



MINISTÉRIO DO DESENVOLVIMENTO, INDÚSTRIA E COMÉRCIO EXTERIOR
INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL – INMETRO

CONCURSO PÚBLICO

CARGO

38

PESQUISADOR-TECNOLOGISTA EM
METROLOGIA E QUALIDADE

ÁREA: TEORIA APLICADA À NANOMETROLOGIA

CADERNO DE PROVAS - PARTE II
CONHECIMENTOS ESPECÍFICOS E DISCURSIVA

LEIA COM ATENÇÃO AS INSTRUÇÕES ABAIXO.

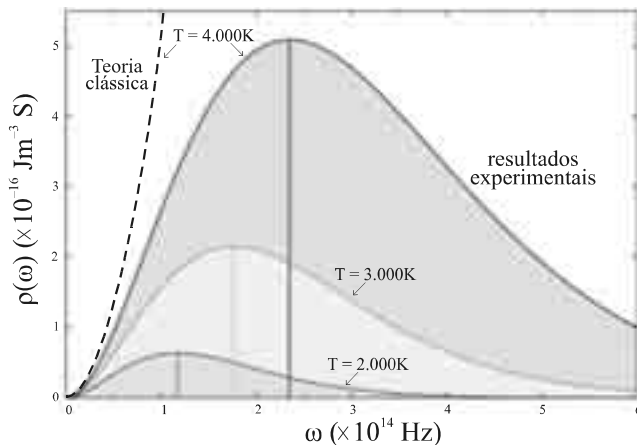
- 1 Nesta parte II do seu caderno de provas, confira atentamente os seus dados pessoais e os dados identificadores de seu cargo/área transcritos acima com o que está registrado em sua **folha de respostas** e em seu **caderno de textos definitivos da prova discursiva**. Confira também o seu nome, o nome e número de seu cargo/área no rodapé de cada página numerada desta parte II de seu caderno de provas. Caso o caderno esteja incompleto, tenha qualquer defeito, ou apresente divergência quanto aos seus dados pessoais ou aos dados identificadores de seu cargo/área, solicite ao fiscal de sala mais próximo que tome as providências cabíveis, pois não serão aceitas reclamações posteriores nesse sentido.
- 2 Quando autorizado pelo chefe de sala, no momento da identificação, escreva, no espaço apropriado da folha de respostas, com a sua caligrafia usual, a seguinte frase:
A justiça deveria tratar de descobrir a inocência e não a culpa.

OBSERVAÇÕES

- Não serão objeto de conhecimento recursos em desacordo com o estabelecido em edital.
- Informações adicionais: telefone 0(XX) 61 3448-0100; Internet — www.cespe.unb.br.
- É permitida a reprodução deste material apenas para fins didáticos, desde que citada a fonte.

CONHECIMENTOS ESPECÍFICOS

Texto para as questões de 41 a 43



A figura acima representa a densidade espectral de energia $\rho(\omega)$ de uma cavidade de corpo negro em função da frequência da radiação, para temperaturas de 2.000 K, 3.000 K e 4.000 K. É observado que a frequência na qual a densidade máxima ocorre (linha vertical indicando o máximo de cada curva) aumenta linearmente com a temperatura. Também se observa discrepância entre a previsão clássica de Rayleigh-Jeans (linha tracejada) à temperatura de 4.000 K e os resultados experimentais à mesma temperatura (linha sólida) para a densidade de energia de uma cavidade de corpo negro.

QUESTÃO 41

A partir da figura, considerando a densidade espectral de energia para um corpo negro de área dada e a temperatura de $T = 3.000$ K, assinale a opção correta.

- A Há potência excessivamente alta irradiada em um intervalo de frequência fixa $d\omega$, se esse intervalo estiver em uma frequência ω muito pequena quando comparada a 10^{14} Hz.
- B Apesar de a densidade ser máxima para um valor de $\omega \approx 1,8 \times 10^{14}$ Hz, a potência irradiada é menos intensa nessa frequência.
- C Acima de $\omega \approx 1,8 \times 10^{14}$ Hz, a potência irradiada cresce lentamente à medida que ω cresce.
- D Comparando a curva experimental de densidade à temperatura de 3.000 K com as de 2.000 K e 4.000 K, conclui-se que a potência total irradiada cresce com o aumento da temperatura e de forma não linear.
- E Quando se compara as curvas de $\rho(\omega)$ às temperaturas 2.000 K, 3.000 K e 4.000 K, a frequência na qual a potência irradiada é mais intensa decresce com o aumento da temperatura.×

QUESTÃO 42

Com base na figura, e considerando as teorias clássica de Rayleigh-Jeans e quântica de Planck para a radiação de corpo negro à temperatura de $T = 4.000$ K, assinale a opção correta.

- A No limite de baixas frequências, o espectro clássico se aproxima dos resultados experimentais. Entretanto, à medida que a frequência cresce, a previsão de Rayleigh-Jeans se aproxima da previsão de Planck.
- B A teoria de Planck mostra que, nas circunstâncias em que predomina o caso da radiação de corpo negro, a energia média das ondas estacionárias é uma função da frequência. Isso contradiz a lei da equipartição da energia, que associa à energia média um valor independente da frequência.
- C Os resultados experimentais mostram que a densidade de energia é sempre finita. Dessa forma, a densidade converge para um valor finito, não nulo, para altas frequências ($\omega \gg 6 \times 10^{14}$ Hz).
- D O comportamento não realista da previsão clássica para baixas frequências é conhecido como “catástrofe do ultravioleta”, o qual denota a não validade da teoria clássica nessa região.
- E Diferentemente da abordagem clássica de Rayleigh-Jeans, a teoria da radiação de cavidade de Planck trata a energia das ondas estacionárias eletromagnéticas como grandeza contínua.

