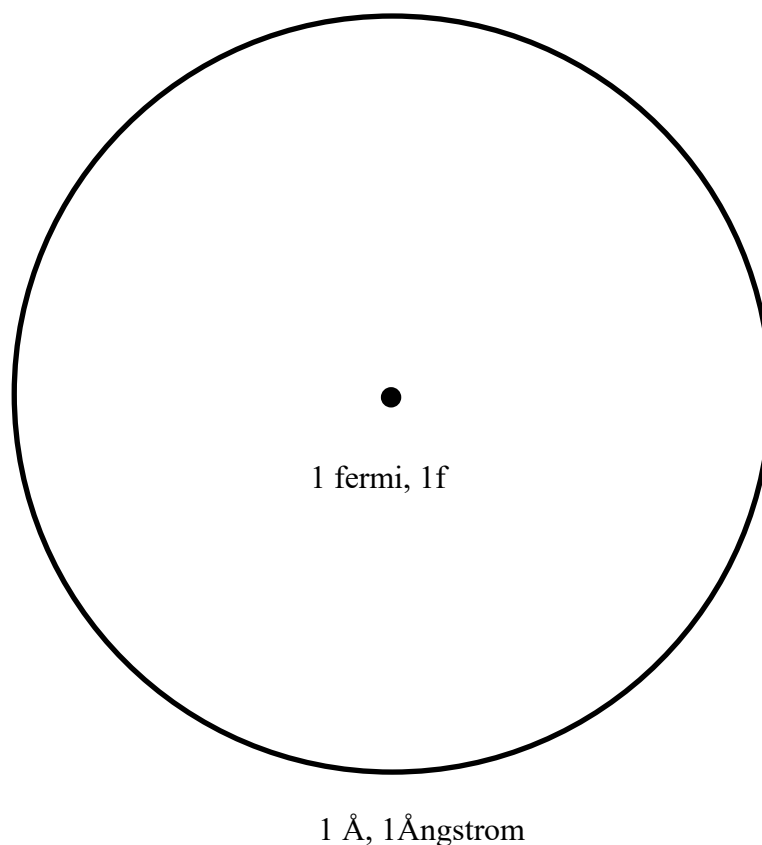
A carga do núcleo é dada por

$$Z \times e$$

onde e é o módulo da carga do eletrão. O neutrão não tem carga.

O número atómico indica a posição do átomo na tabela periódica.

(b) O raio



Podemos determinar o raio de núcleos, experimentalmente e observe-se que

$$R = r_0 A^{1/3}$$

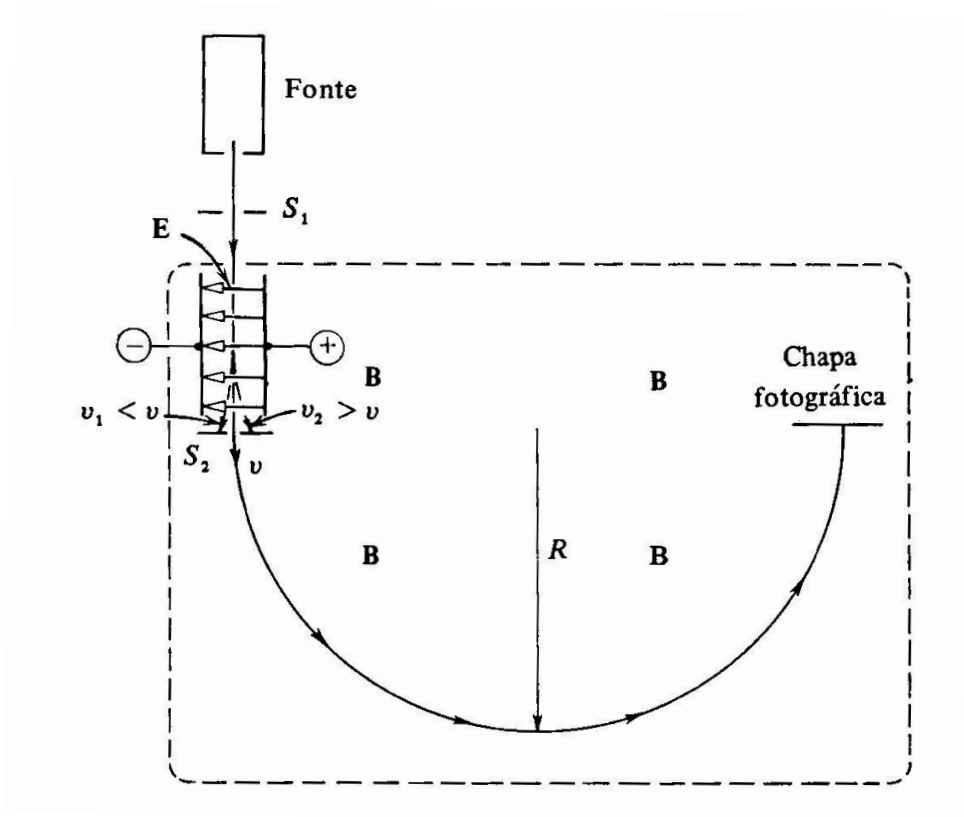
onde $r_0 = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$

Por exemplo, o valor de R para $^{125}_{52}\text{Te}$ é

$$R = 1.2 \times 10^{-15} 125^{1/3} = 6 \times 10^{-15} \text{ m}$$

(c) Massa

A massa de um átomo é medida pelo espectrómetro de massa:



A região evacuada de campos elétricos e magnéticos perpendiculares atua como um filtro de velocidades.

O campo elétrico exerce uma força

$$F_e = eE$$

nos iões, enquanto o campo magnético exerce uma força

$$F_m = Bev$$

na direção oposta.

Com $F_e = F_m$ temos

$$v = \frac{E}{B}$$

A distância do diafragma S_2 até a imagem na placa fotográfica é $2R$ e

$$Bev = \frac{Mv^2}{R}$$

e portanto

$$M = \frac{RBe}{v} = \frac{RB^2e}{E}$$

Usando este método, pode ser determinadas massas atômicas com uma alta exatidão.

Por exemplo,

$^{40}_{20}\text{Ca}$ tem massa atômica 39.962589 ± 0.000004 u

onde u é a unidade de massa e

$$\begin{aligned} 1\text{u} &= \frac{1}{12} \{\text{massa de } ^{12}_6\text{C}\} \\ &= \frac{1}{12} \left\{ \frac{12}{6.02252 \times 10^{26}} \right\} \\ &= 1.661 \times 10^{-27} \text{ kg} \end{aligned}$$

Também,

$$m_n = 1.008 \text{ u}$$

$$m_p = 1.007 \text{ u}$$

$$m_e = 0.00054 \text{ u}$$

A energia equivalente a 1 u é

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \\ &= 1.661 \times 10^{-27} \times (3 \times 10^8)^2 = 1.49 \times 10^{-10} \text{ J} = 933.1 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Exemplo

Um ião N_2^+ com carga única é passado através de um espectrómetro de massa. O ião é acelerado por um potencial elétrico de 2500 V e entra numa região com um campo magnético uniforme de 0.2T. O ião segue um percurso circular com um raio de 0.1m.

- (a) Calcule a massa do ião.
 (b) Compare-se com a massa por partícula derivada da massa molar (28 g/mol).

Solução

- (a) O ião é acelerado pelo potencial elétrico, logo a energia cinética do ião é:

$$E_c = qV = (1.6 \times 10^{-19}) \times 2500 = 4.0 \times 10^{-16} \text{ J}$$

A energia cinética está também relacionada com a velocidade do ião:

$$E_c = \frac{1}{2} M v^2$$

em que M é a massa do ião e v é a sua velocidade.

Rearranjando para encontrar v :

$$v = \sqrt{\frac{2E_c}{M}}$$

Agora, no espectrómetro de massa, a força magnética fornece a força centrípeta:

$$qvB = \frac{Mv^2}{r}$$

Reorganizando

$$v = \frac{qBr}{M}$$

Agora temos duas expressões:

$$v = \sqrt{\frac{2E_c}{M}}$$

e

$$v = \frac{qBr}{M}$$

Então

$$\sqrt{\frac{2E_c}{M}} = \frac{qBr}{M}$$

e rearranjando

$$M = \frac{q^2 B^2 r^2}{2E_c}$$

Substituindo

$$M = \frac{(1.6 \times 10^{-19})^2 \cdot (0.2)^2 \cdot (0.1)^2}{2 \cdot 4.0 \times 10^{-16}} = 1.28 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

(b) A massa por molécula é dada por

$$\frac{28}{6.023 \times 10^{23}} = 4.65 \times 10^{-23} \text{ kg} = 4.65 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

A discrepância ocorre porque a massa calculada representa apenas o único ião, que perde um elétron durante a ionização. Adicionalmente:

Os valores experimentais influenciam diretamente a massa calculada.

Se a carga do ião for maior (por exemplo, $2+$), a massa derivada seria ainda menor.

5.2 Energia de ligação no núcleo

Forma-se um átomo ao fazerem aproximar-se:

Z	protões
(A-Z)	neutrões
Z	eletrões

Contudo, observa-se que a massa total de um átomo não é igual a soma dos Z protões, (A-Z) neutrões e os Z eletrões.

Por exemplo, considere um átomo de deutério, ${}^2_1\text{H}$. A massa esperada é dada por

$$\begin{aligned} M_{\text{esperada}} &= M_H + M_n \\ &= 1.0078252 + 1.0086654 \\ &= 2.0164906 \text{ u} \end{aligned}$$

Contudo, a massa apresentada pelo deutério é

$$M = 2.0141022 \text{ u}$$

Há uma diferença de massa

$$\begin{aligned} \Delta m &= (2.0164906 - 2.0141022) \\ &= 0.0023884 \text{ u} \end{aligned}$$

Esta diferença de massa está relacionada com a **energia** de ligação do núcleo, neste caso a energia de ligação de um protão com um neutrão para formar um núcleo de deutério.

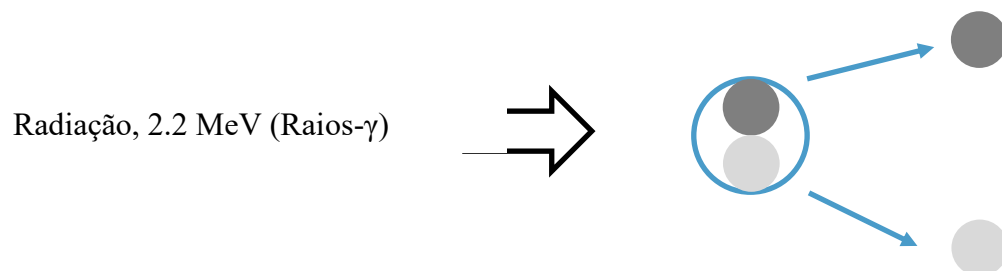
A energia equivalente a esta diferença de massa é dada por

$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta mc^2 \\ &= 0.0023884 \cdot 1.661 \times 10^{-27} \cdot (3 \times 10^8)^2 \\ &= 3.57 \times 10^{-13} \text{ J} \\ &= 2.23 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Esta energia é libertada quando se forma um átomo de deutério.

ou

Esta energia deve ser fornecida para dispersar um átomo de deutério num protão e num neutrão



Esta energia é chamada a **energia de ligação do núcleo** e é uma medida da estabilidade de um átomo.

Para qualquer átomo, a energia de ligação (BE – *Binding Energy*) é dada por

$$BE = [Zm_p + (A - Z)m_n + Zm_e - M(A, Z)]c^2$$

A energia de ligação por nucleão é

$$BE/A = [Zm_p + (A - Z)m_n + Zm_e - M(A, Z)]c^2/A$$

Para deutério, a energia de ligação por nucleão é

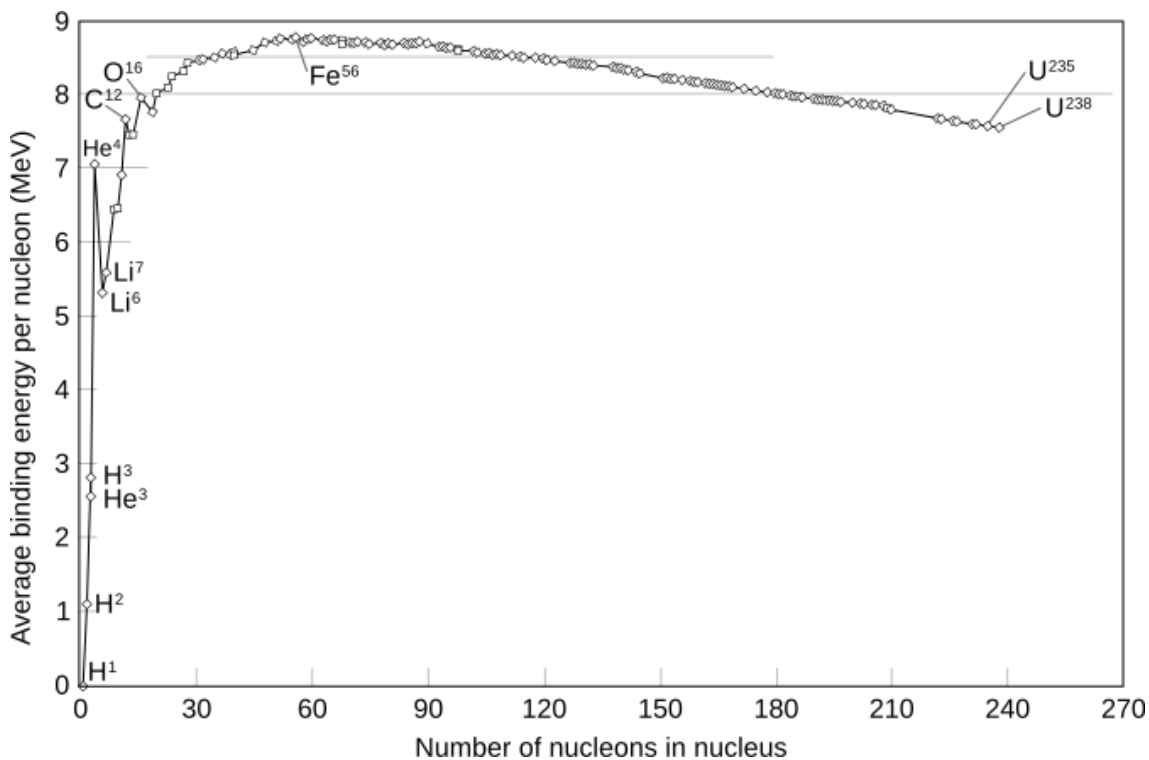
$$\begin{aligned} BE/A &= (2.23/2) \\ &= 1.115 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Para urânio, $^{235}_{92}\text{U}$ (massa atômica = 235.0439 u)

$$BE/A = 7.59 \text{ MeV}$$

A energia de ligação por nucleão é diferente para todos os elementos na tabela periódica.

Podemos construir um gráfico da energia de ligação por nucleão como função de número de massa



Há quatro regiões distintas:

1. Tem um máximo à volta de $A = 50$ e

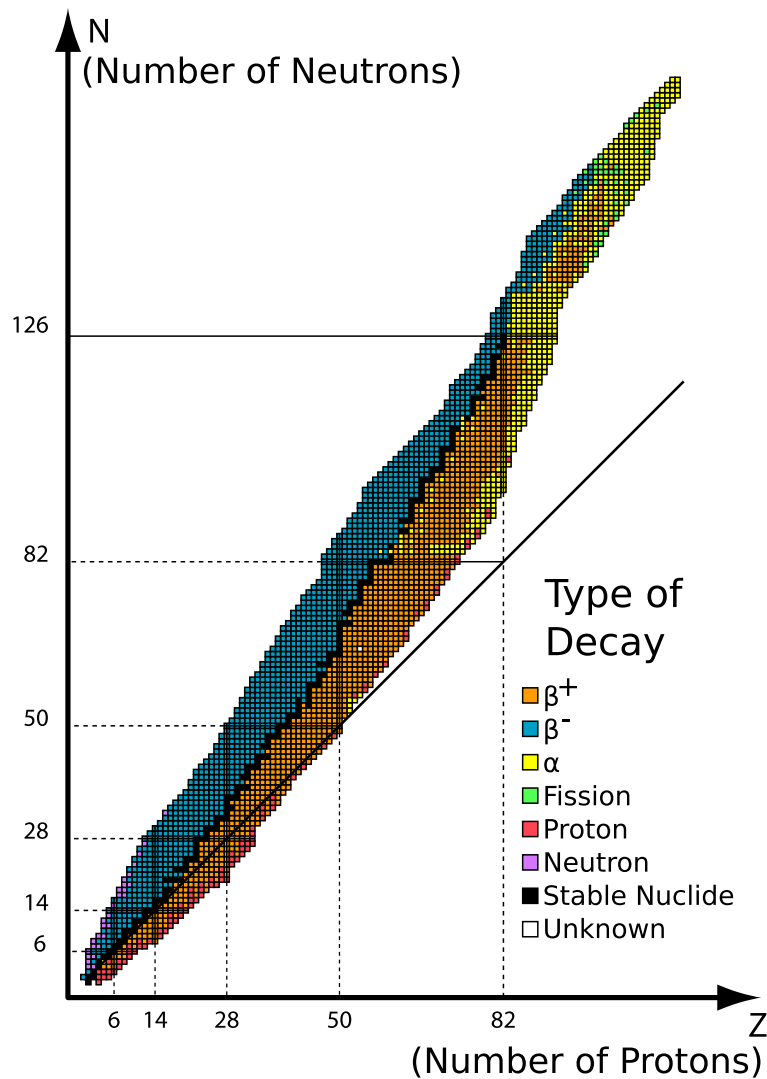
$$BE/A = 8.8 \text{ MeV}$$

2. Para A pequeno, BE/A é pequeno, mas aumenta rapidamente até $A = 20$.
3. Entre $A = 20$ e 160 , BE/A não varia muito e o valor médio é 8.5 MeV .
4. Para $A > 160$, BE/A diminui lentamente até $A = 238$ com $BE/A = 7.6 \text{ MeV}$.