QUESTÃO 43

Em termos da densidade espectral de energia $\rho(\omega)$, pode-se escrever a Lei de Planck para radiação de corpo negro à

temperatura T e frequência ω como sendo $\rho(\omega) = \frac{8\pi\omega^2}{c^3} \frac{h\omega}{e^{\left(\frac{h\omega}{kT}\right)} - 1}$, em

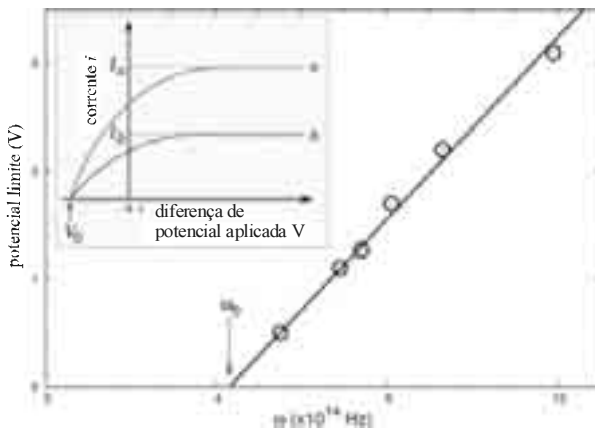
que h é a constante de Planck, k é a constante de Boltzmann e c é a velocidade da luz. A densidade espectral no limite de baixas frequências reduz-se ao espectro de Rayleigh-Jeans. Equivalentemente, esse resultado emerge da aplicação do Princípio da Equivalência aplicado à equação acima. Considerando o limite de baixas frequências, $\rho(\omega)$ é aproximadamente igual a

- A $\frac{8\pi k T \omega^2}{c^3}$.
- B $\frac{8\pi k T \omega^3}{c^3}$.
- C $\frac{8\pi k \omega^3}{c^3}$.
- D $\frac{8\pi h^2 T \omega^3}{(k T c^3)}$.
- E $\frac{8\pi h \omega^3 e^{-\frac{h\omega}{kT}}}{c^3}$.

QUESTÃO 44

RASCUNHO

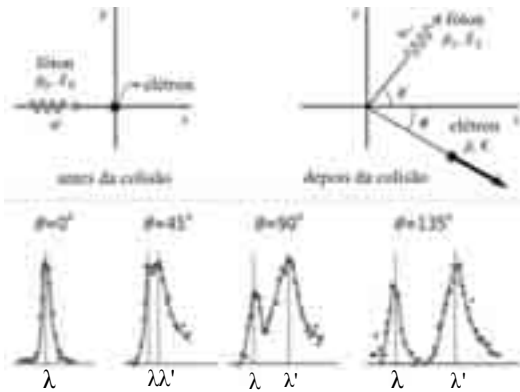
A emissão de elétrons por um material, geralmente metálico, devido à incidência de radiação eletromagnética (como a luz) sobre esse material é conhecida como efeito fotoelétrico. Os elétrons emitidos podem ser detectados sob a forma de uma corrente, se atraídos por um coletor metálico através de uma diferença de potencial V . Contudo, se essa diferença de potencial torna-se suficientemente grande, um valor V_0 , chamado potencial limite, é atingido e a corrente fotoelétrica cai a zero.



A figura acima mostra as medidas de Millikan do potencial V_0 no sódio em função da frequência da radiação incidente, sendo ω_0 o limiar de frequência, ou o limiar fotoelétrico. O gráfico suplementar mostra a corrente i em função da voltagem V . A diferença de potencial aplicada é dita positiva quando o coletor está a um potencial maior que o da superfície fotoelétrica. Na curva b , a intensidade da luz emitida foi reduzida à metade daquela da curva a . Acerca desse assunto, assinale a opção correta.

- A** Se a energia do fóton incidente ($h\omega$) não é maior que a função trabalho ($\phi = h\omega_0$), um valor máximo de elétron é emitido.
- B** A teoria ondulatória requer que a amplitude do campo elétrico oscilante da onda luminosa cresça se a intensidade da luz aumenta, o que sugere que a energia cinética dos fotoelétrons também cresça. O gráfico suplementar corrobora essa teoria, uma vez que a energia cinética do mais rápido fotoelétron emitido ($K_{max} = eV_0$, onde e é a carga do elétron) também depende da intensidade da luz.
- C** As medidas de Millikan mostram que existe, para cada superfície, um valor de ω_0 característico. Para frequências menores que ω_0 , o efeito fotoelétrico não ocorre, qualquer que seja a intensidade luminosa incidente.
- D** Tanto o potencial limite V_0 quanto as correntes de saturação I_a e I_b (gráfico suplementar) são independentes da intensidade da radiação eletromagnética.
- E** De acordo com a teoria ondulatória, o efeito fotoelétrico deveria ocorrer para qualquer frequência da luz incidente, desde que essa fosse intensa o bastante para prover a energia requerida à ejeção dos elétrons. As medidas de Millikan corroboram essa teoria.

QUESTÃO 45



Os gráficos acima representam os dados experimentais de espalhamento de raios-X sobre elétrons. Os resultados são mostrados para quatro ângulos de espalhamento θ diferentes. Experimentalmente, para cada θ , apenas um valor do deslocamento Compton, $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$, é encontrado, independentemente da intensidade de radiação e do tempo de exposição. O experimento de Compton verificou a equação de Compton, $\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta)$, em que $\lambda_c \equiv \frac{h}{m_0 c}$ é o comprimento de onda Compton do elétron. Acerca desse assunto, assinale a opção correta.

- A Na abordagem de Compton, ocorre a conservação de energia e o momento linear na colisão. A conservação do momento requer que $p_0 = p_1 \sin \theta + \phi \sin \varphi$.
- B O efeito Compton fornece uma evidência conclusiva favorável à característica ondulatória da radiação eletromagnética.
- C A partir da equação de Compton, é correto afirmar que a frequência do fóton espalhado é sempre maior que a do fóton incidente.
- D Se a radiação que for espalhada está na parte visível, de micro-ondas ou de ondas de rádio do espectro eletromagnético, ela sempre terá um comprimento de onda igual ao comprimento de onda da radiação incidente. Assim, à medida que $\lambda \rightarrow 0$, os resultados quânticos se confundem com os resultados clássicos.
- E O deslocamento Compton aumenta com o ângulo θ . Essa característica é qualitativamente consistente com a teoria corpuscular. Além disso, os resultados de Compton indicam que o processo de transferência de energia e o momento linear são não contínuos, como previsto pela teoria clássica, mas discreto e indivisível, como sugerido pela teoria quântica.

QUESTÃO 46

O primeiro postulado da mecânica quântica não-relativística prediz que: associado com qualquer sistema físico isolado em um instante fixo t_0 , o estado desse sistema é definido especificando-se um *ket*, $|\psi(t_0)\rangle$, pertencente ao espaço dos estados ϵ . A respeito desse assunto, assinale a opção correta.

- A Considerando dois *kets* $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$, ainda que sejam proporcionais entre si, eles não representam o mesmo estado físico.
- B Desde que ϵ seja um espaço vetorial, esse postulado implica um princípio de superposição.
- C A medida de uma grandeza física \mathcal{A} sempre gera um valor real, desde que o observável correspondente \mathcal{A} seja não Hermitiano.
- D Se o espectro de \mathcal{A} for discreto, os resultados que podem ser obtidos pela medida de \mathcal{A} são quantizados.
- E O fato de se conhecer o vetor de estado do sistema em determinado instante de tempo, $|\psi(t_0)\rangle$, não é suficiente para que se possa calcular o vetor de estado do sistema em um instante de tempo infinitesimalmente diferente.

RASCUNHO

RASCUNHO

QUESTÃO 47

Considerando um vetor tridimensional

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{3} |\phi_1\rangle + \frac{2}{3} |\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3} |\phi_3\rangle$$

em termos das bases ortonormais $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ e $|\phi_3\rangle$, assinale a opção correta.

- Ⓐ A expressão de $|\psi\rangle$ não está normalizada.
- Ⓑ A probabilidade de se encontrar o sistema no estado $|\phi_1\rangle$ é igual a $\frac{\sqrt{3}}{3}$.
- Ⓒ A probabilidade de se encontrar o sistema nos estados $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$ é igual a $\frac{5}{9}$.
- Ⓓ Considere um *ensemble* de 900 sistemas idênticos, cada um deles no estado $|\psi\rangle$. É correto concluir que, se forem realizadas medidas sobre todos eles, devem ser encontrados 200 sistemas no estado $|\phi_3\rangle$.
- Ⓔ Suponha um *ensemble* de 810 sistemas idênticos, cada um deles no estado $|\psi\rangle$. Efetuando-se medidas sobre todos eles, deve ser encontrado um total de 630 sistemas nos estados $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$.

QUESTÃO 48

A equação de Schrödinger pode ser escrita como:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \text{ em que } H(t) \text{ representa o operador}$$

Hamiltoniano correspondente à energia total do sistema. Acerca das propriedades e implicações da equação de Schrödinger, assinale a opção correta.

- Ⓐ Dado o estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$, o estado $|\psi(t)\rangle$ em um instante t só pode ser determinado se $H(t)$ for constante.
- Ⓑ Entre duas medidas consecutivas, o vetor de estado evolui de acordo com a equação de Schrödinger de modo não-determinístico.
- Ⓒ Indeterminações na evolução temporal de um sistema quântico aparecem quando a grandeza física é mensurada. Desse modo, o vetor de estado sofre alterações imprevisíveis.
- Ⓓ A equação de Schrödinger é linear e homogênea. Em consequência disso, suas soluções não podem ser superpostas linearmente.
- Ⓔ Devido a $H(t)$ ser hermitiano, seu valor médio é um número complexo.

QUESTÃO 49

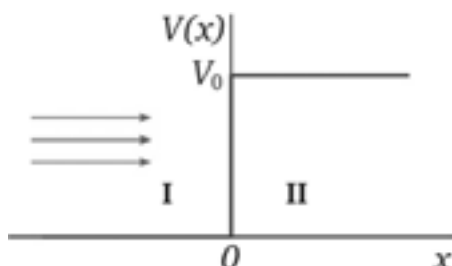
Considere uma partícula de massa m sujeita a um potencial unidimensional $V(x)$. Suponha que em alguma região o potencial $V(x)$ seja constante (não nulo), ou seja, $V(x) = V_0$. Assumindo estado estacionário da partícula, que E é um valor constante, e que $i = \sqrt{-1}$, assinale a opção correta.

- A** Se $E < V_0$, a solução para o estado estacionário pode ser escrita como $\varphi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + A'_1 e^{-k_1 x}$, em que A_1 e A'_1 são constantes complexas arbitrárias e $k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$, com k_1 real.
- B** Se $E < V_0$, a solução para o estado estacionário pode ser escrita como $\varphi_2(x) = A_2 x + A'_2$, em que A_2 e A'_2 são constantes reais arbitrárias.
- C** Se $E = V_0$, a solução para o estado estacionário pode ser escrita como $\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_3 x} + A'_3 e^{-ik_3 x}$, em que A_3 e A'_3 são constantes reais arbitrárias e $k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.
- D** Se $E > V_0$, a solução para o estado estacionário pode ser escrita como $\varphi_4(x) = A_4 e^{ik_4 x} + A'_4 e^{-ik_4 x}$, em que A_4 e A'_4 são constantes complexas arbitrárias e $k_4 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.
- E** Se $E > V_0$, a solução para o estado estacionário pode ser escrita como $\varphi_5 = A_5 e^{ik_5 x} + A'_5 e^{-ik_5 x}$, em que A_5 e A'_5 são constantes complexas arbitrárias e $k_5 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$.

Texto para as questões 50 e 51

Considere na figura abaixo um degrau de potencial com amplitude V_0 . Considere, ainda, que ocorra um fluxo de partículas de massa m e energia $E > V_0$ da esquerda para a direita, iniciando-se em $x = -\infty$.