A partir dos dados de espectrómetro de massa, podemos ver que, em geral

Núcleos leves ($A < 20$) $Z \approx N$

Núcleos pesados ($A > 20$) $Z < N$



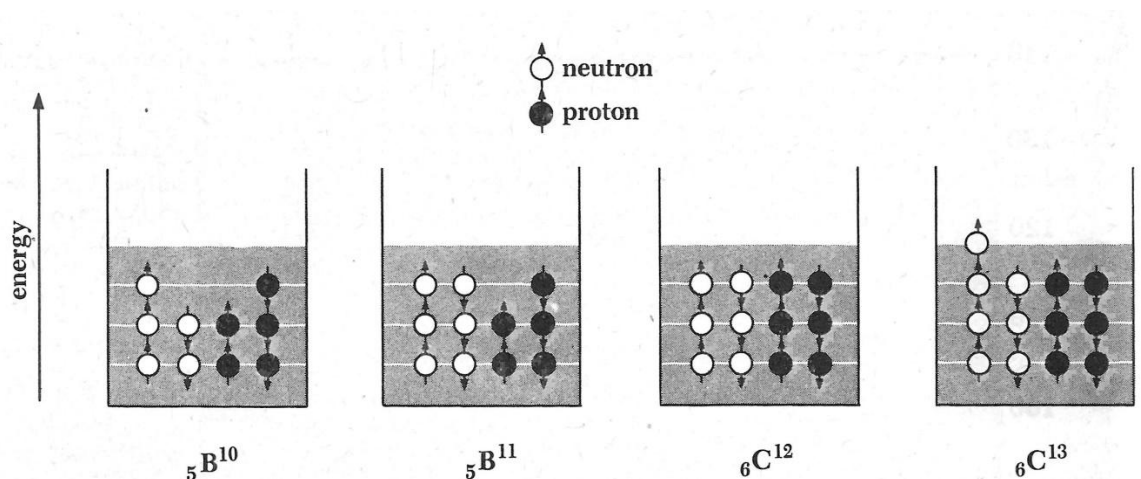
(a) Núcleos leves

Cada nível de energia nuclear pode conter

- 2 neutrões de spin oposto
- 2 prótons de spin oposto

e estes obedecem ao princípio da exclusão de Pauli.

Os níveis de energia do núcleo são preenchidos sequencialmente:



- existe $^{12}_6\text{C}$

mas

$^{12}_5\text{B}$

não existe.

(b) Núcleos pesados

Aqui, a repulsão entre prótons torna-se tão grande que é necessário um excesso de neutrões para haver estabilidade.

Contudo

há um limite para a eficácia dos neutrões na prevenção da rotura de grandes núcleos

$^{209}_{83}\text{Bi}$

e com

$Z > 83$, $A > 209$ há rotura com a emissão de partículas α .

Exemplo

Determine a diferença entre a energia de ligação de um núcleo de ${}^{238}_{92}\text{U}$ e a soma das energias de ligação dos dois núcleos produzidos se haver uma fissão simétrica.

Solução

$$\text{BE} ({}^{238}_{92}\text{U}) = 238 \times 7.6 = 1810 \text{ MeV}$$

Agora,

$$\text{BE} (A = 238 / 2) = 119 \times 8.5 = 1010 \text{ MeV e a soma} = 2020$$

A diferença = 210 MeV (energia cinética).

5.3 Modelos do núcleo

Não há um só modelo que possa explicar satisfatoriamente as características dos núcleos estáveis e instáveis.

Há vários modelos em uso sendo os modelos principais:

1. o modelo da gota líquida
2. o modelo das camadas
3. o modelo coletivo

O modelo previa só com poucos parâmetros as energias de ligação de todos os núcleos com uma exatidão. Considere o núcleo como sendo uma gota líquida e assumamos que

- o raio $\propto A^{1/3}$
- a área da superfície $\propto A^{2/3}$
- o volume $\propto A$

Neste modelo, a equação para a energia de ligação tem cinco termos

$$BE = E_1(Z, A) + E_2(Z, A) + E_3(Z, A) + E_4(Z, A) + E_5(Z, A)$$

Vamos considerar cada um dos termos separadamente:

1. O termo de energia de volume $E_1(Z, A)$

Este é o termo mais importante e representa a tendência de ter a energia de ligação por nucleão constante e

$$E_1(Z, A) = a_1 A$$

O resto dos termos na equação de BE são correções a este termo.

2. O termo de energia de superfície $E_2(Z, A)$

Alguns nucleões estão à superfície do núcleo e, portanto, estes nucleões sentirão forças de atração só de um lado. Assim, a sua energia de ligação é menor do que a energia de ligação para nucleões no interior – os quais sentem forças de atração de todos os lados. O número destes nucleões depende da área da superfície do núcleo. Portanto

$$E_2(Z, A) = -a_2 A^{2/3}$$

3. O termo de energia coulombiana $E_3(Z, A)$

A repulsão eletrostática entre cada par de prótons num núcleo também contribui para diminuir a sua energia de ligação. A energia coulombiana é o trabalho que tem de ser efetuado para ligar os prótons que se encontraram infinitamente afastados para um volume igual ao do núcleo. Agora, a energia potencial de uma distribuição contínua de carga numa esfera é

$$V = \frac{3}{5} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

mas no núcleo, a distribuição de carga não é contínua e

$$\begin{aligned} V &= \frac{3}{5} \frac{Z(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \\ &\propto \frac{Z(Z-1)}{R} \\ &\propto \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} \end{aligned}$$

ou

$$E_3(Z, A) = -a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$$

4. O termo de simetria $E_4(Z, A)$

Para núcleos leves, $Z \approx N$ mas quando Z aumenta, há aumento da repulsão coulombiana e para o evitar, são necessários mais neutrões.

Com este aumento em N , a energia de ligação diminui, o o termo de simetria toma isso em consideração e

$$E_4(Z, A) = -a_4 \frac{(Z - A/2)^2}{A}$$

Quando maior a diferença entre Z e N , menor a energia de ligação. Quando $Z = N$, $Z = A/2$ e $E_4(Z, A) = 0$.

5. Termo de paridade, $E_5(Z, A)$

Observa-se que quando:

A PAR	N PAR	Z PAR	Número se núcleos estáveis =	166
A PAR	N ÍMPAR	Z ÍMPAR		8
A ÍMPAR	N PAR	Z ÍMPAR		57
A ÍMPAR	N ÍMPAR	Z PAR		53

Há uma tendência do núcleo em ter Z par e N par e

$$E_4(Z, A) = \begin{cases} +a_5 A^{-1/2} & Z \text{ PAR } N \text{ PAR} \\ 0 & Z \text{ PAR } N \text{ ÍMPAR ou } Z \text{ ÍMPAR } N \text{ PAR} \\ -a_5 A^{-1/2} & Z \text{ ÍMPAR } N \text{ PAR} \end{cases}$$

Então, a energia de ligação total por nucleão é

$$BE/A = a_1 - a_2 A^{-1/3} - a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{4/3}} - a_4 \frac{(Z - A/2)^2}{A^2} + \begin{pmatrix} +1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} a_5 A^{-3/2}$$

onde

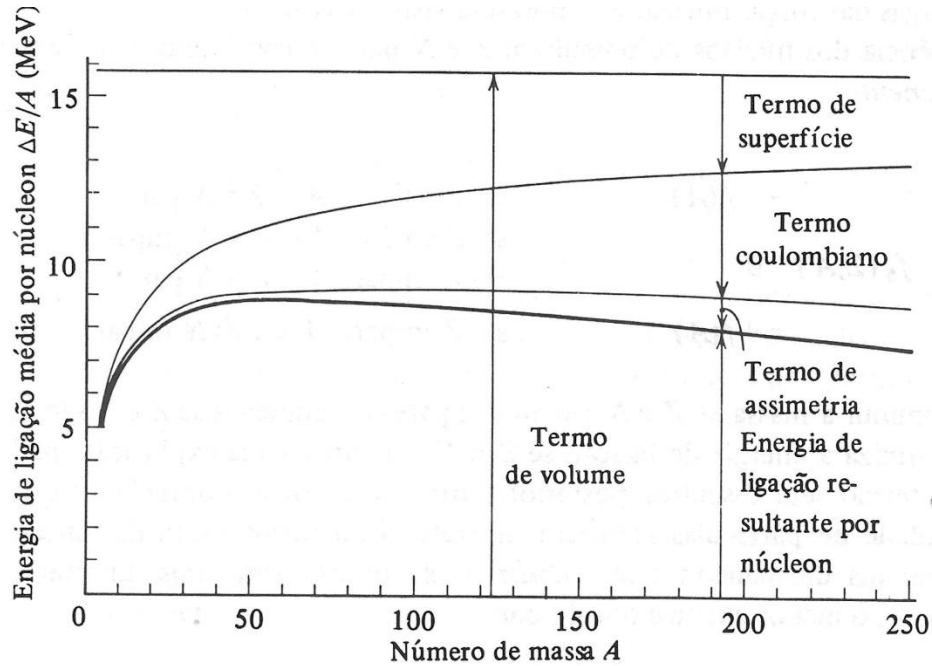
$$a_1 = 15.751 \text{ MeV}$$

$$a_2 = 17.808 \text{ MeV}$$

$$a_3 = 0.710 \text{ MeV}$$

$$a_4 = 94.780 \text{ MeV}$$

$$a_5 = 11.178 \text{ MeV}$$



Exemplo

Determine a energia de ligação por nucleão do $^{12}_6\text{C}$.

Solução

$$\begin{aligned} BE/A &= a_1 - a_2 A^{-1/3} - a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{4/3}} - a_4 \frac{(Z-A/2)^2}{A^2} + \left(\begin{matrix} +1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix} \right) a_5 A^{-3/2} \\ &= 15.751 - 7.778 - 0.775 - 0 + 0.269 \\ &= 7.467 \text{ MeV} \end{aligned}$$

5.4 Ressonância magnética nuclear

No efeito de Zeeman, vimos que os níveis de energia do átomo eram divididos pela ação de um campo magnético externo em virtude da interação do momento magnético do átomo com o campo.

Agora,

o número quântico do spin do próton e do neutrão) é $1/2$

e

o componente z do momento magnético do próton é (determinado experimentalmente) é

$$\mu_z = 2.7928 \mu_N$$

onde μ_N é o magnetão nuclear.

Uma vez que os núcleos também têm momentos magnéticos, a energia de um núcleo também se divide na presença de um campo magnético.

Vamos considerar o caso mais simples, o do átomo de hidrogênio no qual o núcleo é um próton.

A energia potencial do momento magnético μ num campo magnético externo \mathbf{B} é dada por

$$V = -\mu \cdot \mathbf{B}$$

- energia potencial é mais baixa quando o momento magnético estiver alinhado com o campo e mais alta quando o momento magnético estiver em posição oposta à do campo.

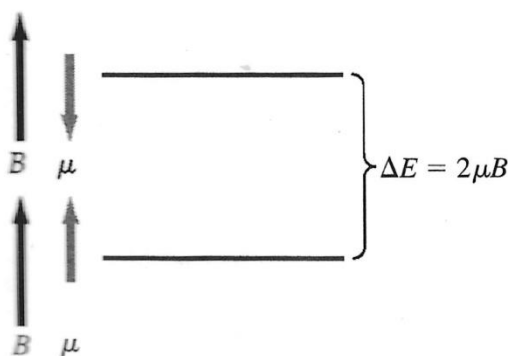
Uma vez que o número quântico do spin do próton é $1/2$, o momento magnético do próton tem duas orientações possíveis num campo magnético externo:

paralelo ao campo (spin para cima)

ou

antiparalelo ao campo (spin para baixo).

A diferença de energia destas duas orientações é



$$\Delta E = 2(\mu_z)B$$

Quando os átomos de hidrogénio forem irradiados com fotões de energia ΔE , parte dos núcleos é induzida a fazer transições entre o estado de energia mais baixa, para o estado de energia mais elevada, em virtude de absorção ressonante. Estes núcleos depois decaem para o estado inferior, emitindo fotões com a energia ΔE . A frequência dos fotões absorvidos e emitidos é dada por

$$hf = \Delta E = 2(\mu_z)B$$

Num campo magnético de 1 T, esta energia é

$$\begin{aligned}\Delta E = 2(\mu_z)B &= 2(2.79 \times 5.05 \times 10^{-27}) \times 1 \\ &= 2.81 \times 10^{-26} \text{ J} \\ &= 1.76 \times 10^{-7} \text{ eV}\end{aligned}$$

e a frequência dos fotões é

$$\begin{aligned}f &= \frac{\Delta E}{h} \\ &= \frac{2.81 \times 10^{-26}}{6.626 \times 10^{-34}} \\ &= 4.25 \times 10^7 \text{ Hz} \\ &= 42.5 \text{ MHz}\end{aligned}$$

Esta frequência está na faixa de radiofrequências do espectro eletromagnético e é uma radiação RF. A medição desta frequência de ressonância dos prótons livres pode ser usada para determinar o momento magnético do protão.

Quando um átomo de hidrogénio estiver numa molécula, o campo magnético no núcleo é igual à soma do

- campo magnético externo e do campo magnético local,

provocado pelos átomos e núcleos das circunvizinhanças.

Uma vez que a frequência de ressonância é proporcional ao campo magnético total, atuante sobre o próton, a medição desta frequência pode dar informações sobre o campo magnético interno na molécula.

- Esta é a **ressonância magnética nuclear**.

A ressonância magnética nuclear é usada como método de obtenção de imagens do interior do corpo, em lugar dos raios X e dos ultrassons.

O paciente é colocado num campo magnético constante

- no tempo

mas

- não no espaço.

Ao ser irradiado por uma fonte de RF de espectro largo, a frequência de ressonância dos fótons absorvidos ou emitidos, em RF, depende do

- valor do campo magnético,

que pode ser relacionado às **posições específicas no corpo do paciente**.

Problemas

1. Calcule
 - (a) a energia de atração gravitacional para dois prótons com uma separação de 2 F;
 - (b) a energia de repulsão coulombiana para a mesma separação;
 - (c) compare estes resultados com a energia de atração nuclear que é de -10MeV para essa separação.
2. A energia de ligação de $^{35}_{17}\text{Cl}$ é 298 MeV. Calcule a sua massa em u.
3. Calcule energia de ligação por nucleão em $^{16}_8\text{O}$ (massa atômica 15.9949 g/mol).
4. Calcule a energia de ligação do último neutrão adicionado nos seguintes isótopos:
 - (a) $^{206}_{82}\text{Pb}$ (massa atômica 205.974468 g/mol), (massa atômica de $^{205}_{82}\text{Pb}$ 204.97448),
 - (b) $^{207}_{82}\text{Pb}$ (massa 206.975903 g/mol) e
 - (c) $^{208}_{82}\text{Pb}$ (massa 207.976650 g/mol).
5. Quando um neutrão e um próton se combinam, forma-se um núcleo de deutério. Um fóton de energia 2.22MeV pode desintegrar o núcleo de deutério nos seus componentes neutrão e próton. Qual é a massa do núcleo de deutério?
6. Que quantidade de energia em MeV deverá ser fornecida a um núcleo de $^{52}_{24}\text{Cr}$ (massa atômica 51.94051 g/mol) para que este se divida em dois fragmentos iguais? (A massa atômica de $^{26}_{12}\text{Mg}$ é 25.98260 g/mol).
7. Use a equação semi-empírica para prever a energia de ligação de um núcleo de $^{120}_{50}\text{Sn}$.
8. Determine o número de massa, A, que tem um valor de termo de energia de superfície por nucleão da equação semi-empírica aproximadamente duas vezes ao valor equivalente de $^{63}_{29}\text{Cu}$.
9. Use a equação semi-empírica para prever a energia de ligação por nucleão de um núcleo de $^{12}_6\text{C}$.
10. Use a equação semi-empírica para prever a energia de ligação disponível quando um núcleo de $^{235}_{92}\text{U}$ captura um neutrão.
11. Considere núcleos com um número de massa pequena, A, e com $Z = N = A/2$ onde Z é o número atômico, e N é o número de neutrões.
 - (a) Desprezando o termo par, deduza a equação semi-empírica.
 - (b) Usando a equação deduzida em (a) determine o valor de Z quando esta equação tem um máximo. A que elemento corresponde o valor de Z calculado?
(Os parâmetros na equação semi-empírica são: $a_2 = 17.808$ MeV, $a_3 = 0.710$ MeV).

6. Processos Nucleares

Incluem os fenómenos como radioatividade, fissão e fusão.

6.1 Decaimento nuclear

Radioatividade resulta da transformação de um átomo instável (ou seja, radioisótopo) para um átomo estável, com a emissão de radiação. Assim há **decaimento nuclear**.

As emissões chamam-se radiações ionizantes e

radiações ionizantes são radiações com energia suficiente para remover eletrões das suas órbitas provocando a ionização do átomo. Este efeito é a razão pela qual a radiação ionizante é perigoso para a saúde.

Há vários tipos de radiação:

Radiation	Symbol	Constituent	Relative Charge	Mass (u)
Alpha	α	A helium nucleus — 2 protons & 2 neutrons	+2	4
Beta-minus (Beta)	β^- or β	Electron	-1	(negligible)
Beta-plus	β^+	Positron	+1	(negligible)
Gamma	γ	Short-wavelength, high-frequency electromagnetic wave.	0	0

Types of nuclear radiation.