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$



QUESTÃO 50

Acerca dessas informações e das soluções da equação de Schrödinger, independentemente do tempo aplicadas ao potencial degrau, e considerando-se $i = \sqrt{-1}$ e \hbar a constante de Planck dividida por 2π , assinale a opção correta.

- A** Como $E > V_0$, na mecânica quântica, assim como na mecânica clássica, a probabilidade de uma partícula que estivesse inicialmente na região $x < 0$, se movendo para $x = 0$, passar para $x > 0$ é igual a um. Nesse caso, ocorre, portanto, uma mudança descontínua em seu comprimento de onda de de Broglie.
- B** A solução estacionária geral para a região I pode ser escrita como $\varphi_I(x) = A_I e^{-ik_1 x} + A'_I e^{ik_1 x}$. Assim, $\varphi_I(x)$ é formada pela superposição de duas ondas: uma devido à propagação da partícula incidente (de $x = -\infty$, para a direita), com amplitude A_I , e outra devido à partícula refletida (da direita para a esquerda), com amplitude A'_I .
- C** A solução estacionária geral para a região II pode ser escrita como $\varphi_{II}(x) = A_{II} e^{+ik_{II} x} + A'_{II} e^{-ik_{II} x}$, onde A_{II} e A'_{II} são constantes complexas arbitrárias e $k_{II} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.
- D** A solução estacionária para a região II pode ser escrita como $\varphi_{II}(x) = \frac{2Ae^{ik_{II} x} k_I}{(k_I + k_{II})}$, em que A é uma constante arbitrária, $k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $k_{II} = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$.
- E** A solução estacionária $\varphi_{II}(x)$ deve representar o fluxo de partículas refletidas, na forma $\varphi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_{II} x}$, com A_{II} sendo a amplitude da onda correspondente.

RASCUNHO

QUESTÃO 51

De modo geral, a descrição do estado estacionário mostrado no texto se dá em três partes: onda incidente, onda refletida e onda transmitida. A razão entre a intensidade da onda refletida e da onda incidente dá a probabilidade de que a partícula seja refletida pelo degrau de potencial de volta à região I. Esta probabilidade é conhecida como coeficiente de reflexão R . Considere a função de onda formada por ondas se propagando com comprimento de onda

de de Broglie $\lambda_I = \frac{h}{p_I} = \frac{2\pi}{k_I}$, na região I, e com comprimento de

onda de de Broglie $\lambda_{II} = \frac{h}{p_{II}} = \frac{2\pi}{k_{II}}$, na região II. Então, R é igual a:

- A** $1 - \frac{4k_I k_{II}}{(k_I - k_{II})^2}$.
- B** $\frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2}$.
- C** $1 - \frac{2k_I}{(k_I + k_{II})}$.
- D** $\frac{k_I - k_{II}}{(k_I + k_{II})}$.
- E** $\frac{2k_I}{(k_I + k_{II})}$.

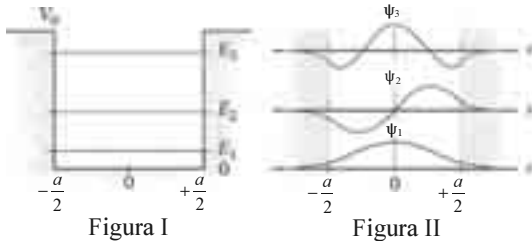
QUESTÃO 52

Considere os operadores $O_1 \psi(x) = x^3 \psi(x)$ e $O_2 \psi(x) = x \frac{d}{dx} \psi(x)$.

Suponha, ainda, que $i = \sqrt{-1}$. Então, a relação de comutação $[O_1, O_2]$ será

- A** $[O_1, O_2] \psi(x) = -3x^3 \psi(x)$.
- B** $[O_1, O_2] \psi(x) = -2x^3 \psi(x)$.
- C** $[O_1, O_2] \psi(x) = -3x^2 \psi(x)$.
- D** $[O_1, O_2] \psi(x) = -3ix^2 \psi(x)$.
- E** $[O_1, O_2] \psi(x) = 0$.

Texto para as questões de 53 a 55



Um dos potenciais mais simples, que apresentam a propriedade de penetração de barreira, é o poço de potencial quadrado, que é frequentemente utilizado na física quântica para representar uma situação na qual uma partícula se move em uma região limitada do espaço sob influências de forças de confinamento.

A figura I acima mostra um poço de potencial quadrado e seus três autovalores dos estados ligados. Não é mostrado o contínuo de autovalores da energia $E > V_0$. Na figura II, são mostradas as três autofunções correspondentes do poço de potencial.

QUESTÃO 53

Acerca da região x dentro do poço de potencial quadrado, $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$, e do número de onda angular k_1 , presente na solução da equação de Schrödinger, independentemente do tempo, nessa região, assinale a opção correta.

- A A parte senoidal da autofunção decresce à medida que a energia do autovalor correspondente aumenta.
- B As oscilações da autofunção ficam mais numerosas à medida que a energia diminui.
- C Quanto menor for a energia do autovalor correspondente, mais rapidamente as autofunções tendem a zero.
- D Com o aumento da energia, o número de onda angular k_1 diminui, fazendo com que o comprimento de onda de de Broglie também diminua.
- E O poço de potencial quadrado não tem um quarto estado ligado devido ao valor associado ao número de onda angular k_1 ser muito grande para satisfazer a condição de ligação $E < V_0$.

QUESTÃO 54

Considere as regiões em que as autofunções se estendem para fora do poço $x < -\frac{a}{2}$ e $x > \frac{a}{2}$. De acordo com a mecânica clássica, desde que a energia cinética seja $\frac{p^2}{2m} = E - V(x)$, em que p é o momento linear de uma partícula de massa m , essa partícula jamais poderia ser encontrada nessa região, uma vez que $E < V(x)$. Acerca das regiões classicamente proibidas, assinale a opção correta.

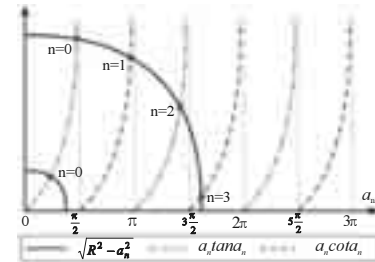
- A Quanto maior for a energia do autovalor correspondente, mais rapidamente as autofunções tendem a zero.
- B Quanto mais intensa for a violação da restrição clássica, isto é, a energia total deve ser ao menos do mesmo valor que a energia potencial $V(x)$, mais facilmente as autofunções penetram nas regiões classicamente proibidas.
- C Para a região $x < -\frac{a}{2}$, a solução da equação de Schrödinger pode ser escrita na forma: $\varphi_{II}(x) = C e^{k_1 x} + D e^{-k_1 x}$. Para que a autofunção seja aceitável, deve-se assumir que $D \neq 0$.
- D À medida que as paredes do potencial quadrado são aumentadas, isto é, o potencial V_0 cresce até $V_0 = +\infty$, E_1 também cresce. Contudo, E_1 aumenta de forma lenta quando comparada ao crescimento de V_0 .
- E Com o aumento da energia do autovalor, o número de oscilações das autofunções nessa região também aumenta.

QUESTÃO 55

Considerando uma partícula de massa m confinada em um poço finito de potencial quadrático de comprimento a e profundidade V_0 , a solução das autofunções e autovalores do estado ligado (isto é, $E < V_0$) envolve a resolução da equação transcendental:

$$\sqrt{R^2 - a_n^2} = \begin{cases} -a_n \cot a_n, & \text{para estados ímpares} \\ a_n \tan a_n, & \text{para estados pares} \end{cases}$$

em que $a_n^2 = \frac{ma^2 E_n}{2\hbar^2}$ e $R^2 = \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}$.



A figura acima mostra as soluções gráficas para a referida equação transcendental. As soluções são dadas pelas intersecções entre $\sqrt{R^2 - a_n^2}$ com $a_n \tan a_n$ e $-a_n \cot a_n$. Além disso, o número de soluções depende do valor de R . Assinale a opção correta relativa ao número de estados ligados na situação em que $R = 2$.

- A 1
- B 2
- C 3
- D 4
- E 5

QUESTÃO 56

Considere que um elétron está se movendo livremente dentro de um poço de potencial de barreira infinita com paredes localizadas em $x = 0$ e em $x = a$. Considere, ainda, que esse elétron esteja inicialmente no estado fundamental ($n = 1$), com energia

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{(2ma^2)}$$

e função de onda correspondente $\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$.

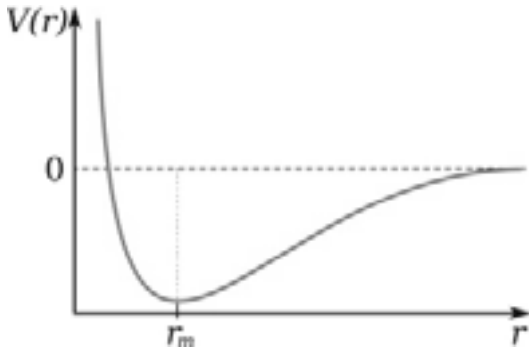
Repentinamente, o tamanho do poço é quadruplicado, isto é, o lado direito da parede é movido instantaneamente de $x = a$ para $x = 4a$. Acerca desse assunto, a probabilidade de se encontrar o elétron no estado fundamental na nova configuração é igual a

- A $\frac{128}{(15\pi)^2}$.
- B $\frac{16}{(3\pi)^2}$.
- C $\frac{1}{4}$.
- D $\frac{\sqrt{2}}{2}$.
- E 1.

QUESTÃO 57

RASCUNHO

Muitos sistemas complexos podem ser representados aproximadamente por osciladores harmônicos. A energia potencial $V(r)$ de dois átomos em função da distância de separação r entre eles se comporta usualmente conforme a curva da figura abaixo.



Geralmente, existe uma distância, $r = r_m$, na qual o potencial possui um valor mínimo, que corresponde ao ponto de equilíbrio estável. Em cristais moleculares formados por gases nobres, a interação entre os íons pode ser aproximada pelo potencial de Leonard-Jonnes: $V(r) = 4V_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$, em que V_0 e σ dependem do tipo

de íon. Próximo do mínimo, o potencial pode ser escrito na forma polinomial $V(r) \approx V_m + k(r - r_m)^2/2$, onde $V_m = V(r_m)$, assumindo a forma do potencial do oscilador harmônico. Considerando o potencial aproximado para oscilador harmônico, a energia do estado fundamental E_0 de um íon simples de massa m em tal cristal será

- A $\frac{3\hbar}{\sigma} \sqrt{\frac{2V_0}{m}}$.
- B $\frac{3\hbar}{2\sigma} \sqrt{\frac{V_0}{m}} - V_0$.
- C $2^{(1/3)} \frac{3\hbar}{\sigma} \sqrt{\frac{V_0}{m}} - V_0$.
- D $2^{(1/3)} \frac{3\hbar}{\sigma} \sqrt{\frac{V_0}{m}} + V_0$.
- E $\frac{3\hbar}{2\sigma} \sqrt{\frac{m}{V_0}} + V_0$.

QUESTÃO 58

Para um sistema unidimensional de osciladores harmônicos, os níveis de energia são igualmente espaçados e não-degenerados. Então, o número de estados quânticos no intervalo ΔE é proporcional a ΔE , desde que ΔE seja muito maior que o espaçamento entre os níveis. Acerca desse assunto, assinale a opção correta.