Aqui $u = 1.661 \times 10^{-27}$ kg.

6.1.1 A lei de decaimento

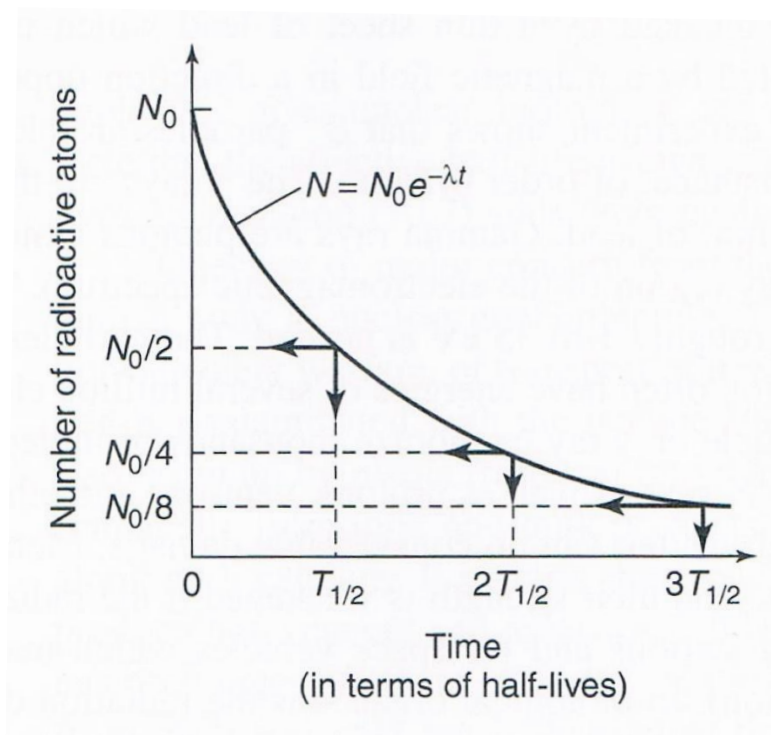
Em 1900, Rutherford descobriu **que para uma substância a taxa de emissão das partículas radioativas não era constante no tempo, mas diminuía exponencialmente.**

Vamos considerar uma amostra de uma substância radioativa com N_0 átomos. O número de átomos ao fim do tempo t é dado por

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

onde λ é a constante de decaimento dada por

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}}$$



Aqui, $T_{1/2}$ é o tempo de semi-vida do elemento radioactivo e representa o tempo necessário para metade dos átomos radioactivos sofrerem decaimento.

TABLE 30.1 Some Half-Lives τ for Radioactive Decay

Isotope	Half-life τ	Decay mode
Polonium $^{214}_{84}\text{Po}$	$1.64 \times 10^{-4} \text{ s}$	α, γ
Krypton $^{89}_{36}\text{Kr}$	3.16 min	β^-, γ
Radon $^{222}_{86}\text{Rn}$	3.83 days	α, γ
Strontium $^{90}_{38}\text{Sr}$	28.5 yr.	β^-
Radium $^{226}_{88}\text{Ra}$	$1.6 \times 10^3 \text{ yr.}$	α, γ
Carbon $^{14}_6\text{C}$	$5.73 \times 10^3 \text{ yr.}$	β^-
Uranium $^{238}_{92}\text{U}$	$4.47 \times 10^9 \text{ yr.}$	α, γ
Indium $^{115}_{49}\text{In}$	$4.41 \times 10^{14} \text{ yr.}$	β^-

A atividade é o número de desintegrações por segundo:

$$A = \left| \frac{dN}{dt} \right| = \lambda N$$

que tem as unidades Curie (Ci) onde

$$1 \text{ Ci} = 3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$$

$$1 \text{ Bq} = 1 \text{ desintegração / s}$$

Exemplos:

Radioatividade natural no corpo humano:	10 nCi
Técnicas de scan médicas nucleares:	10 mCi – 10 mCi
Raios-g para radioterapia	1000 Ci

Exemplo:

Uma fonte radioativa tem semi-vida de 1 min. No instante $t = 0$, é colocada nas vizinhanças de um detetor e a taxa de contagem (o número de partículas de decaimento detetadas por unidade de tempo) é 2000 por segundo. Determine a taxa de contagem nos instantes 1, 2, 3 e 10 min.

Solução:

Uma vez que a semi-vida é 1 min, a taxa de contagem será

$$A = \begin{array}{l} 1000 \text{ partículas/s,} \\ 500 \text{ partículas/s,} \\ 250 \text{ partículas/s,} \end{array}$$

$$(1/2)^{10}(2000) = 1.95 = 2 \text{ partículas / s}$$

Exemplo:

Se no exemplo anterior, a eficiência de contagem for 20%, quanto núcleos radioativos estavam na amostra no instante $t = 0$? E no instante $t = 1 \text{ min}$? Quantos núcleos se desintegram no primeiro minuto?

Solução:

A eficiência de contagem depende da distância entre a fonte radioativa e o detetor e da probabilidade de as partículas emitidas na desintegração entrarem no detetor a fim de provocar um impulso de contagem.

Se a taxa de contagem, a $t = 0$, for 2000 partículas por segundo e se a eficiência for 20%, a taxa de desintegração será 10000 s^{-1} . O número de núcleos radioativos pode ser estimado por

$$A = \lambda N$$

onde

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}} = \frac{0.693}{60} = 0.015$$

O número de núcleos, no instante $t = 0$ é então

$$N = \frac{A}{\lambda} = \frac{10000}{0.015} = 8.66 \times 10^5$$

No instante $t = 1$ min, o número de núcleos será a metade do número em $t = 0$ ou

$$4.33 \times 10^5.$$

Exemplo:

Depois do acidente no reator nuclear em Chernobyl, foi libertada uma grande quantidade do isótopo radioativo ^{131}I que se depositou no solo e nas plantas. Assim, o leite das vacas que pastaram nos solos contaminados, continha uma grande quantidade de ^{131}I , pelo que o leite só pode ser usado para a produção de queijo e não para consumo direto. Que tempo de armazenamento é necessário para que os níveis de ^{131}I do queijo, decaiam para 5% do valor original? O tempo de semi-vida do ^{131}I é $T_{1/2} = 8$ dias.

Solução:

O número de átomos radioativos é dado por

$$N = N_0 e^{-\lambda t},$$

$$\lambda = \frac{0.693}{T_{1/2}}$$

Aqui, t é o tempo para o número de átomos radioativos reduzir de N_0 até $0.05N_0$. Assim

$$t = -\frac{\ln(0.05)}{\frac{\ln(2)}{8}} = 34.6 \text{ dias}$$

Exemplo:

A atividade de uma amostra, num certo instante, foi medida como 115 desintegrações/min. Depois de 4 dias e 5 horas, a atividade medida foi 73.5 desintegrações/min.

- Calcular o tempo de semi-vida do material radioativo.
- Qual é o tempo necessário (contado a partir do instante inicial) para que a atividade da amostra seja 10.0 desintegrações por minuto?

Solução

(a) A constante de decaimento é

$$\lambda = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{A_0}{A} \right) = \frac{1}{363600} \ln \left(\frac{115}{73.5} \right) = 1.23 \times 10^{-6} \text{s}^{-1}$$

e o tempo de semi-vida é $T_{1/2} = 5.63 \times 10^5 \text{ s}$

(b) Sabemos que

$$t = \frac{1}{\lambda} \ln \left(\frac{A_0}{A} \right)$$

então

$$t = \frac{1}{1.23 \times 10^{-6}} \ln \left(\frac{115}{10} \right) = 1.98 \times 10^6 \text{s}$$

6.2 Decaimento α , β e γ

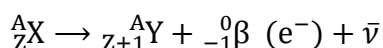
6.2.1 Decaimento β

O decaimento β ocorre nos núcleos que têm excesso, ou falta, de neutrões para ter estabilidade.

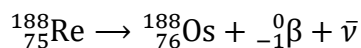
Há três mecanismos principais:

1. Decaimento β^-

Acontece em isótopos ricos em neutrões:

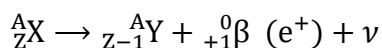


Por exemplo:

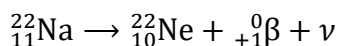


2. Decaimento β^+

Acontece em isótopos ricos em prótons:

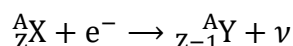


Por exemplo:

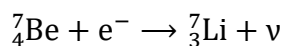


3. Captura eletrónica

Acontece em isótopos ricos em protões:



Por exemplo:



Uma aplicação importante do decaimento β é o do ${}^{14}\text{C}$ (formado na atmosfera superior em reações nucleares provocadas por raios cósmicos com um tempo de semi-vida de 5730 anos) e combina-se com o oxigénio para formar



Uma vez que os organismos vivos trocam continuamente CO_2 com a atmosfera, a razão entre ${}^{14}\text{C}$ e ${}^{12}\text{C}$ num organismo vivo é igual a razão do equilíbrio destes dois isótopos na atmosfera:

$$\sim 1.3 \times 10^{-12}$$

Depois de o organismo morrer, não absorve mais ${}^{14}\text{C}$ da atmosfera e então

- a razão entre ${}^{14}\text{C}$ e ${}^{12}\text{C}$

continuamente diminui devido à desintegração do ${}^{14}\text{C}$.

É possível calcular o número de desintegrações do ${}^{14}\text{C}$ por minuto por grama de carbono num organismo vivo.

Com esta informação, e com a medição do número de desintegrações, por minuto por grama de carbono numa amostra morte de osso, de madeira ...podemos determinar a idade da amostra.

Exemplo

Um arqueologista encontra um pedaço de madeira numa casa escavada que sabe ser de elevada idade. Pesa 50 g e mostra uma atividade do ${}^{14}\text{C}$ de 320 desintegrações-min. Estime o intervalo de tempo que decorreu desde que esta madeira fazia parte de uma árvore assumindo que as arvores vivas mostram uma atividade de 12 desintegrações/min.

Solução

Assuma que a árvore viva no momento da sua morte apresenta N_0 átomos radioativos.

Então

$$A_0 = \lambda N_0$$

Após a sua morte

$$A = \lambda N = \lambda N_0 e^{-\lambda t}$$

e portanto

$$\frac{A}{A_0} = e^{-\lambda t}$$

ou

$$t = \frac{1}{\lambda} \ln \left(\frac{A_0}{A} \right)$$

e substituindo

$$t = \frac{1}{0.693/5730} \ln \left(\frac{12}{320/50} \right) = 5197 \text{ anos}$$

Agora, para **decaimento β^-** , a emissão de eletrões ocorre se

$$m(Z, A) > m(Z + 1, A) + m_e$$

O excesso de massa multiplicado por c^2 é igual à energia E que se torna disponível no decaimento, ou seja

$$E = [m(Z, A) - m(Z + 1, A) - m_e]c^2$$

Em termos de massas atómicas, podemos mostrar que

$$E = [M(Z, A) - M(Z + 1, A)]c^2$$

Para **decaimento β^+** , a emissão de positrões ocorre se

$$m(Z, A) > m(Z - 1, A) + m_e$$

O excesso de massa multiplicado por c^2 é igual à energia E que se torna disponível no decaimento, ou seja

$$E = [m(Z, A) - m(Z - 1, A) - m_e]c^2$$

Em termos de massas atómicas, podemos mostrar que

$$E = [M(Z, A) - M(Z - 1, A) - 2m_e]c^2$$

Para **captura eletrónica** a ocorrer

$$m(Z, A) + m_e > m(Z - 1, A)$$

O excesso de massa multiplicado por c^2 é igual à energia E que se torna disponível no decaimento, ou seja

$$E = [m(Z, A) + m_e - m(Z - 1, A)]c^2$$

Em termos de massas atómicas, podemos mostrar que

$$E = [M(Z, A) - M(Z - 1, A)]c^2$$

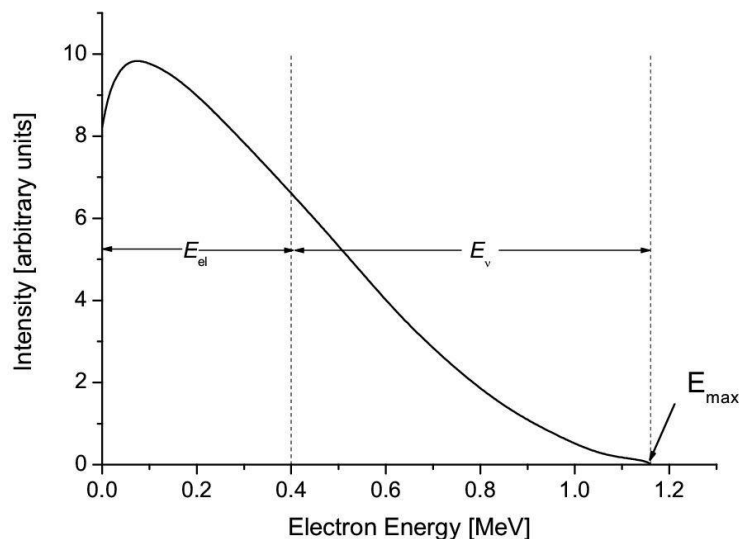
Exemplo

${}^7_3\text{Li}$ (massa atómica 7.01600 u) e ${}^7_4\text{Be}$ (massa atómica 7.01693 u) têm $A = 7$. Quais destes núcleos é estável a decaimento β ?

Solução

${}^7_3\text{Li}$ porque é mais leve e como $7.01693 - 7.01600 = 0.00093 \text{ u} < 2 m_e$ (0.00110) o ${}^7_4\text{Be}$ decai por captura eletrónica para ${}^7_3\text{Li}$.

Vamos agora considerar as energias das partículas β^- para uma amostra de ${}^{210}_{83}\text{Bi}$



Caraterísticas:

1. Ambos os emissores de β^- e β^+ apresentam um espectro contínuo
2. O valor de E_{\max} é sempre aproximadamente igual à energia de desintegração máxima.

A partir destes resultados, podemos dizer que não há conservação de

1. Energia
2. Momento linear
3. Momento angular.

Pauli resolveu estas dificuldades quando postulou a existência do neutrino ν e antineutrino $\bar{\nu}$ apresentando

1. massa zero
2. carga zero
3. spin 1/2

As partículas e^- e ν e as antipartículas e^+ e $\bar{\nu}$ são exemplos de leptões e

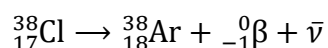
e^- e ν têm um número de leptão +1
 e^+ e $\bar{\nu}$ têm um número de leptão -1

e em qualquer decaimento a soma destes números é constante.

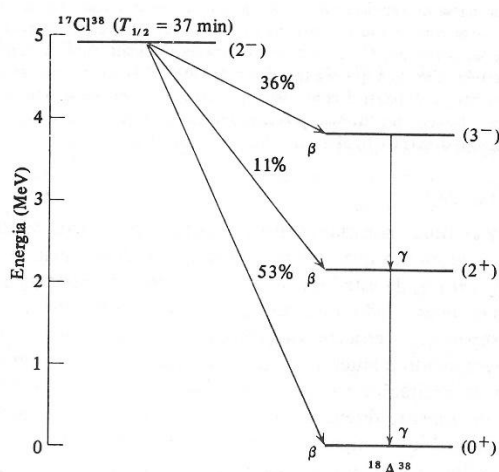
6.2.2 Decaimento γ

Raios γ são fotões de radiação eletromagnética que levem para fora o excesso de energia quando núcleos fazem transições decaimento γ de estados excitados para estados de energias mais baixas.

Por exemplo, o decaimento β :



produz um núcleo com vários estados excitados



e as energias dos raios γ são dados por

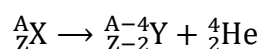
$$hf = E_2 - E_1$$

Uma vez que o espaçamento é da ordem de 1 MeV,

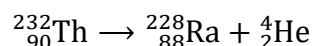
$$\lambda = \frac{hc}{E} \approx \frac{6.63 \times 10^{-34} \cdot 2.99 \times 10^8}{10^6 \cdot 1.6 \times 10^{-19}} = 1.23 \times 10^{-12} \text{ m} = 1.23 \text{ pm}$$

6.2.3 Decaimento α

Decaimento α ocorre em núcleos com $Z > 82$. Envolve o decaimento de um núcleo instável para um núcleo por emissão de uma partícula α – o núcleo de ${}^4_2\text{He}$



Por exemplo:



O processo é espontâneo e é devido à redução na energia coulombiana do núcleo quando a sua carga Ze é reduzida pela carga $2e$ levada para fora pela partícula α .

Para o processo ocorrer

$$M(Z, A) > M(Z - 2, A - 4) + m_\alpha$$

O excesso de massa multiplicado por c^2 é igual à energia E que se torna disponível no decaimento, ou seja

$$E = [M(Z, A) - M(Z - 2, A - 4) - m_\alpha]c^2$$

6.2.4 As séries de decaimento

Núcleos radiativos são núcleos instáveis e eles decaem por desintegrações sucessivas:

$$(1) \rightarrow (2) \rightarrow (3) \rightarrow (4) \rightarrow \dots$$

conduzindo a um núcleo estável.

A maioria dos elementos radioativos são membros de quatro séries radioativas:

1. série de tório	$A = 4n$
2. série de neptúnio	$A = 4n + 1$
3. série de urânio-238	$A = 4n + 2$
4. série de urânio-235	$A = 4n + 3$

onde n é um número inteiro que depende da série. Por exemplo, na série de urânio, $n = 59$.