- A** O sistema unidimensional de osciladores harmônicos pode ser explicado pelo modelo de Bohr do átomo de hidrogênio, uma vez que esse modelo prevê que os níveis de energia são igualmente espaçados.
- B** A quantidade ΔE deve ser entendida como um elemento diferencial infinitesimal para que haja pelo menos um estado permitido.
- C** A partir de uma determinada função de energia potencial, pode-se resolver a equação de Schrödinger a fim de encontrar os estados com energia definida de um dado sistema. O átomo de hidrogênio pelo modelo de Bohr e o oscilador harmônico possuem a mesma função de energia potencial, portanto, possuem os mesmos níveis de energia.
- D** O estado de um oscilador harmônico unidimensional é definido apenas pelo número quântico principal n , de modo que não há degenerescência. Além disso, os níveis de energia crescem linearmente com n , de modo que, para $\Delta E \gg \hbar \omega$, deve existir pelo menos um estado permitido.
- E** Os resultados provenientes da equação de Schrödinger e do postulado de Planck para o oscilador harmônico unidimensional assumem que os níveis de energia, além de serem deslocados acima de $\frac{\hbar\omega}{2}$, são não-degenerados, isto é, diferentes estados quânticos podem assumir a mesma energia total. Em consequência, a energia total mínima possível para uma partícula ligada no potencial é $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Texto para as questões de 59 a 61

No problema do oscilador harmônico unidimensional, uma partícula de massa m está sujeita a um potencial $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, em que ω é a frequência clássica do oscilador. Classicamente, a constante de mola é dada por $k = m\omega^2$.

Operadores tipo escada permitem obter os autovalores de energia sem que haja a necessidade de resolver diretamente a equação de Schrödinger. Nesse sentido, os operadores a (operador de aniquilação) e a^\dagger (operador de criação) são essenciais na representação dos operadores posição, $x = \sqrt{\hbar/2m\omega} (a^\dagger + a)$, e momento linear, $p = \sqrt{\hbar m\omega/2} (a^\dagger - a)$.

Considerando inicialmente o autoestado $|\psi_n\rangle$ do hamiltoniano H correspondente ao autovalor $E_n = (n + 1/2) \hbar \omega$, a aplicação do operador a produz um autovetor associado com autovalor $E_{n-1} = (n + 1/2) \hbar \omega - \hbar \omega$, e a aplicação de a^\dagger produz a energia $E_{n+1} = (n + 1/2) \hbar \omega + \hbar \omega$. Além disso, sejam $|\psi_n\rangle$ e $|\psi_{n\pm 1}\rangle$ normalizadas, $a^\dagger |\psi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle$, $a |\psi_n\rangle = \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle$, $a^\dagger a |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle$ e $aa^\dagger |\psi_n\rangle = (n+1) |\psi_n\rangle$.

QUESTÃO 59

Para um oscilador harmônico unidimensional, a e a^\dagger estão relacionados entre si por meio das relações de comutação $[a, a^\dagger] = 1$ e $[a^\dagger, a] = -1$. Além disso, $[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0$. Definindo um operador N como sendo $N = a^\dagger a$, assinale a opção correta sobre as relações de comutação $[N, a]$ e $[N, a^\dagger]$.

- A** $[N, a] = -a$ e $[N, a^\dagger] = a^\dagger$
- B** $[N, a] = a$ e $[N, a^\dagger] = a^\dagger$
- C** $[N, a] = a$ e $[N, a^\dagger] = -a^\dagger$
- D** $[N, a] = -a$ e $[N, a^\dagger] = -a^\dagger$
- E** $[N, a] = 0$ e $[N, a^\dagger] = 0$

QUESTÃO 60

RASCUNHO

Acerca do oscilador harmônico unidimensional, o valor esperado da energia potencial $\langle V \rangle$ no n -ésimo estado será

- A $\frac{\hbar\omega}{2}$.
- B $\hbar\omega$.
- C $\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar\omega}{2}$.
- D $\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$.
- E $\left(2n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega$.

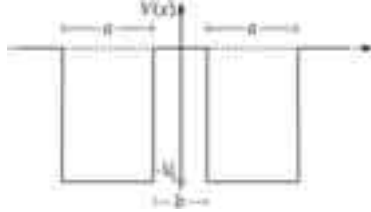
QUESTÃO 61

Considere uma partícula de massa m no estado fundamental de um oscilador harmônico com frequência clássica ω e constante de mola k . Subitamente, o valor da constante de mola é amplificado em 25 vezes, $k' = 25k$, tal que a nova frequência $\omega' = 5\omega$. Inicialmente, a função de onda permanece inalterada. Uma vez que o hamiltoniano foi alterado, a função de onda então evoluirá diferentemente da configuração antes da mudança da constante de mola. Por conseguinte, é correto concluir que a probabilidade de que uma medida da energia ainda retorne o valor $\hbar\omega$ é

- A 0.
- B $\frac{1}{4}$.
- C $\frac{1}{2}$.
- D $\frac{3}{4}$.
- E 1.

Texto para as questões 62 e 63

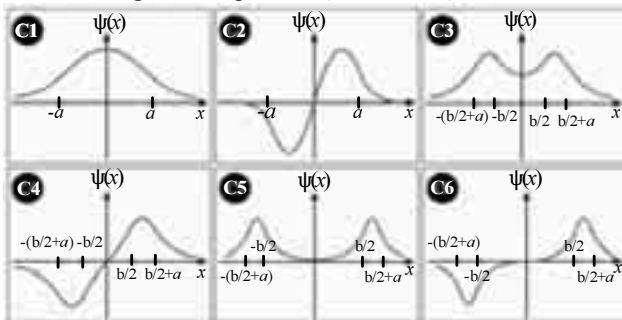
Considere um poço duplo de potencial quadrático, conforme mostrado na figura abaixo.



A profundidade $-V_0$ e a largura a dos poços de potencial são fixas e largas o suficiente para que haja vários estados ligados. A barreira, de largura b , entretanto, é variável.

QUESTÃO 62

Considere as seguintes representações de funções de onda.

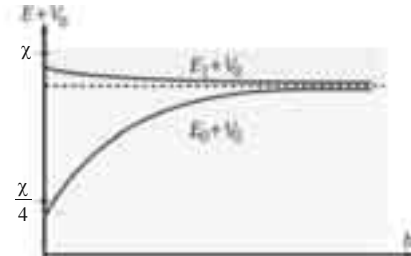


Acerca do poço duplo de potencial quadrático, levando em conta as funções de ondas do estado fundamental, $\psi_0(x)$, e do primeiro estado excitado, $\psi_1(x)$, além das configurações acima (C1, C2, C3, C4, C5 e C6), assinale a opção correta.