Os tempos de semi-vida são:

$$\text{- Th} = 2.01 \times 10^{10} \text{ a}$$

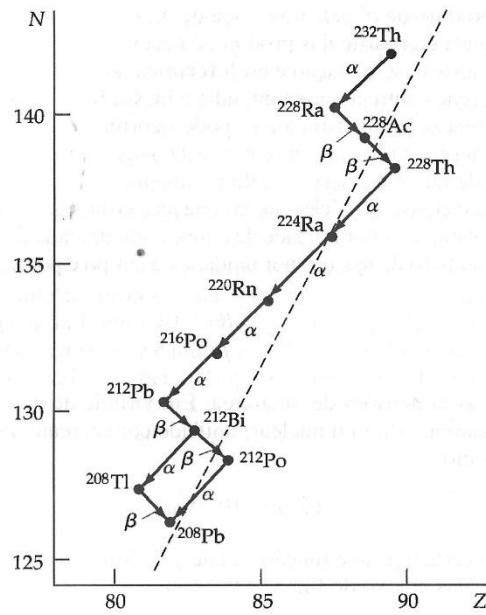
$$\text{- Np} = 3.25 \times 10^6 \text{ a}$$

$$\text{- }^{238}\text{U} = 6.52 \times 10^9 \text{ a}$$

$$\text{- }^{235}\text{U} = 1.02 \times 10^9 \text{ a}$$

A série de Neptúnio tem uma semi-vida pequeno e por isso a série já não existe.

A figura mostra a família do tório:

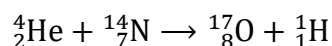


Problemas

- 1 Calcule a massa de $^{226}_{88}\text{Ra}$ que tem uma actividade de 1 Ci (tempo de semi-vida é 1620 a).
- 2 A actividade de uma certa amostra radioactiva diminui de um factor de 8 num intervalo de tempo de 30 dias. Qual é
 - (a) o tempo de semi-vida;
 - (b) a vida média;
 - (c) a constante de desintegração?
- 3 Usando o valor actual da razão dos dois isotopos mais importantes de urânio - $^{238}_{92}\text{U}$ e $^{235}_{92}\text{U}$ - que é 138:1 e assumindo que essa razão nunca podia ter sido maior que 1, estime a possível idade mínima da crosta da terra (tempo de semi vida do $^{238}_{92}\text{U}$ é 4.51×10^9 a e do $^{235}_{92}\text{U}$ é 7.10×10^8 a).
- 4 Nos minerais de $^{238}_{92}\text{U}$ em que se estabelece o equilíbrio secular está presente 1 átomo de $^{226}_{88}\text{Ra}$ por cada 2.8×10^6 átomos de $^{238}_{92}\text{U}$. Calcule o tempo de semi vida de $^{238}_{92}\text{U}$ (tempo de semi vida de $^{226}_{88}\text{Ra}$ é 1620 a).
- 5 Calcule a energia de desintegração total para o decaimento de $^{232}_{92}\text{U}$ por emissão de partícula α . Calcule a energia cinética da partícula α se o núcleo filho formado estiver no estado fundamental. (massas atómicas: $^{232}_{92}\text{U}$ é de 232.0371 mu, $^{228}_{90}\text{Th}$ é de 228.02875 mu, ^4_2He é de 4.00260 mu).
- 6 Sabe-se que 46.3 mg de potássio natural emite partículas β cuja actividade é de 1.5 desintegrações sec^{-1} . O isotopo que é responsável para esta actividade é $^{40}_{11}\text{K}$, que constitui 0.012 % da mistura natural. Calcule o tempo de semi vida de $^{40}_{11}\text{K}$.
- 7 O tempo de semi vida de $^{60}_{27}\text{Co}$ é 5.26 a.
 - (a) Calcule a vida média e a constante de desintegração.
 - (b) Qual é a actividade de uma amostra de 1 g de $^{60}_{27}\text{Co}$?
 - (c) Cada desintegração de $^{60}_{27}\text{Co}$ é acompanhada pela emissão de um electrão de energia 0.31 MeV, e de dois raios - γ de energias 1.17 MeV e 1.33 MeV. Calcule a velocidade à qual a energia é libertada por uma amostra de 1 g.
- 8 ^7_4Be sofre decaimento por captura electrónica para ^7_3Li , apresentado um valor de energia de desintegração total de 0.863 MeV. A energia máxima de recuo de lítio é 55 eV. Calcule a energia cinética do neutrino, assumindo que a sua massa em repouso é zero.
- 9 Um físico de Évora compra uma faca numa loja a qual é suposta ser a faca que Brutus usou para matar Cesar (no ano 56 A.C). A madeira do cabo pesa 20 g. Qual deveria ser o valor da actividade de ^{14}C para esta faca no caso de esta ser genuína? Na realidade o valor da actividade de ^{14}C apresentado por uma amostra de 10 g desta faca foi de 83.5 desintegrações. min^{-1} . Qual é a verdadeira idade da faca?

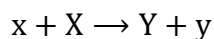
6.3 Reações nucleares

A primeira reação nuclear foi produzida por Rutherford em 1919



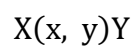
O ${}^4_2\text{He}$, de uma fonte radioativa de 7.7 MeV.

Esta reação é do tipo

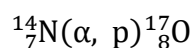


onde x é a partícula incidente, X é o núcleo alvo, Y é o núcleo residual e y é a partícula emitida.

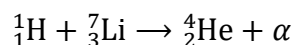
Esta reação pode ser escrita



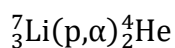
então



e para

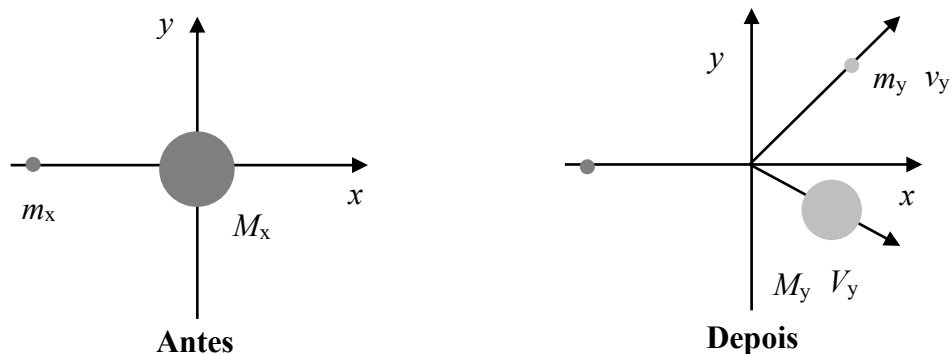


temos



6.3.1 A cinética das reações nucleares

Vamos considerar as condições necessárias para uma reação nuclear.



Da lei de conservação de energia

$$m_x c^2 + K_x + M_X c^2 + K_X = M_Y c^2 + K_Y + m_y c^2 + K_y$$

O valor de Q da reação é a mudança líquida na energia cinética:

$$Q = K_Y + K_y - K_x = (m_x + M_X - M_Y - m_y)c^2$$

assumindo que o núcleo alvo está em repouso ($K_X = 0$).

Se

$Q > 0$ - reação exotérmica

$Q < 0$ - reação endotérmica

Para obter Q medimos K_x , K_y e K_Y .

Contudo,

K_Y é difícil medir.

Então, usamos a conservação de momento linear para eliminar K_Y .

Agora

$$m_x v_x = m_y v_y \cos \theta + M_Y V_Y \cos \varphi$$

$$0 = m_y v_y \sin \theta - M_Y V_Y \sin \varphi$$

então

$$M_Y^2 V_Y^2 = m_x^2 v_x^2 + m_y^2 v_y^2 - 2m_x m_y v_x v_y \cos \theta$$

Usando as relações de energia cinética, obtemos

$$K_Y = \frac{m_x K_x}{M_Y} + \frac{m_y K_y}{M_Y} - \frac{2}{M_Y} (m_x m_y K_x K_y)^{1/2} \cos \theta$$

Substituindo na expressão para Q

$$\begin{aligned} Q &= K_Y + K_y - K_x \\ &= K_y \left(1 + \frac{m_y}{M_Y} \right) - K_x \left(1 - \frac{m_x}{M_Y} \right) - \frac{2}{M_Y} (m_x m_y K_x K_y)^{1/2} \cos \theta \end{aligned}$$

que é uma equação quadrática em $\sqrt{K_y}$

e

$$\sqrt{K_y} = \frac{\sqrt{m_x m_y}}{M_Y + m_y} \sqrt{K_x} \cos \theta \pm \sqrt{\left[\frac{m_x m_y}{(M_Y + m_y)^2} K_x \cos^2 \theta + \left(\frac{M_Y - m_x}{M_Y + m_y} \right) K_x + \frac{M_Y Q}{M_Y + m_y} \right]}$$

Para que a reação ocorra

$$K_y > 0$$

ou

$$\frac{m_x m_y}{(M_Y + m_y)^2} K_x \cos^2 \theta + \left(\frac{M_Y - m_x}{M_Y + m_y} \right) K_x + \frac{M_Y Q}{M_Y + m_y} > 0$$

Para reações **endotérmicas**, $Q < 0$ e então

$$\frac{m_x m_y}{(M_Y + m_y)^2} K_x \cos^2 \theta + \left(\frac{M_Y - m_x}{M_Y + m_y} \right) K_x > \frac{M_Y Q}{M_Y + m_y}$$

ou

$$K_x > \frac{M_Y |Q|}{\left(\frac{m_x m_y}{(M_Y + m_y)} \cos^2 \theta + M_Y - m_x \right)}$$

A energia mínima para a partícula incidente é a energia limiar, e

$$K_x = \frac{(M_Y + m_y)|Q|}{(M_Y + m_y - m_x)}$$

Para reações exotérmicas, não há energia limiar.

Exemplo

Na reação de Rutherford, $K_x = 7.7$ MeV. Os prótons emitidos a 90° têm energias $K_y = 4.44$ MeV. Determine Q .

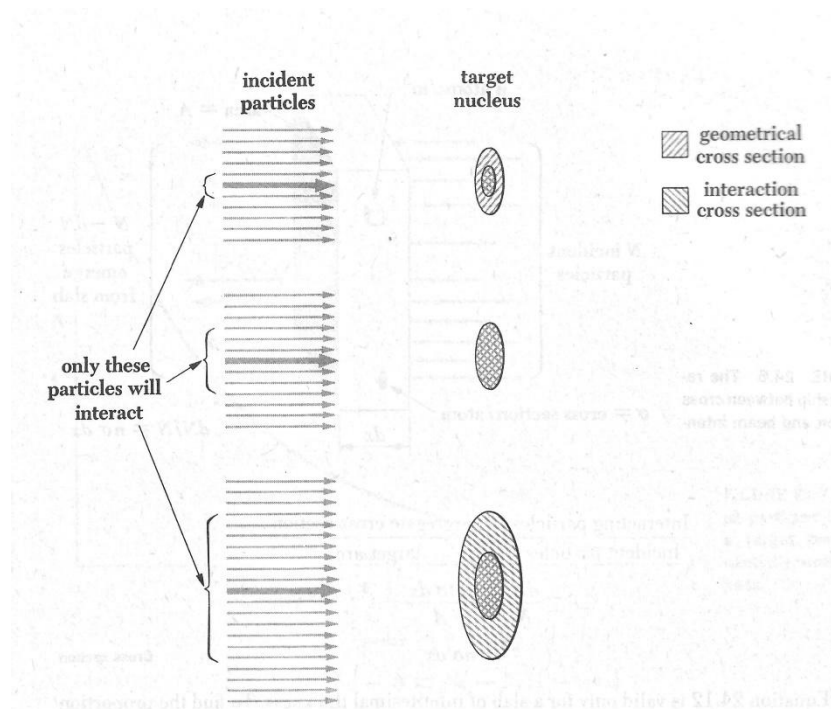
Solução

$$\begin{aligned} Q &= K_y \left(1 + \frac{m_y}{M_Y} \right) - K_x \left(1 - \frac{m_y}{M_Y} \right) \\ &= 4.44 \left(1 + \frac{1}{17} \right) - 7.7 \left(1 - \frac{4}{17} \right) \\ &= -1.18 \text{ MeV} \end{aligned}$$

- endotérmica.

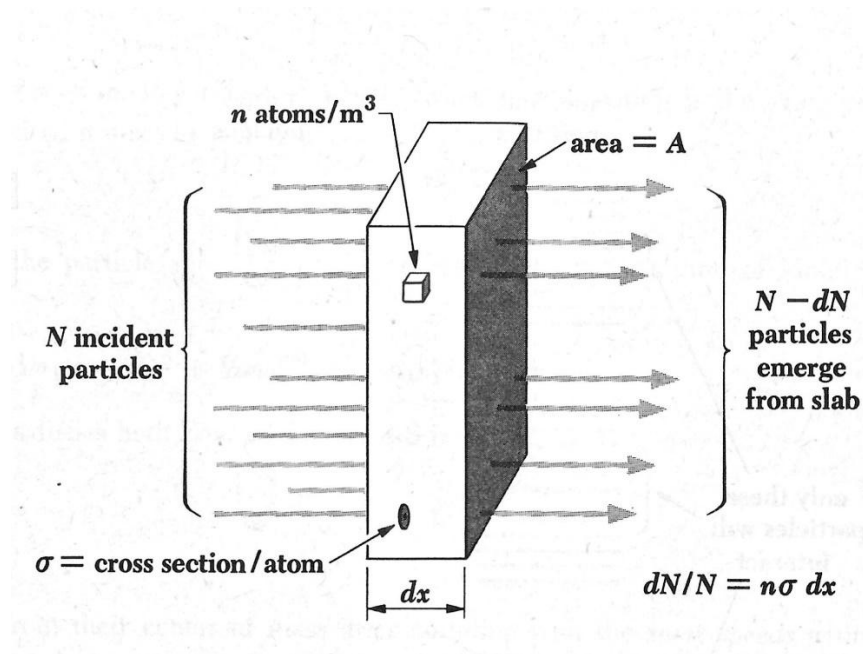
6.3.2 Probabilidade de reações

Considere um feixe de partículas incidentes num alvo.



Só uma fração muito pequena das partículas do feixe produzem reações nucleares.

Vamos considerar que o núcleo é representado por um “disco” de seção eficaz σ e que há n núcleos por unidade de volume.



O número de discos por unidade de área é ndx e estes têm uma fração

$$f = ndx\sigma A/A$$

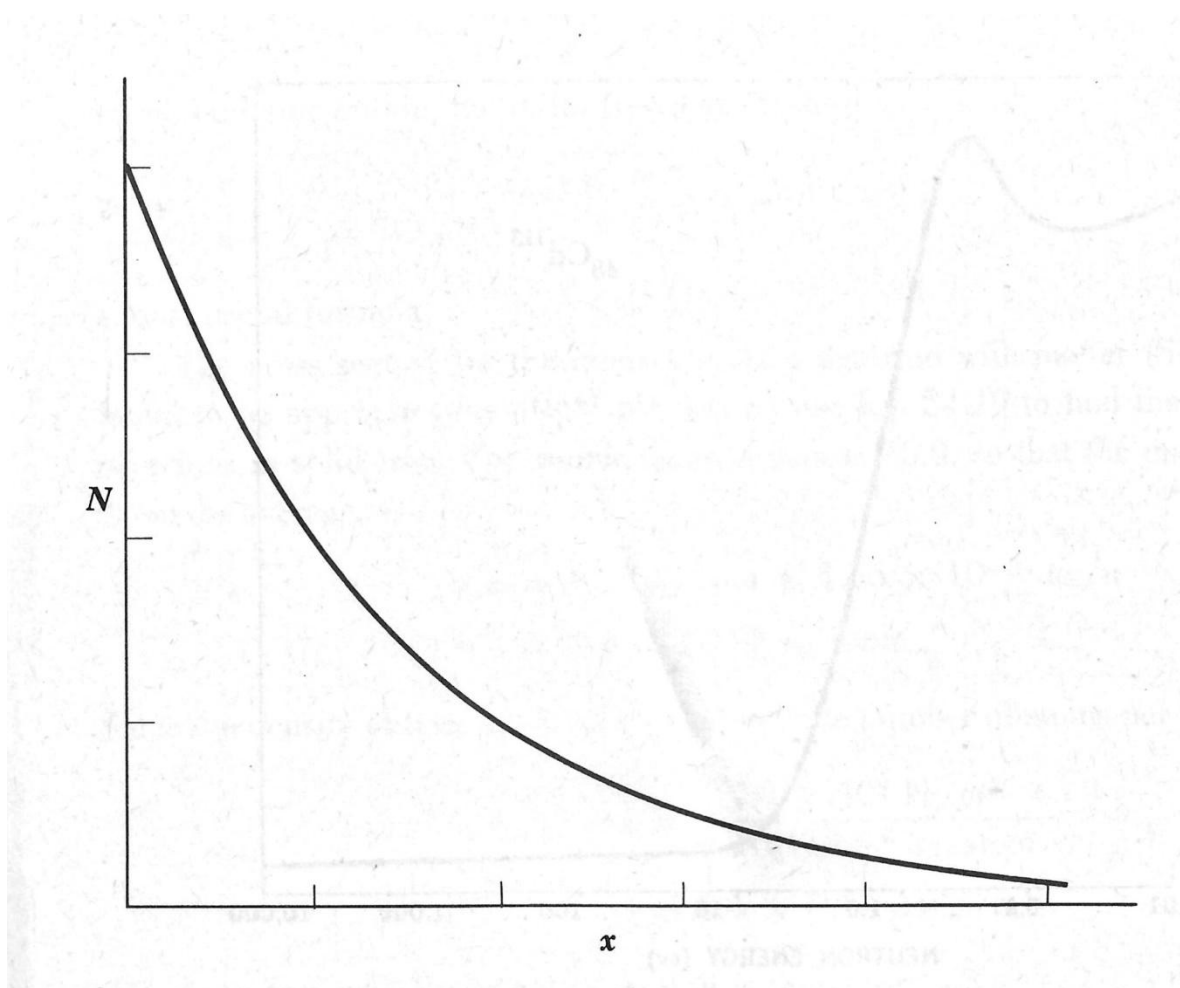
da área total do alvo.

Mas esta fração deve ser igual à fração das partículas reagentes para partículas incidentes e

$$f = -\frac{dN}{N} = ndx\sigma$$

Agora, quando $x = 0$, $N = N_0$ e

$$N = N_0 e^{-n\sigma x}$$



O número de partículas que sofreram interações no alvo é

$$N_0 - N = N_0(1 - e^{-n\sigma x})$$

Com x pequeno,

$$e^{-n\sigma x} \approx 1 - n\sigma x$$

e

$$N_0 - N \approx N_0 n \sigma x$$

Normalmente, σ é medida em

- barns

e

$$1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$$

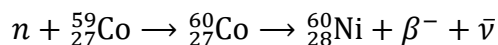
Finalmente, a velocidade de uma reação nuclear é definida como o número de reações nucleares numa unidade de tempo.

Assumindo uma intensidade de partículas incidentes, I_0 , a velocidade é dada por

$$R = I_0 n \sigma A x = I_0 n \sigma V$$

Exemplo

Considere a reação nuclear



A amostra de ${}^{59}_{27}\text{Co}$ tem uma massa 10^{-4} kg e $I_0 = 10^{18}$ neutrões $\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$ durante um período de 60 s. Calcule o número de átomos radioativos de ${}^{60}_{27}\text{Co}$ (tempo de semi-vida 5.26 a) depois da irradiação ($\sigma = 19 \text{ b}$, $\rho = 8.71 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ e a massa atómica de 58.933).

Solução

$$\begin{aligned} R &= I_0 n \sigma V \\ &= I_0 \frac{\rho N_A}{A} \sigma \frac{M}{\rho} \\ &= 10^{18} \frac{8.71 \times 10^3 \cdot 6.02 \times 10^{26}}{58.933} \cdot 19 \times 10^{-28} \cdot \frac{0.0001}{8.71 \times 10^3} \\ &= 19.95 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

Num minuto

$$\begin{aligned} N &= R \times \Delta t \\ &= 19.95 \times 10^{11} \cdot 60 \\ &= 12 \times 10^{13} \text{ núcleos de } {}^{60}_{27}\text{Co} \end{aligned}$$

6.3.3 Efeitos biológicos de radiações ionizantes

Nos organismos biológicos, a radiação provoca danos nas células:

- São produzidos iões e/ou radicais que são altamente reativos e ao participar em reações químicas, podem interferir com o normal metabolismo da célula.

Há dois tipos de danos provocados pela radiação nos organismos biológicos:

1. Danos somáticos:

- Danos em qualquer parte do corpo exceto nas células reprodutivas.

Podem provocar:

- cancro a doses altas de radiação,
- efeitos tóxicos de radiação (náusea, fadiga, perda de cabelo, etc)
- morte.

2. Danos genéticos:

Danos nas células reprodutivas.

Podem provocar

- mutações nos genes das células com consequências graves na descendência.

O corpo tem a capacidade de remover substâncias estranhas por excreção num determinado intervalo de tempo, dependendo na natureza química do composto, e há um tempo de semi-vida biológica associado com este processo.

O tempo de semi-vida efetiva de um radio-isótopo num paciente é uma combinação dos tempos de semi-vida nuclear e biológica dado por

$$\frac{1}{T(\text{efetivo})} = \frac{1}{T(\text{nuclear})} + \frac{1}{T(\text{biológico})}$$

TABLE 30.2 Nuclear, Biological, and Effective Half-Lives of Selected Isotopes (days)

Isotope	$T(\text{nuclear})$	$T(\text{biological})$	$T(\text{effective})$
^3H	4.5×10^3	12	12
^{14}C	2.1×10^6	40	40
^{22}Na	850	11	11
^{32}P	14.3	1155	14.1
^{35}S	87.4	90	44.3
^{36}Cl	1.1×10^8	29	29
^{45}Ca	165	1.8×10^4	164
^{59}Fe	45	600	42
^{60}Co	1.93×10^3	10	10
^{65}Zn	244	933	193
^{86}Rb	18.8	45	13
^{90}Sr	1.1×10^4	1.8×10^4	6.8×10^3
$^{99\text{m}}\text{Tc}$	0.25	1	0.20
^{123}I	0.54	138	0.54
^{131}I	8.0	138	7.6
^{137}Cs	1.1×10^4	70	70
^{140}Ba	12.8	65	10.7
^{198}Au	2.7	280	2.7
^{210}Po	138	60	42
^{226}Ra	5.8×10^5	1.6×10^4	1.5×10^4
^{235}U	2.6×10^{11}	15	15
^{239}Pu	8.8×10^6	7.3×10^4	7.2×10^4

Exemplo:

A um paciente é dada uma injeção de 1.0×10^{-12} g de $^{99\text{m}}\text{Tc}$.

- Calcule o tempo de semi-vida efetiva deste rádio-isotopo.
- Calcule a atividade em curies.
- Que atividade é possível detetar no paciente, 3 dias depois da injeção?

Solução:

- O tempo de semi-vida efetiva

$$T_{\text{eff}} = \frac{T_{1/2} T_{\text{bio}}}{T_{1/2} + T_{\text{bio}}} = \frac{6.0 \times 24}{6.0 + 24} = 4.8 \text{ h}$$

- consistente com o valor de T_{eff} na tabela.

- A atividade é

$$A = \left(\frac{0.693}{T_{1/2}} \right) N = \frac{0.693}{6.02 \text{ h}} \left(\frac{6.022 \times 10^{23} \text{ núcleos/mol}}{99 \text{ g/mol}} \right) (1.0 \times 10^{-12} \text{ g}) (1 \text{ hr}/3600 \text{ s})$$

$$= 1.94 \times 10^5 \text{ decaimentos/s ou } 5.2 \mu\text{Ci}.$$

- Um período de 3 dias é 72 horas ou 15 vezes o tempo de semi-vida efetiva. A atividade que fica no paciente depois de 3 dias é obtido por dividindo 5.2 mCi por 2 quinze vezes, ou $A = 1.6 \times 10^{-10} \text{ Ci}$.

Vamos agora quantificar o efeito da radiação no tecido vivo.

A *dose absorvida*, D , é a energia absorvida, E , por unidade de massa, m , de matéria

$$D = \frac{E}{m}$$

A dose absorvida é um parâmetro importante uma vez que as alterações que ocorrem a nível biológico são dependentes da energia que é transmitida para o tecido quando irradiado.

Unidades: J / kg (ou Gy - Gray)

ou

rad (*radiation absorbed dose*) onde 1 rad = 0.01 Gy.

A *exposição* X , é utilizada para radiação X ou γ (com energia > 3 MeV) e é

a carga total Q produzida devido a fenómenos de ionização numa unidade de massa de ar, m , seco à temperatura de 0 °C e à pressão de 1 atm e

$$X = \frac{Q}{m}$$

Unidades: C / kg ou R (Roentgen).

Há uma relação simples entre D e X :

$$D = fX$$

onde f é um fator de conversão que depende:

- do material que absorve a radiação, ou seja, do seu número atómico;
- da energia do fóton incidente;
- do efeito de interação das radiações ionizantes predominante com os átomos do tecido.

Finalmente, os danos biológicos da radiação não só da energia da radiação transferida para o meio mas também da *distribuição* dessa energia libertada.

- temos de introduzir o *fator de qualidade* Q , e

$$H = QD$$

Unidades: J / kg (ou Sievert, Sv)

rem (1 rem = 0.01 Sv).

Os fatores de qualidade são dados para os diversos tipos de radiação e dependem da forma como a mesma interatua com a matéria.

Para raios-X, γ e β (de energia muito elevada) $Q = 1$, neutrões $Q = 10$, partículas α , $Q = 20$.

TABLE 31.2 Immediate Effects of Radiation on Adults

Dose (rem)	Whole body, single exposure
0–100	No observable effect
10–100	Slight decreases in white blood cell counts
35–50	Temporary sterility; 35 for women, 50 for men
100–200	Significant reduction in blood cell counts, brief nausea, and vomiting; rarely, if ever, fatal
200–500	Nausea, vomiting, hair loss, severe blood damage, hemorrhage
450	Lethal to 50% (LD_{50}), within 30 days if untreated
500–2000	Worst effects due to malfunctions of small intestine and blood systems; survival possible, if treated
>2000	Fatal within hours from collapse of central nervous system and gastrointestinal system

Embora a radiação ionizante possa ser prejudicial às células do corpo humano, pode ser usada em alguns casos para fins médicos.

Marcadores radioativos são usados para revelar a estrutura e a função de tecidos ou órgãos. Consistem geralmente num isótopo radioativo emissor de radiação gamma ligado a uma substância que usada pelo corpo (por exemplo, a glucose ou a água).

O isótopo é injetado no paciente (ou tomado oralmente) e desloca-se ao longo do corpo até a região alvo. A radiação emitida é registada por uma câmara de radiação gamma dando origem a uma imagem do interior do paciente.

Medical tracer	Where in the body it is used	Physical half-life	Radiation emitted	Energy of gamma radiation emitted
Technetium-99m	Range of organs	6 hours	Gamma	140 keV
Iodine-131	Thyroid	8 days	Beta and gamma	360 keV
Indium-111	Antibodies and blood cells	2.8 days	Gamma	170 or 250 keV

O Tecnécio-99m tem uma semi-vida nuclear muito curta para ser transportado. Por esta razão os hospitais recebem geradores de Molibdénio-Tecnécio.

O Molibdénio tem uma semi-vida de 66 horas e decai para o Tecnécio.

No gerador o Molibdénio encontra-se combinado com óxido de alumínio. O Tecnécio que vai sendo gerado não se combina com este óxido pelo que pode ser removido do gerador por lavagem com uma solução salina. Esta solução salina que contem Tecnécio é injetada no paciente.

Problemas

- 1 Calcule os valores de Q para as seguintes reacções. Quais são endotérmicas e quais são exotérmicas?
(a) $^{10}\text{B}(\alpha, p)^{13}\text{C}$; (b) $^{27}\text{Al}(\alpha, d)^{29}\text{Si}$; (c) $^9\text{Be}(d, n)^{10}\text{B}$; (d) $^{15}\text{B}(d, n)^{16}\text{O}$
- 2 Uma das reacções nucleares que ocorre quando Boro é bombardeado com núcleos de deutério com energias de 1.51 MeV é $^{11}\text{B}(d, \alpha)^9\text{Be}$. A partícula α emitida a um ângulo de 90° com a direcção das partículas incidentes têm uma energia cinética de 6.37 MeV. Calcule o valor Q da reacção nuclear.
- 3 O valor Q para a reacção nuclear $^{19}\text{F}(n, p)^{19}\text{O}$ é -3.9 MeV, e a energia dos neutrões incidentes é 10 MeV.
(a) Qual é a energia dos prótons emitidos num ângulo de 90° com a direcção das partículas incidentes?
(b) Qual é a energia limiar da reacção?
(Massa atómica de ^{19}O é 18.99 mu e de ^{19}F é 18.9984 mu)
- 4 Qual é a espessura de alumínio necessária para reduzir a intensidade de um feixe de neutrões de energia 0.025 eV a:
(a) 1/10; (b) 1/100; (c) 1/1000
da sua intensidade inicial? (Densidade de Alumínio é 2.7 g cm^{-3} , e $\sigma=0.23 \text{ b}$)
- 5 Uma folha de ^{59}Co , de espessura 0.03 cm e área de 1 cm^2 é ser irradiada com uma feixe de neutrões de intensidade $10^{16} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Se a secção eficaz for 30 b, calcule o tempo de irradiação necessário para produzir 276 mCi do isótopo ^{60}Co . (O tempo de semi vida do ^{60}Co é 5.2 a e a densidade do ^{59}Co é $8.9 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$).
- 6 0.001 kg de ^{146}Nd é exposto durante quatro dias num reactor nuclear a um fluxo de 10^{17} neutrões $\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1}$. A abundância do ^{146}Nd é 17.22% e $\sigma=2 \text{ b}$ para neutrões térmicos. Qual é a quantidade de ^{147}Nd formado na seguinte reacção nuclear,
 $^{146}\text{Nd} + n \rightarrow ^{147}\text{Nd} \rightarrow ^{147}\text{Pm}$

Qual é a actividade depois da irradiação? (O tempo de semi vida do ^{147}Nd é 11.1 dias, massa atómica do ^{146}Nd é 145.91 mu e a densidade do ^{146}Nd é $6.9 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$)
- 7 Calcule a energia libertada na fusão de um núcleo de deutério com um núcleo de trítio de que resulta uma partícula α e um neutrão. (Massa atómica do deutério é 2.01410mu, do trítio é 3.01605 mu e do hélio é 4.0026 mu).
8. O isótopo de estrôncio ^{90}Sr tem tempo de semi-vida de 28,5 anos e entra no corpo através da cadeia alimentar, acumulando-se nos ossos e apresentando um sério risco para a saúde. Quanto tempo levará para que 99.99% do Sr liberado num acidente de reator nuclear desapareça?
9. Qual é a atividade nuclear de um adulto de massa 70 kg resultante da radioatividade natural de ^{40}K ? O conteúdo total de potássio é de 0.35% da massa corporal e apenas 0.012% desse potássio é de ^{40}K . O tempo de semi-vida de ^{40}K é de 1.25×10^9 anos.
10. Calcule o aumento da temperatura corporal devido à energia depositada por uma dose grande de raios X recebida acidentalmente por um técnico. Suponha que a energia dos raios X é de

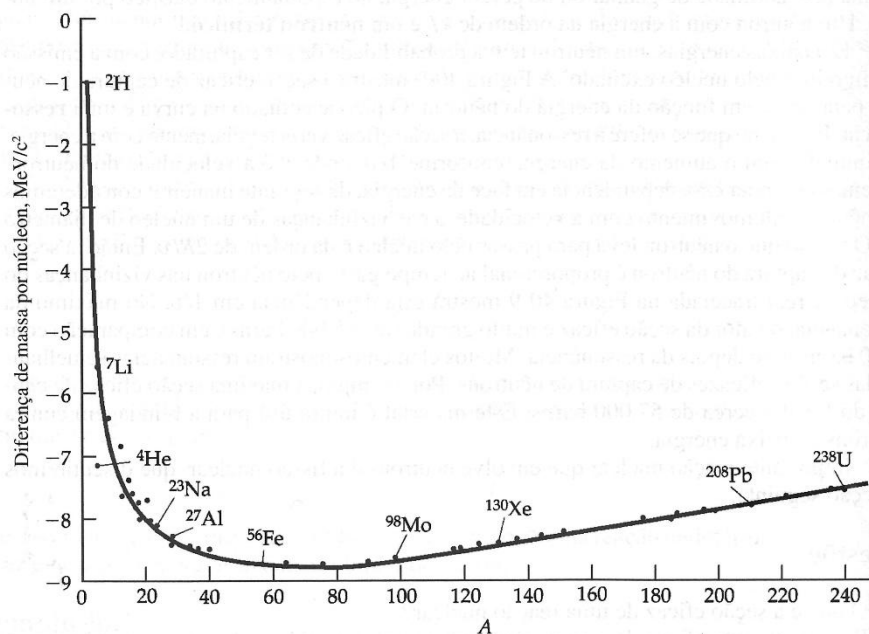
200keV e 3.13×10^{14} deles são absorvidos por quilograma de tecido e o calor específico do tecido é $3\,469.4 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

11. Uma determinada fonte radioativa produz 150 mrads de raios- γ de 2.5 MeV por hora a uma distância de 1 m.
 - (a) Quanto tempo uma pessoa poderia ficar a esta distância antes de acumular uma dose intolerável de 1 rem?
 - (b) Supondo que a radiação gama seja emitida isotropicamente, a que distância uma pessoa receberia uma dose de 15 mrads/h desta fonte?
12. Um tumor de 2.5 kg está a ser irradiado por uma fonte radioativa. O tumor recebe uma dose de 15 Gy num intervalo de tempo de 1000 s. Cada desintegração da fonte radiativa produz uma partícula que entra no tumor e entrega uma energia de 0.45 MeV. Qual é a atividade da fonte radioativa?

6.4 Fissão, fusão e reatores nucleares

Fusão e fissão são dois tipos especiais de reações nucleares.

Considere a curva:



que é o negativo da curva da energia de ligação por nucleão.

Agora,

- a massa em excesso, por nucleão, dos núclídeos muito pesados / muito leves

>

- a massa em excesso, por nucleão, dos núclídeos de massas intermédias.

Assim,

- quando um núcleo muito pesado se divide em dois núcleos mais leves (fissão)

ou

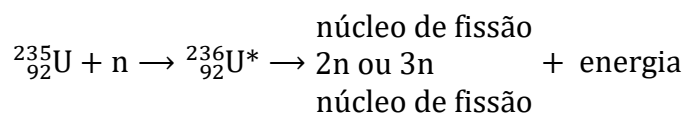
- quando dois núcleos muito leves se fundem para formar um núcleo mais pesado (fusão)

há libertação de energia.