- A** Se $b = 0$, comumente um poço simples e finito de potencial quadrático, a função de onda seria nula na parte externa e senoidal dentro do poço, sendo $\psi_0(x)$ conforme C1, e $\psi_1(x)$ conforme C2.
- B** Se $b \approx a$, então $\psi_0(x)$ é uma função par, conforme C3. Nesse caso, a função de onda decai exponencialmente fora do poço, com comportamento senoidal dentro dos poços e tipo cosseno hiperbólico na barreira. A função $\psi_1(x)$ é ímpar, conforme C4. Assumindo um comportamento tipo seno hiperbólico na barreira.
- C** Se $b \approx a$, então $\psi_0(x)$ é uma função par, conforme C5. A função $\psi_1(x)$ também é par, conforme C3. Em ambos os casos, isto é, estado fundamental e primeiro estado excitado, a função de onda decai exponencialmente fora do poço e possui um comportamento quadrático na barreira.
- D** Se $b \gg a$, os dois poços estão praticamente isolados. As funções de ondas $\psi_0(x)$, conforme C5, e $\psi_1(x)$, conforme C6, são semelhantes às suas correspondentes no caso em que $b \approx a$, contudo são bastante atenuadas na região da barreira. As funções de ondas $\psi_0(x)$ e $\psi_1(x)$ são não degeneradas, não podendo ser produtos, por exemplo, de combinações lineares dos estados fundamentais de dois poços distintos.
- E** Se $b \gg a$, as funções de ondas $\psi_0(x)$ e $\psi_1(x)$ apresentam um comportamento do tipo decaimento exponencial na parte externa e senoidal dentro do poço; sendo do tipo seno para $\psi_0(x)$, conforme C1, e cosseno para $\psi_1(x)$, conforme C2. Entretanto, elas são degeneradas, podendo ser descritas como combinações lineares pares e ímpares dos estados fundamentais de dois poços distintos.

QUESTÃO 63

O poço duplo de potencial é um modelo unidimensional bastante rudimentar para o potencial exercido sobre um elétron em uma molécula diatômica. Nesse sentido, os dois poços representam a força atrativa dos núcleos. Se os núcleos são livres para se mover, eles irão adotar uma configuração de mínimo de energia.



A figura acima mostra o comportamento da energia no estado fundamental, E_0 , e no primeiro estado excitado, E_1 , à medida que a largura da barreira, b , cresce. O valor χ é igual a $\frac{\pi^2 \hbar^2}{(2ma^2)}$.

Tendo como base o enunciado acima desprezando os efeitos de repulsão internucleares, assinale a opção correta.

- A** O mínimo de energia ocorre quando $b \rightarrow \infty$. Assim, tanto no estado fundamental quanto no primeiro estado excitado, o elétron propicia a atração dos núcleos, de modo a promover a ligação dos átomos.
- B** Independentemente do valor assumido por b , tanto no estado fundamental quanto no primeiro estado excitado, o elétron atrai os núcleos; favorecendo, portanto, a ligação entre os átomos.
- C** Independentemente do valor assumido por b , tanto no estado fundamental quanto no primeiro estado excitado, o elétron propicia o distanciamento entre os núcleos.
- D** Independentemente do valor assumido por b , o elétron no estado fundamental faz com que a distância entre os núcleos aumente. Entretanto, no primeiro estado excitado, o elétron tende a atrair os núcleos, promovendo a ligação dos átomos, à medida em que $b \rightarrow 0$.
- E** No estado fundamental, a energia assume um mínimo à medida que $b \rightarrow 0$. Assim, o elétron tende a atrair os núcleos, promovendo a ligação dos átomos. No primeiro estado excitado, entretanto, o elétron propicia um distanciamento maior entre os núcleos.

QUESTÃO 64

Considere as relações de comutação

$$[r_i, p_j] = -[p_i, r_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0,$$

em que os índices correspondem a x, y e z , com $r_x = x, r_y = y$ e $r_z = z$, e $p_i = -i\hbar \partial / \partial r_i$. Seja L o operador momento angular total, tal que $L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, com $L_x = yp_z - zp_y, L_y = zp_x - xp_z$ e $L_z = xp_y - yp_x$. Com base nesse assunto, assinale a opção que apresenta uma relação de comutação correta.

- A** $[L^2, L_x] = 1$
- B** $[L_z, x] = 0$
- C** $[L_z, r^2] = 2i\hbar xy$, em que $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
- D** $[L_x, L_y] = -i\hbar L_z$
- E** $[L_z, p_y] = -i\hbar p_x$

RASCUNHO

QUESTÃO 65

O rotor rígido é um modelo mecânico usualmente utilizado para explicar os sistemas rotativos. Ele consiste de duas partículas de massa m mantidas a uma distância fixa a uma da outra. O sistema é livre para girar em três dimensões em torno do centro de massa (mas o ponto central em si é fixo). O modelo do rotor rígido pode ser utilizado na mecânica quântica para avaliar a energia rotacional de uma molécula diatômica, por exemplo. Em um espaço livre de interações externas, o operador de energia H corresponde à energia cinética do sistema, o qual pode ser escrito em termos do momento angular total, L . Sejam E_n (com $n = 0, 1, 2, \dots$) as energias permitidas para o rotor rígido e $l(l + 1)\hbar^2$ os autovalores de L^2 , com l inteiro não negativo. Então, o valor de E_n é

- Ⓐ $n(n + 1)\hbar^2 / (4ma^2)$.
- Ⓑ $n(n + 1)\hbar^2 / (2ma^2)$.
- Ⓒ $n(n + 1)\hbar^2 / (ma^2)$.
- Ⓓ $2n(n + 1)\hbar^2 / (ma^2)$.
- Ⓔ $4n(n + 1)\hbar^2 / (ma^2)$.