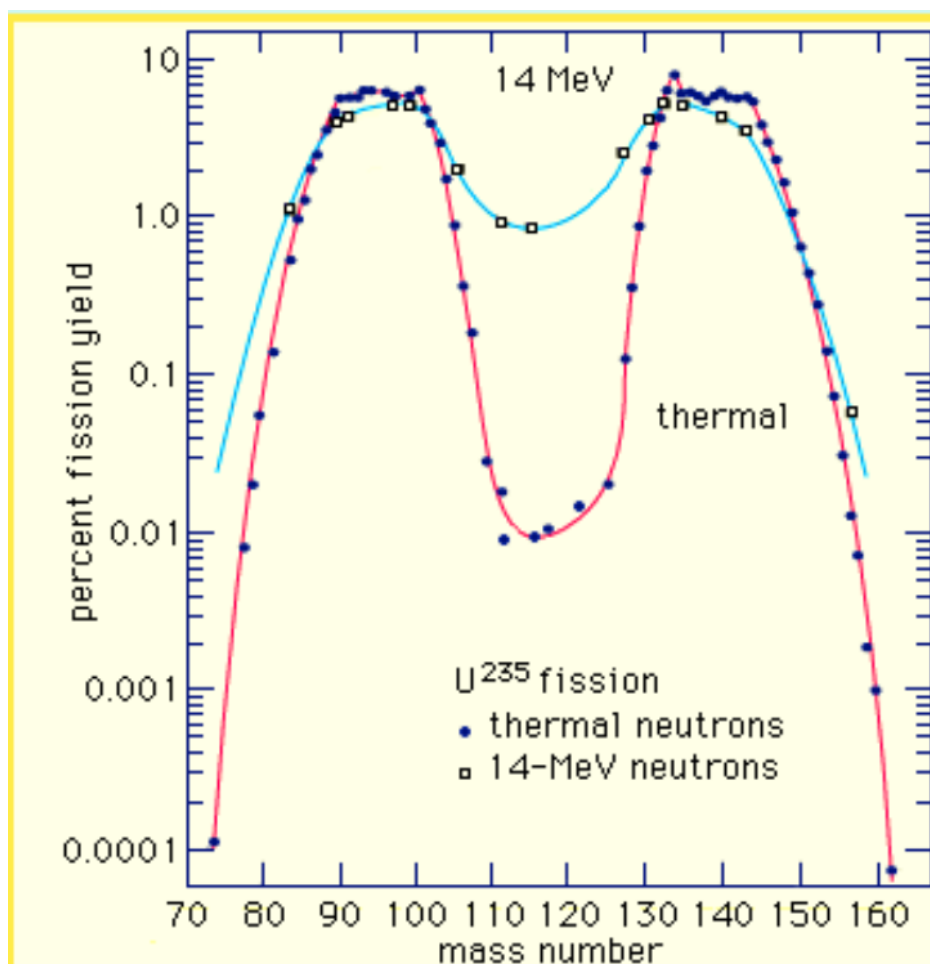
6.4.1 Fissão e fusão nuclear

Na **fissão nuclear**, um núcleo pesado absorve um neutrão que se encontra em movimento lento e parte-se em dois ou mais fragmentos de tamanho semelhantes.

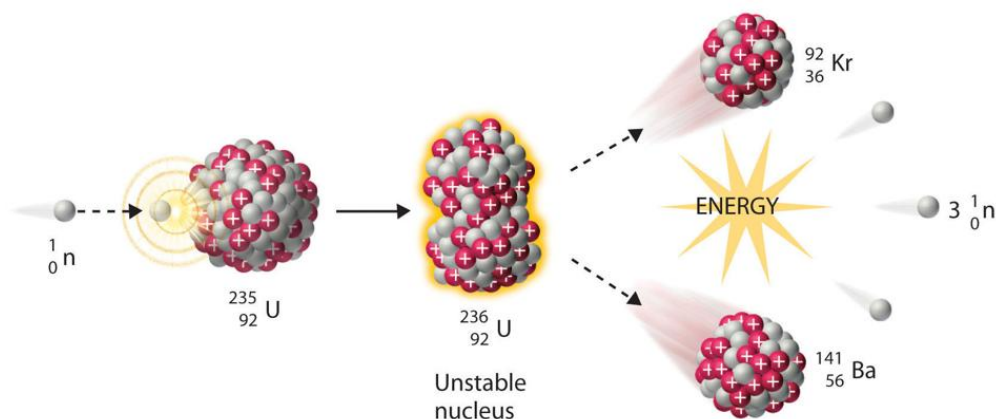
Por exemplo:



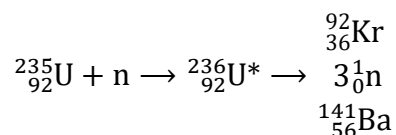
${}_{92}^{236}\text{U}^*$ é um núcleo composto que pode produzir uma grande gama de núcleos de fissão:



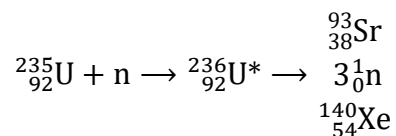
Um processo típico é



ou



Para a reação:



A energia libertada é

$$\text{BE}({}_{92}^{235}\text{U}) = 235 \times 7.5 = 1762.5 \text{ MeV}$$

$$\text{BE}({}_{38}^{93}\text{Sr}) = 93 \times 8.6 = 799.8 \text{ MeV}$$

$$\text{BE}({}_{54}^{140}\text{Xe}) = 140 \times 8.3 = 1162.0 \text{ MeV}$$

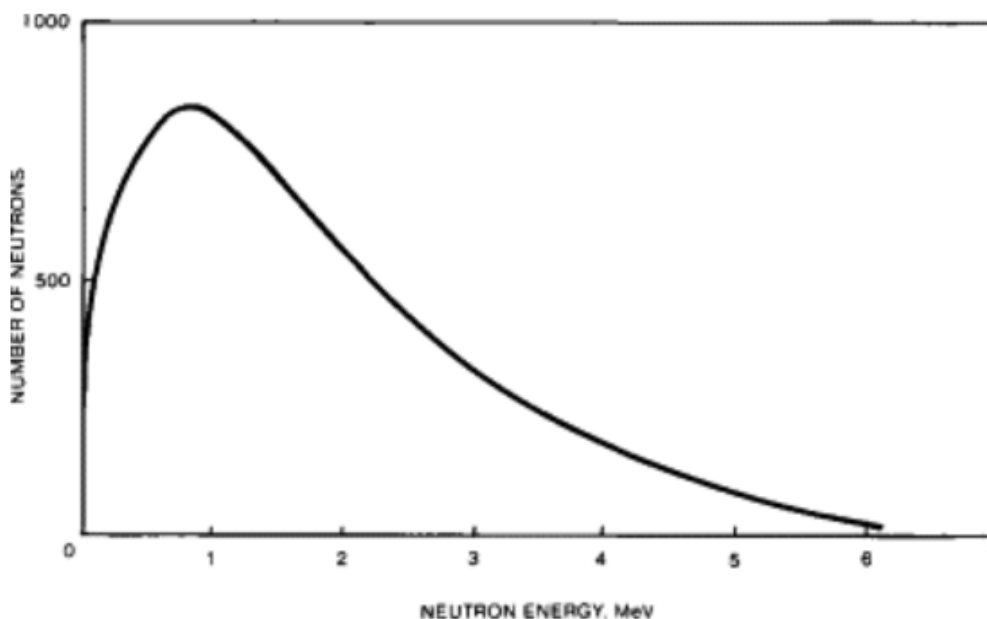
$$Q = (799.8 + 1162.0) - 1762.5 = 199.3 \text{ MeV}$$

- aproximadamente 200 MeV que aparece essencialmente sob a forma de energia cinética dos fragmentos de fissão dos neutrões ejetados, uma quantidade enorme de energia (reações químicas de combustão é $\sim 4 \text{ eV}$).

Se consideramos um grande número de fissões,

- o número médio de neutrões produzidos por fissão, k , é 2.44;

- as energias dos neutrões emitidos no processo de fissão têm uma distribuição de Maxwell:



e os neutrões têm energias da ordem de 1 MeV.

Os núcleos de maior interesse em fissão nuclear são

- Urânio, Plutónio, Tório

Para Urânio e Plutónio:

Os núcleos de A ímpar:

- $^{233}_{92}\text{U}$, $^{235}_{92}\text{U}$, $^{239}_{94}\text{Pu}$, e $^{241}_{94}\text{Pu}$

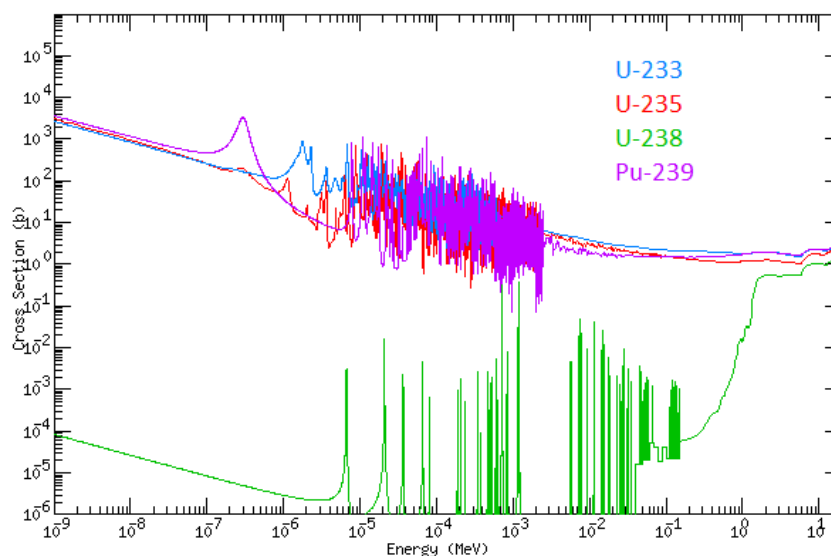
sofrem fissão com neutrões de qualquer energia mas

os núcleos de A par:

- $^{232}_{92}\text{U}$, $^{238}_{92}\text{U}$, $^{240}_{94}\text{Pu}$ e $^{242}_{94}\text{Pu}$

apenas são cindíveis com neutrões de energias > 1 MeV.

Em termos das seções eficazes:



Para $^{235}_{92}\text{U}$

- σ_f é elevada para neutrões lentos e baixa para neutrões rápidos
- para neutrões lentos $\sigma_f \propto 1/v$
- para neutrões intermédios σ_f apresenta picos de ressonância acentuados.

Exemplo

Calcule a quantidade de energia da fissão de 1 g de $^{235}_{92}\text{U}$ em MWD.

Solução

A energia de uma fissão de um átomo de $^{235}_{92}\text{U}$

$$\begin{aligned} E_f &= 200 \text{ MeV} \\ &= 3.2 \times 10^{-11} \text{ J} \end{aligned}$$

1 g de $^{235}_{92}\text{U}$ contém

$$6.02 \times 10^{23} / 235.04 = 2.16 \times 10^{21}$$

átomos.

Portanto 1 g de $^{235}_{92}\text{U}$ gera

$$3.2 \times 10^{-11} \cdot 2.16 \times 10^{21} = 5.21 \times 10^{10} \text{ J} = 0.95 \text{ MWD} \approx 1 \text{ MWD}$$

Em **fusão nuclear**, dois núcleos leves ($A < 8$) combinam-se para formar um núcleo pesado também com a libertação de uma quantidade enorme de energia. Estes tipos de reações ocorrem no Sol e nas estrelas.

6.4.2 Reatores nucleares

Considerando a aplicação de fissão nuclear – os reatores nucleares.

A viabilidade do recurso às reações de fissão nuclear para produzir energia depende da possibilidade de **autossustentação em cadeia**.

Temos de ter um balanço equilibrado entre

$$\begin{array}{l} \text{o número de neutrões produzidos por unidade de tempo} \\ \text{o número de neutrões perdidos por unidade de tempo} \end{array} \Leftrightarrow$$

A perda pode ser devida à absorção estéril e fuga do meio onde os neutrões são produzidos.

Então

Pelo menos $k = 1$ neutrão dos neutrões libertados em cada fissão deve dar lugar a uma nova fissão.

Se $k < 1$ a reação em cadeia extinguir-se-á.

Se $k > 1$ a reação em cadeia propagar-se-á a um ritmo acelerado.

k é o **fator de multiplicação**.

Um reator nuclear é um dispositivo em que uma reação de fissão em cadeia autossustentada pode ser mantida e controlada.

Uma vez que os neutrões emitidos na fissão

- têm energias ~ 1 MeV e que
- σ_f é maior quando a energia for menor

a reação em cadeia só pode ser sustentada se os neutrões forem abrandados antes de fugirem do reator.

No **urânio natural** os isótopos principais são

- $^{235}_{92}\text{U}$	0.72 %
- $^{238}_{92}\text{Pu}$	99.27 %

A fissão de $^{235}_{92}\text{U}$ produz aproximadamente 2.44 neutrões.

Se só um destes neutrões de fissão puder provocar fissão num outro núcleo de $^{235}_{92}\text{U}$, existe a hipótese de se estabelecer uma reação em cadeia autossustentada.

Contudo, se utilizamos urânio natural, vai haver problemas:

- os neutrões produzidos na fissão nuclear têm uma energia média ~ 2 MeV e a fissão de $^{235}_{92}\text{U}$ é possível com um neutrão de qualquer energia (2.44 neutrões por fissão)

e

- a fissão de $^{238}_{92}\text{U}$ é possível com um neutrão de energia superior a ~ 0.8 MeV (2.88 neutrões por fissão)

Contudo vamos considerar os processos possíveis com urânio natural ($^{238}_{92}\text{U}$ e $^{235}_{92}\text{U}$) com neutrões com energias 1 MeV

Processo	σ_f $^{238}_{92}\text{U}$	σ_f $^{235}_{92}\text{U}$	Σ	%
Dispersão inelástica	2.53	1.8	12.09	80.1
Fissão nuclear	0.57	1.32	2.76	18.3
Captura radiativa	0.05	0.05	0.24	1.6

Σ é a seção eficaz macroscópica

- o tipo de interação mais frequente é a dispersão inelástica com a diminuição da energia dos neutrões para aquém da energia limiar de fissão do $^{238}_{92}\text{U}$.

Também, apenas 18.3 % do número total de interações dos neutrões dão lugar a fissão nuclear.

Para assegurar reações em cadeia seria necessário que as reações de fissão nuclear ocorressem em

$$\frac{1}{2.88} \times 100 = 36 \%$$

dos casos.

Então, não é possível autossustentar uma reação de fissão nuclear em cadeia utilizando apenas urânio natural.

Só é possível ter reações em cadeia autossustentadas com urânio natural se

1. O bloco de urânio for altamente enriquecido em $^{235}_{92}\text{U}$.

Na interação dos neutrões de fusão com neutrões de $^{235}_{92}\text{U}$ 41.6 % dos casos ocorrem fissões.

Agora

$$\frac{1}{2.44} \times 100 = 40 \%$$

é o limite a partir do qual a reação em cadeia pode ser autossustentada. Então com enriquecimento de $^{235}_{92}\text{U}$ autossustentação é possível – **Reatores a neutrões rápidos**.

2. a energia dos neutrões for diminuída através de reações de dispersão

Neste caso, a probabilidade de se darem fissões aumenta – **Reatores a neutrões térmicos**.

Então pode-se atingir um ponto onde é possível a autossustentação.

O processo de diminuição de energia dos neutrões por dispersão elástica envolve

- a colisão dos neutrões com núcleos em repouso e a transferência da sua energia para estes núcleos.

Então, se fosse possível submeter os neutrões de fissão a um processo de dispersão tal que a sua energia se reduza drasticamente em poucas interações, uns grandes números de neutrões rápidos seriam convertidos em neutrões lentos, escapando aos picos de ressonância característicos.

Então, a probabilidade de se darem fissões no $^{235}_{92}\text{U}$ é acrescida, eventualmente a ponto de ser possível autossustentar a reação em cadeia.

Por isso, é preciso um

- **moderador**

que é um material como

- água ou grafite

que contém muitos núcleos leves, a fim de abrandar os neutrões até que estejam em equilíbrio térmico.

A água pesada (D_2O) é usada como moderador, embora seja um material caro.

6.4.2.1 Reatores comerciais

Reatores nucleares podem ser classificados como

- Reatores de neutrões rápidos
- Reatores de neutrões térmicos ou reatores “Breeder”

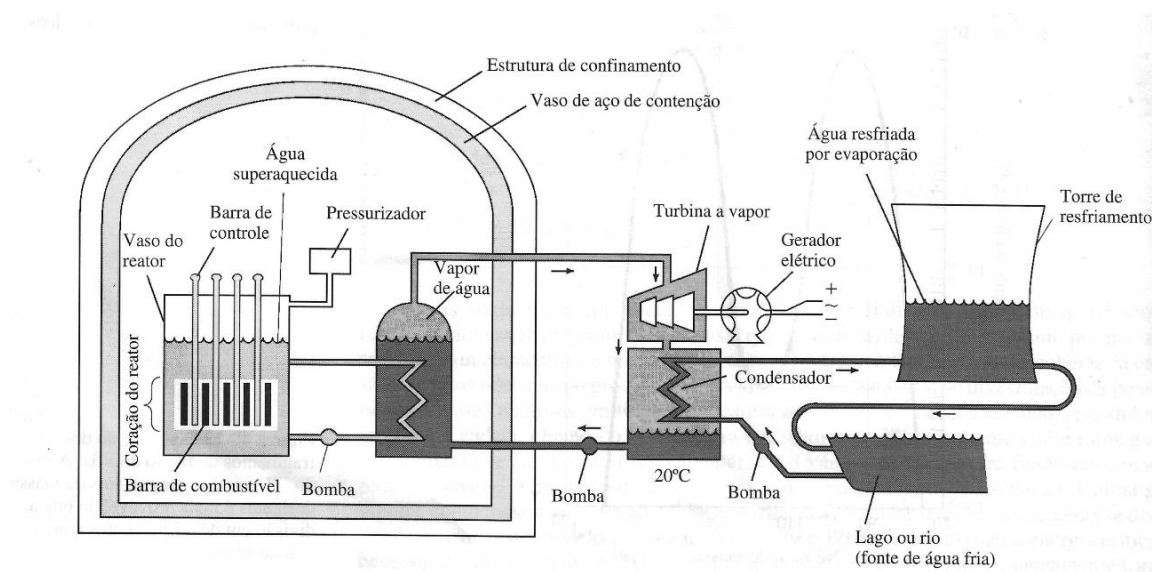
A maioria dos reatores é do segundo tipo e estes são os reatores comerciais. Há dois tipos:

- Reatores “Gas cooled”, incluindo reatores “Magnox”
- Reatores “Water cooled”

Um reator nuclear é essencialmente uma associação de elementos de combustível à base de materiais cindíveis, dispondo de meios para controlar a taxa de fissão. O calor resultante da fissão é removido por um fluido refrigerante.

Uma vez que o núcleo do reator é intensamente radioativo, torna-se necessário envolvê-lo com uma blindagem para proteger o pessoal dos neutrões e da radiação γ .

Os componentes principais de um reator a água pressurizada são:



1. Coração do Reator:

- Barras de combustível: contêm combustível nuclear, normalmente urânio-235
- Barras de controle: feitas de materiais como boro ou cádmio, absorvem neutrões para regular o processo de fissão.
- Moderador: A água desacelera os neutrões para sustentar a reação nuclear em cadeia.

2. Vaso de pressão do reator:

- Um contentor robusto que abriga o núcleo do reator e mantém condições de alta pressão.

3. Sistema de refrigeração:

- Circuito Primário: Circula a água através do coração para absorver o calor gerado pela fissão.
- Circuito Secundário: Transfere calor do circuito primário para gerar vapor.

4. Gerador de Vapor:

- Converte água aquecida em vapor para produção de eletricidade em reatores de água pressurizada (PWRs).

5. Turbina e gerador:

- O vapor aciona a turbina, que aciona o gerador para produzir eletricidade.

6. Condensador:

- Resfria e condensa o vapor de volta em água para reutilização.

7. Estrutura de contenção:

- Uma estrutura reforçada que envolve o reator para evitar a liberação de radiação.

8. Torres de resfriamento:

- Dissipar o excesso de calor para a atmosfera.

Esses componentes trabalham juntos para garantir a produção eficiente de energia, mantendo a segurança e o controlo.

O controlo do reator envolve a regulação do processo de fissão nuclear para manter uma produção de energia estável, manipulando o fator de multiplicação do reator, k .

Para operação constante do reator,

$$k \approx 1$$

o que significa que o reator é crítico, com nível de potência estável.

Isto é conseguido através de

- barras de controlo, que são inseridas ou retiradas do núcleo do reator para absorver neutrões e ajustar a taxa de fissão.

- o sistema de resfriamento do reator também ajuda a controlar a temperatura, afetando a densidade da água e, portanto, a moderação dos neutrões.

Se

$$k > 1$$

o reator torna-se supercrítico, aumentando a potência, enquanto

$$k < 1$$

o reator torna-se subcrítico, reduzindo a potência.

O controlo só é possível por serem neutrões retardados alguns neutrões emitidos no processo de fissão. O tempo necessário para abrandar um neutrão de

- 1 MeV \rightarrow energias térmicas

é da ordem de alguns ms.

Com neutrões instantâneos, não seria possível o controlo mecânico

- a reação do reator dispararia antes de ser possível a interferência das barras de controlo.

Exemplo

Se o tempo médio entre duas gerações de fissão for 1 ms, e se o fator de multiplicação for 1.001, quanto tempo será preciso para que a velocidade da reação duplique?

Solução

Agora,

$$N = N_0 k^{t/\tau}$$

onde N é a população dos neutrões no instante t , N_0 é a população dos neutrões inicial, k é o fator de multiplicação e τ o tempo entre duas gerações.

Então

$$\begin{aligned} t &= \frac{\tau}{\ln k} \ln \frac{N}{N_0} \\ &= \frac{0.001}{\ln 1.001} \ln 2 \\ &= 0.69 \text{ s} \end{aligned}$$

Exemplo

Admitindo que 0.65 % dos neutrões emitidos sejam neutrões retardados de 14 s, determine o tempo de geração médio e o tempo de duplicação se $k = 1.001$.

Solução

Uma vez que 99.35 % dos tempos de geração são de 0.001 s e 0.65 % são de 14 s, o tempo de geração médio será

$$t_m = 0.9935 \times 0.001 + 0.0065 \times 14 = 0.092 \text{ s}$$

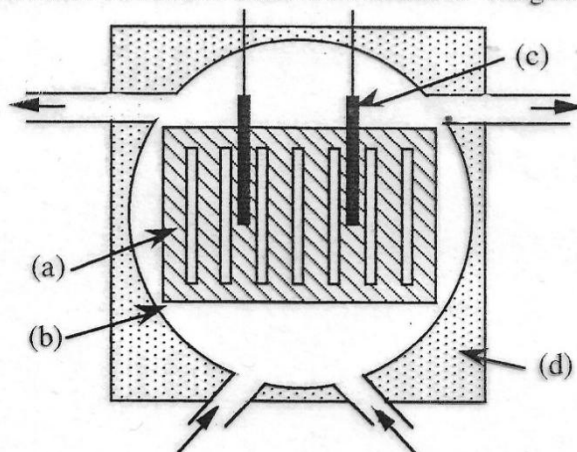
O tempo necessário para se terem 700 gerações é

$$700 \times 0.092 = 64.4 \text{ s}$$

- mais do que suficiente para a inserção mecânica das barras de controlo.

Problemas

- 1 A combustão de metano ($\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$) liberta energia de 9 eV / molécula de metano. Estime a razão entre a energia libertada por unidade de massa de combustível nuclear e combustível químico.
- 2 Considere moderadores de reactores a neutrões térmicos.
 - (a) Determine a quantidade de combustível de ^{235}U consumido por dia num reactor nuclear produzindo 1000 MW de calor.
 - (b) Quais são as características necessárias de um moderador?
- 3 Calcule a secção eficaz macroscópica de cisão, Σ , para ^{235}U . Quais são as unidades de secção eficaz macroscópica?
- 4 Determine o factor de reprodução para urânio natural com neutrões térmicos.
- 5 Porquê é que as energias dos neutrões têm de ser reduzidas em grandes passos para que estes atinjam as energias térmicas requeridas nos reactores nucleares a neutrões térmicos?
- 6 Calcule o número de átomos se o factor de reprodução, k , passa de 1 para 1.02.
- 7 Descreva as partes marcadas do reactor a neutrões térmicos "Magnox" de acordo com o diagrama:



- 8 A operação de um reactor nuclear gera resíduos radioactivos que consistem em produtos de fissão que são emissores - β . Os produtos de decaimento β destes produtos de fissão são formados em estados excitados, os quais posteriormente decaem aos estados fundamentais por emissão - γ . Para cada fissão, a taxa de libertação de energia de ionização dos produtos de decaimento a tempo t para tempos entre 1 s e 100 anos, é dada por

$$\frac{dE}{dt} = 2.66 \left(\frac{1}{t} \right)^{1.2} \text{ MeV s}^{-1}.$$
 - (a) Determine a potencia térmica média de uma barra de combustível de um reactor o qual foi parado durante um tempo t (>1 s), depois de queimar com uma potencia constante P durante um tempo T .
 - (b) Depois do seu encerramento catastrófico, o reactor nº 4 de Chernobyl esteve a produzir 3 GW de calor. Assumindo a idade média das suas barras de combustível de $T = 1$ ano, estime a potencia de saída do núcleo do reactor uma semana, um mês, e um ano após o acidente.

6.5 Efeitos biológicos de radiações ionizantes

Nos organismos biológicos, a radiação provoca danos nas células:

- São produzidos iões e/ou radicais que são altamente reativos e ao participar em reações químicas, podem interferir com o normal metabolismo da célula.

Há dois tipos de danos provocados pela radiação nos organismos biológicos:

1. Danos somáticos:

- Danos em qualquer parte do corpo excepto nas células reprodutivas.

Podem provocar:

- cancro a doses altas de radiação,
- efeitos tóxicos de radiação (náusea, fadiga, perda de cabelo, etc)
- morte.

2. Danos genéticos:

Danos nas células reprodutivas.

Podem provocar

- mutações nos genes das células com consequências graves na descendência.

O corpo tem a capacidade de remover substâncias estranhas por excreção num determinado intervalo de tempo, dependendo na natureza química do composto, e há um tempo de semi-vida biológica associado com este processo.

O tempo de semi-vida efetiva de um radioisótopo num paciente é uma combinação dos tempos de semi-vida nuclear e biológica dado por

$$\frac{1}{T(\text{efetivo})} = \frac{1}{T(\text{nuclear})} + \frac{1}{T(\text{biológico})}$$

TABLE 30.2 Nuclear, Biological, and Effective Half-Lives of Selected Isotopes (days)

Isotope	$T(\text{nuclear})$	$T(\text{biological})$	$T(\text{effective})$
^3H	4.5×10^3	12	12
^{14}C	2.1×10^6	40	40
^{22}Na	850	11	11
^{32}P	14.3	1155	14.1
^{35}S	87.4	90	44.3
^{36}Cl	1.1×10^8	29	29
^{45}Ca	165	1.8×10^4	164
^{59}Fe	45	600	42
^{60}Co	1.93×10^3	10	10
^{65}Zn	244	933	193
^{86}Rb	18.8	45	13
^{90}Sr	1.1×10^4	1.8×10^4	6.8×10^3
$^{99\text{m}}\text{Tc}$	0.25	1	0.20
^{123}I	0.54	138	0.54
^{131}I	8.0	138	7.6
^{137}Cs	1.1×10^4	70	70
^{140}Ba	12.8	65	10.7
^{198}Au	2.7	280	2.7
^{210}Po	138	60	42
^{226}Ra	5.8×10^5	1.6×10^4	1.5×10^4
^{235}U	2.6×10^{11}	15	15
^{239}Pu	8.8×10^6	7.3×10^4	7.2×10^4

Exemplo:

A um paciente é dada uma injeção de 1.0×10^{-12} g de $^{99\text{m}}\text{Tc}$.

- Calcule o tempo de semi-vida efectiva deste rádio-isotopo.
- Calcule a atividade em curies.
- Que atividade é possível detectar no paciente, 3 dias depois da injeção?

Solução:

- O tempo de semi-vida efectiva

$$T_{\text{eff}} = \frac{T_{1/2} T_{\text{bio}}}{T_{1/2} + T_{\text{bio}}} = \frac{6.0 \times 24}{6.0 + 24} = 4.8 \text{ h}$$

- consistente com o valor de T_{eff} na tabela.

- A atividade é

$$A = \left(\frac{0.693}{T_{1/2}} \right) N = \frac{0.693}{6.02 \text{ h}} \left(\frac{6.022 \times 10^{23} \text{ núcleos/mol}}{99 \text{ g/mol}} \right) (1.0 \times 10^{-12} \text{ g}) (1 \text{ hr}/3600 \text{ s})$$

$$= 1.94 \times 10^5 \text{ decaimentos/s ou } 5.2 \mu\text{Ci}.$$

- Um período de 3 dias é 72 horas ou 15 vezes o tempo de semi-vida efetiva. A atividade que fica no paciente depois de 3 dias é obtido por dividindo 5.2 mCi por 2 quinze vezes, ou $A = 1.6 \times 10^{-10} \text{ Ci}$.

Vamos agora quantificar o efeito da radiação no tecido vivo.

A *dose absorvida*, D , é a energia absorvida, E , por unidade de massa, m , de matéria

$$D = \frac{E}{m}$$

A dose absorvida é um parâmetro importante uma vez que as alterações que ocorrem a nível biológico são dependentes da energia que é transmitida para o tecido quando irradiado.

Unidades: J / kg (ou Gy - Gray)

ou

rad (*radiation absorbed dose*) onde 1 rad = 0.01 Gy.

A *exposição* X , é utilizada para radiação X ou γ (com energia > 3 MeV) e é

a carga total Q produzida devido a fenómenos de ionização numa unidade de massa de ar, m , seco à temperatura de 0 °C e à pressão de 1 atm e

$$X = \frac{Q}{m}$$

Unidades: C / kg ou R (Roentgen).

Há uma relação simples entre D e X :

$$D = fX$$

onde f é um fator de conversão que depende:

- do material que absorve a radiação ou seja do seu número atómico;
- da energia do fóton incidente;
- do efeito de interação das radiações ionizantes predominante com os átomos do tecido.

Finalmente, os danos biológicos da radiação não só da energia da radiação transferida para o meio mas também da *distribuição* dessa energia libertada.

- temos de introduzir o *fator de qualidade* Q , e

$$H = QD$$

Unidades: J / kg (ou Sievert, Sv)

rem (1 rem = 0.01 Sv).

Os fatores de qualidade são dados para os diversos tipos de radiação e dependem da forma como a mesma interatua com a matéria.

Para raios-X, γ e β (de energia muito elevada) $Q = 1$, neutrões $Q = 10$, partículas α , $Q = 20$.

TABLE 31.2 Immediate Effects of Radiation on Adults

Dose (rem)	Whole body, single exposure
0–100	No observable effect
10–100	Slight decreases in white blood cell counts
35–50	Temporary sterility; 35 for women, 50 for men
100–200	Significant reduction in blood cell counts, brief nausea, and vomiting; rarely, if ever, fatal
200–500	Nausea, vomiting, hair loss, severe blood damage, hemorrhage
450	Lethal to 50% (LD_{50}), within 30 days if untreated
500–2000	Worst effects due to malfunctions of small intestine and blood systems; survival possible, if treated
>2000	Fatal within hours from collapse of central nervous system and gastrointestinal system

Exemplo

Um tecido biológico é irradiado com raios- γ que têm um Q de 0.7. A dose absorvida de raios- γ é de 850 rads. O tecido é então exposto a neutrões cujo Q é 3.5. A dose equivalente dos neutrões é a mesma dos raios- γ . Qual é a dose absorvida de neutrões?

Solução

Para os raios- γ , $H = QD = 0.7 \times 8.5 = 5.95 \text{ Sv}$

Para os neutrões: $D = H/Q = 5.95/3.5 = 1.7 \text{ Gy} = 170 \text{ rads}$

Exemplo

Suponha que uma pessoa é acidentalmente exposta à radiação gama de uma fonte de cobalto ^{60}Co . Qual é a dose de radiação em grays sabendo que a massa da pessoa é de 75 kg e que todo o seu corpo é exposto a 5.0×10^9 raios gama por segundo durante 1 minuto. Os raios gama têm energia média de 1.25 MeV e são 50% absorvidos. ($1\text{MeV} = 1.602 \times 10^{-13} \text{ J}$).

Solução

A energia absorvida é $E = 5 \times 10^9 \times 1.25 \times 1.602 \times 10^{-13} \times 0.5 = 0.03 \text{ J}$

A dosagem é

$$D = E/m = 0.03/75 = 0.0004 \text{ Gy}$$

Exemplo

Qual é a dose equivalente devido à exposição de 0.1 rad de radiação- α ($Q = 20$)?

Solução

$$H = QD = 20 \times 0.001 = 0.02 \text{ Sv} = 2.0 \text{ rem}$$

Embora a radiação ionizante possa ser prejudicial às células do corpo humano, pode ser usada em alguns casos para fins médicos.

Marcadores radioativos são usados para revelar a estrutura e a função de tecidos ou órgãos. Consistem geralmente num isótopo radioativo emissor de radiação gamma ligado a uma substância que usada pelo corpo (por exemplo, a glucose ou a água).

O isótopo é injetado no paciente (ou tomado oralmente) e desloca-se ao longo do corpo até a região alvo. A radiação emitida é registada por uma câmara de radiação gamma dando origem a uma imagem do interior do paciente.

<i>Medical tracer</i>	<i>Where in the body it is used</i>	<i>Physical half-life</i>	<i>Radiation emitted</i>	<i>Energy of gamma radiation emitted</i>
<i>Technetium-99m</i>	<i>Range of organs</i>	<i>6 hours</i>	<i>Gamma</i>	<i>140 keV</i>
<i>Iodine-131</i>	<i>Thyroid</i>	<i>8 days</i>	<i>Beta and gamma</i>	<i>360 keV</i>
<i>Indium-111</i>	<i>Antibodies and blood cells</i>	<i>2.8 days</i>	<i>Gamma</i>	<i>170 or 250 keV</i>

O Tecnécio-99m tem uma semi-vida nuclear muito curta para ser transportado. Por esta razão os hospitais recebem geradores de Molibdénio-Tecnécio.

O Molibdénio tem uma semi-vida de 66 horas e decai para o Tecnécio.

No gerador o Molibdénio encontra-se combinado com óxido de alumínio. O Tecnécio que vai sendo gerado não se combina com este óxido pelo que pode ser removido do gerador por lavagem com uma solução salina. Esta solução salina que contém Tecnécio é injetada no paciente.

Problemas

1. Uma determinada fonte radioativa produz 150 mrads de raios- γ de 2.5 MeV por hora a uma distância de 1 m.
 - (a) Quanto tempo uma pessoa poderia ficar a esta distância antes de acumular uma dose intolerável de 1 rem?
 - (b) Supondo que a radiação gama seja emitida isotropicamente, a que distância uma pessoa receberia uma dose de 15 mrads/h desta fonte?

7. Partículas

7.1 Partículas e antipartículas

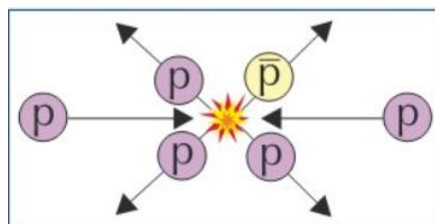
Vamos considerar abreviadamente as **partículas** e as **anti-partículas**.

Cada partícula possui uma antipartícula correspondente com a mesma massa e energia de repouso, mas com carga oposta:

Particle/Antiparticle	Symbol	Relative Charge	Mass (kg)	Rest Energy (MeV)
proton	p	+1	$1.67(3) \times 10^{-27}$	938(.3)
antiproton	\bar{p}	-1		
neutron	n	0	$1.67(5) \times 10^{-27}$	939(.6)
antineutron	\bar{n}			
electron	e^-	-1	9.11×10^{-31}	0.51(1)
positron	e^+	+1		
neutrino	ν_e	0	0	0
antineutrino	$\bar{\nu}_e$			

Quando a energia é convertida em massa, são criadas quantidades iguais de matéria e antimatéria.

Se dois fótons forem disparados um contra o outro em alta velocidade, mais partículas serão formadas. Se um próton extra for formado, sempre haverá um antipróton formado - daí a **produção de pares**:

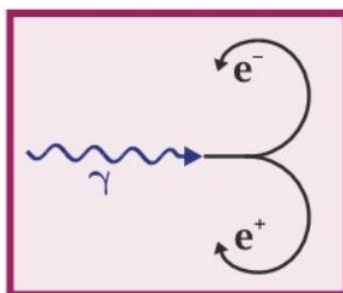


A energia que se converte em matéria e antimatéria está sob a forma de um fóton. A produção de pares só ocorre se um fóton tiver energia suficiente para produzir essa quantidade de massa — apenas os fótons de raios gama possuem energia suficiente, ou seja

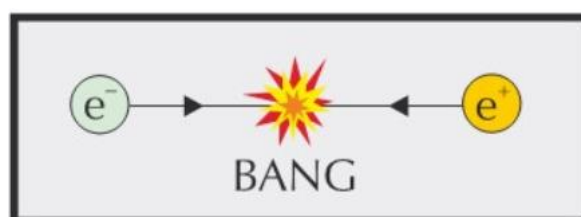
$$E_{min} = hf_{min} = 2E_0$$

onde E_0 é a energia de repouso.

Nas experiências, os pares eletrão-positrão são produzidos porque possuem uma massa relativamente baixa:



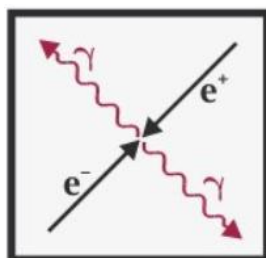
Quando uma partícula encontra a sua antipartícula, o resultado é a aniquilação.



Para que tal ocorra, cada partícula necessita de ter uma energia mínima de:

$$E_{min} = hf_{min} = E_0$$

e



7.2 Forças e partículas de troca

Quando duas partículas interagem, é necessário que algo aconteça para que uma partícula saiba da presença da outra – é esta a ideia por detrás das partículas de troca, também chamadas

gauge bosões.

A repulsão entre dois prótons é provocada pela troca de fótons virtuais, que são os gauge bosões da força eletromagnética. Existem apenas por um período muito curto.

Há quatro forças fundamentais:

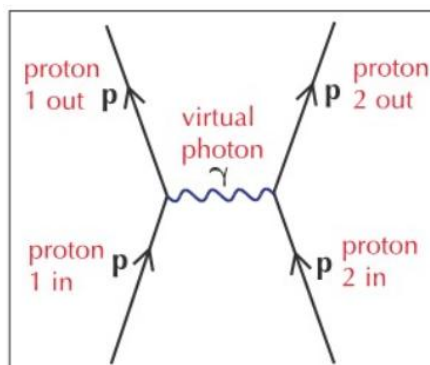
Type of Interaction	Gauge Boson	Particles Affected
electromagnetic	virtual photon (symbol, γ)	charged particles only
weak	W^+ , W^-	all types
strong	pions (π^+ , π^- , π^0)	hadrons only

e cada força tem a sua própria gauge bosão.

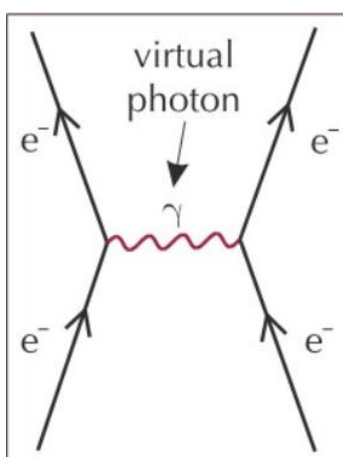
Agora, quanto maior for a massa do gauge bosão, menor será o alcance da força.

- Como os bosões W têm uma massa cerca de 100 vezes maior que a de um próton, a força fraca tem um alcance muito curto.

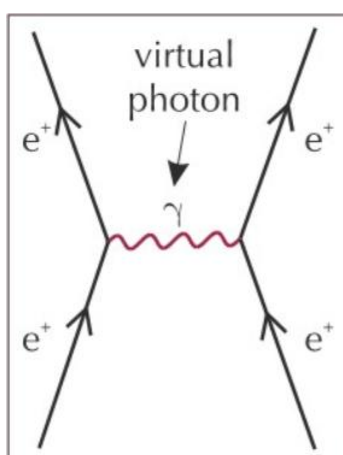
As interações entre partículas podem ser representadas por diagramas de Feynman:



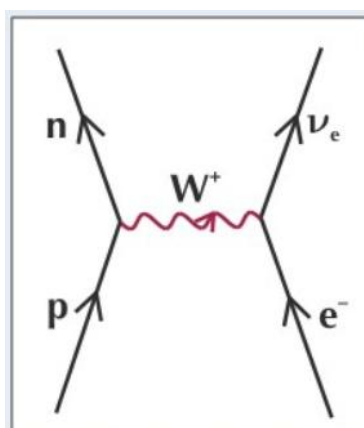
Para a interação de dois eletrões ou de dois positrões – a repulsão eletromagnética:



e



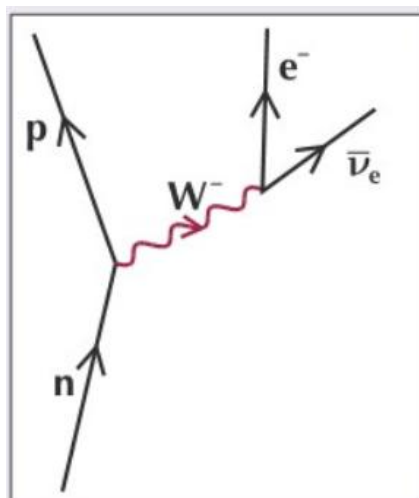
Para a captura de um eletrão e colisões eletrão-positrão



e aqui

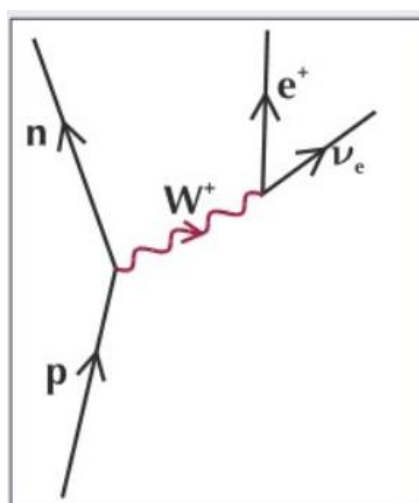
$$p + e^- \rightarrow n + \nu_e$$

Para decaimento β^- e β^+



onde

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$



e onde

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$$

7.3 Classificação das partículas

7.3.1 Hadrões:

O núcleo é constituído por nucleões: protões e neutrões.

Como os protões têm carga positiva, necessitam de uma força intensa para se manterem unidos

- a força nuclear forte.

As partículas que conseguem sentir esta força são chamadas de

- **hadrões**.

Existem dois tipos de hadrões:

- os bariões e

- os mesões.

São classificados de acordo com o número de quarks que os compõem.

- **Bariões**

Protões, assim como os neutrões e outras partículas de curta duração, são

bariões

e são instáveis (exceto protões). Os outros bariões desintegram-se em protões.

- **Antibariões**

Estas são os

- os **antiprotões** e

- os **antineutrões**.

O número bariónico é o número de bariões. O protão e o neutrão têm, cada um, um número bariónico $B = +1$.

Os antibariões têm um número bariónico $B = -1$.

Outras partículas têm um número bariónico $B = 0$.

Em qualquer interação, o número bariónico deve ser conservado.

- Mesões

O segundo tipo de hadrão é

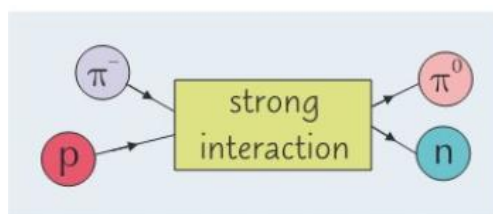
-o **mesão**.

São instáveis e têm um número bariónico $B = 0$.

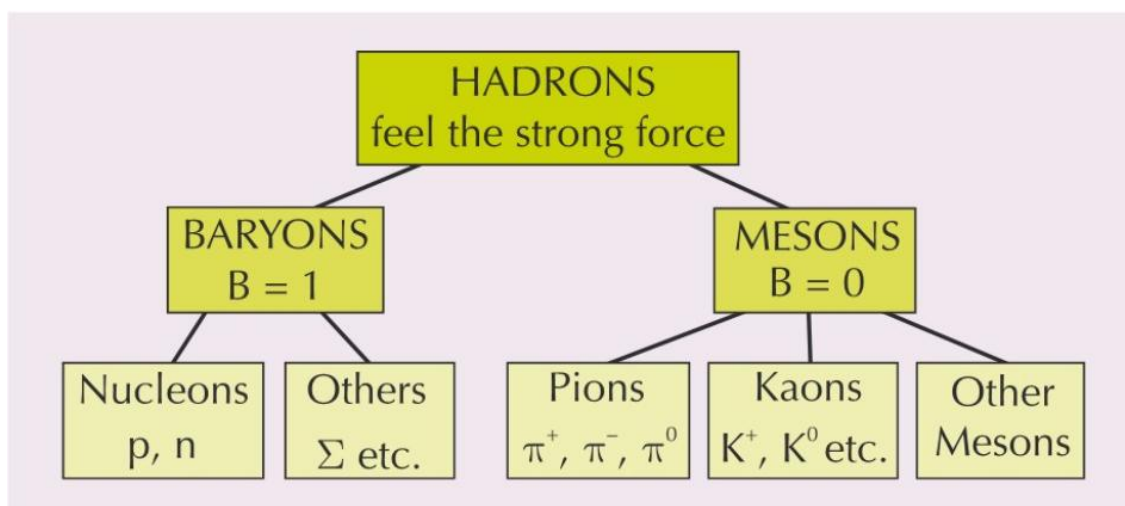
Os **piões** são os mesões mais leves e existem três tipos.

Os **kaões** são mais pesados e mais instáveis do que os piões. Têm uma vida curta e desintegram-se em piões.

Os mesões interagem com os bariões através da força forte:



Então



7.3.2 Leptões

Os leptões são partículas fundamentais que não sofrem interação com a força forte. Interagem com outras partículas apenas através da interação fraca.

- Os **elétrões**

são leptões, mas existem outros leptões, como

- o **muão**.

Estes são instáveis e desintegram-se em elétrões comuns. Os neutrinos têm massa e carga nulas e participam em interações fracas.

Name	Symbol	Charge	L_e	L_μ
electron	e^-	-1	+1	0
electron-neutrino	ν_e	0	+1	0
muon	μ^-	-1	0	+1
muon-neutrino	ν_μ	0	0	+1

7.4 Quarks

Os quarks são os blocos de construção dos hádrões. As antipartículas dos hádrões são formadas a partir de antiquarks.

Para formar prótons e neutrões são necessários

- o **quark up (u)** e
- o **quark down (d)**.

Um quark extra, denominado

- o **quark estranho(s)**,

permite a construção de mais partículas com uma propriedade denominada

- **estranheza**.

A estranheza, tal como o número bariónico, é um número quântico – só pode assumir um determinado conjunto de valores.

As partículas estranhas, como os **káons**, são criadas pela

- interação forte, mas decaem pela
- interação fraca.

No entanto, a estranheza é conservada na interação forte, mas não na interação fraca, o que significa que as partículas estranhas são sempre produzidas em pares.

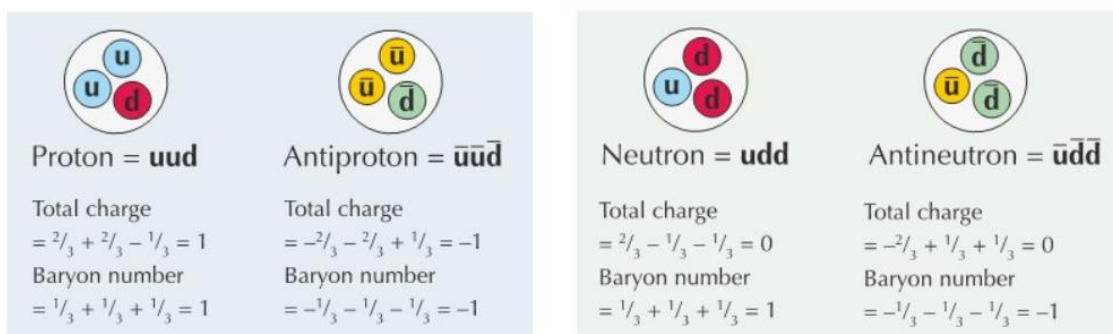
Propriedades:

QUARKS	Name	Symbol	Charge	Baryon number	Strangeness
	up	u	$+\frac{2}{3}$	$+\frac{1}{3}$	0
	down	d	$-\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$	0
	strange	s	$-\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$	-1

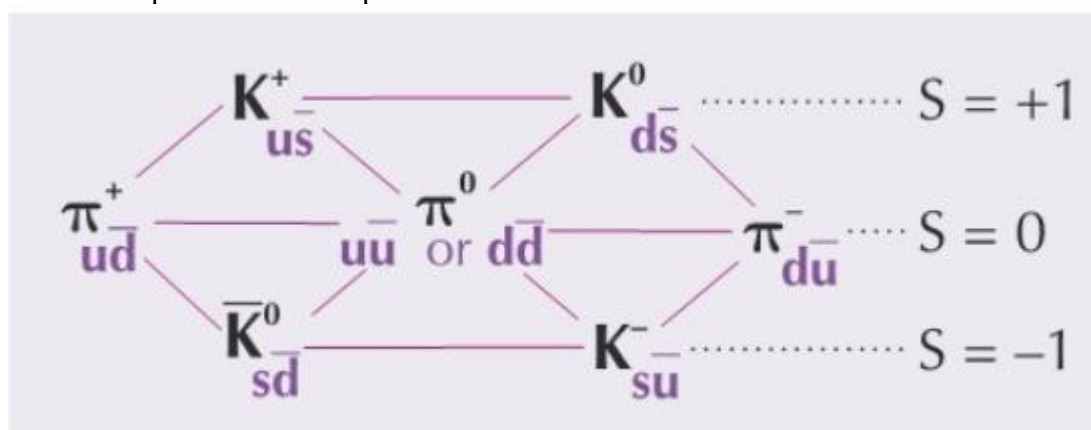
ANTIQUARKS	Name	Symbol	Charge	Baryon number	Strangeness
	anti-up	\bar{u}	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	anti-down	\bar{d}	$+\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	anti-strange	\bar{s}	$+\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	+1

Finalmente,

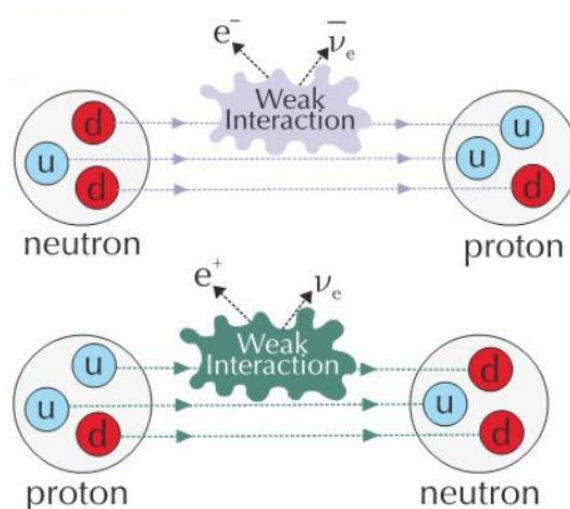
- bariões são feitos de três quarks



- mesões são um quark e um anti-quark



- a interação fraca é algo que altera o tipo de quark.



Problemas

1. Descreva como a força de repulsão eletromagnética entre dois prótons é explicada pela troca de partículas.
2. Desenhe um diagrama para mostrar a interação das partículas quando um elétron e um próton colidem. Identifique todas as partículas envolvidas e indique claramente que tipo de interação está a ocorrer.
3. Enumere todos os produtos de decaimento do neutrão. Explique porque é que este decaimento não pode ser devido à interação forte.
4. Inicialmente, o múon foi identificado incorretamente como um méson. Explique por que razão o múon não é um méson.
5. Um átomo de sódio contém 11 elétrons, 11 prótons e 12 neutrões. Qual é o número correto de hádrons, bárions, mésons e léptons num átomo de sódio?