QUESTÃO 66

Considere uma partícula de massa m que está limitada a mover-se sobre uma superfície esférica de raio r , mas livre da influência de qualquer outro potencial. Desse modo, a energia dessa partícula é puramente cinética, e o hamiltoniano pode ser escrito em termos do momento angular total, L . Suponha que E_n (com $n = 0, 1, 2, \dots$) sejam as energias permitidas para essa partícula e $l(l + 1)\hbar^2$, os autovalores de L^2 , com l inteiro não-negativo. Nessa situação, o valor de E_n é

- Ⓐ $n(n + 1)\hbar^2 / (4ma^2)$.
- Ⓑ $n(n + 1)\hbar^2 / (2ma^2)$.
- Ⓒ $n(n + 1)\hbar^2 / (ma^2)$.
- Ⓓ $2n(n + 1)\hbar^2 / (ma^2)$.
- Ⓔ $4n(n + 1)\hbar^2 / (ma^2)$.

Texto para as questões 67 e 68

Considere um sistema inicialmente no estado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|1, -1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}|1, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|1, 1\rangle,$$

em que $\langle\theta, \varphi|l, m\rangle = Y_l^m(\theta, \varphi)$ são harmônicos esféricos. Além disso, $\langle l', m'|l, m\rangle = \delta_{l', l} \delta_{m', m}$.

QUESTÃO 67

Considere que os operadores tipo escada referentes ao momento angular podem ser escritos como $L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|l, m \pm 1\rangle$. Então, o valor de $\langle\psi|L_x|\psi\rangle$ é igual a

- A 0.
- B $\frac{(2 + \sqrt{3})}{\sqrt{5}}$.
- C $\frac{2\sqrt{3}\hbar}{5}$.
- D $\frac{2\sqrt{6}\hbar}{5}$.
- E $\frac{2\sqrt{3}\hbar}{\sqrt{5}}$.

QUESTÃO 68

Sejam $L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle$ e os valores esperados para L_x , L_y e L_z restritos a um conjunto de valores discretos. Considerando o estado do sistema descrito, caso L_z seja medido, os valores esperados que L_x pode assumir e suas probabilidades P_{L_x} são respectivamente iguais a

- A \hbar , com probabilidade $P_{\hbar} = 1$.
- B 0 e \hbar , com probabilidades $P_0 = \frac{3}{5}$ e $P_{\hbar} = \frac{2}{5}$.
- C $-\hbar$ e \hbar , com probabilidades $P_{-\hbar} = -\frac{1}{2}$ e $P_{\hbar} = \frac{1}{2}$.
- D $-\hbar$, 0 e \hbar , com probabilidades $P_{-\hbar} = \frac{1}{5}$, $P_0 = \frac{2}{5}$ e $P_{\hbar} = \frac{2}{5}$.
- E $-\hbar$, 0 e \hbar , com probabilidades $P_{-\hbar} = \frac{1}{5}$, $P_0 = \frac{3}{5}$ e $P_{\hbar} = \frac{1}{5}$.

Texto para as questões 69 e 70

Considere o modelo de rotor simétrico, com momentos de inércia I_x , I_y e I_z , em que $I_x = I_y$, todos no sistema de coordenadas do próprio rotor, sendo descrito pelo hamiltoniano $H = (L_x^2 + L_y^2)/(2I_x) + L_z^2/(2I_z)$. Suponha que L_x , L_y e L_z sejam os operadores de momento angular, também definidos no sistema de coordenadas do rotor.

Os autoestados do Hamiltoniano são os harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle\theta, \varphi|l, m\rangle$ com as autoenergias $E_{l, m}$ dadas por $E_{l, m} = \frac{1}{2I_x}l(l+1)\hbar^2 + \left(\frac{1}{2I_x} - \frac{1}{2I_z}\right)m\hbar^2$. Além disso, $L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle$, $L_+ = L_x + iL_y$ e $L_- = L_x - iL_y$, com $L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|l, m \pm 1\rangle$.

QUESTÃO 69

Para qualquer estado do rotor, o valor esperado para uma medida de $(L_x + L_y + L_z)$ deve ser igual a

- A 0.
- B $\frac{\hbar}{2}$.
- C $\frac{m\hbar}{2}$.
- D $m\hbar$.
- E $\frac{3m\hbar}{2}$.

QUESTÃO 70

Suponha que o estado do rotor no instante $t = 0$ seja $Y_3^0(\theta, \varphi)$. Então, é correto concluir que a probabilidade para que, em um instante $t = \frac{4\pi I_x}{\hbar}$, se obtenha o autovalor de L_x com valor \hbar deve ser igual a

- A 0.
- B $\frac{1}{5}$.
- C $\frac{1}{3}$.
- D $\frac{2}{3}$.
- E 1.

QUESTÃO 71

RASCUNHO

Considerando o átomo de hidrogênio dentro da aproximação não-relativística e com partículas sem *spin*, assinale a opção correta.

- Ⓐ A função radial $R_{n\ell}(r)$ se anula n vezes entre $r = 0$ e $r \rightarrow \infty$. A densidade de probabilidade é nula para esses valores de r e também para os zeros da função associada de Legendre $P_\ell^m(\theta)$.
- Ⓑ Como a equação radial depende do número quântico ℓ , a energia do átomo de hidrogênio depende dos números quânticos ℓ e n .
- Ⓒ A cada nível existe um estado de simetria esférica, com número quântico de momento angular ℓ igual a 1. Nesses estados, o momento angular do elétron é nulo, ou seja, o quadrado do momento angular e sua projeção sobre o eixo z são nulos.
- Ⓓ Um estado ligado do átomo de hidrogênio é definido por três números quânticos, n , ℓ e m . Conhecendo esses números, determina-se o valor da energia E_n do átomo, o quadrado do momento angular $\ell(\ell+1)\hbar^2$ e a projeção do momento angular sobre o eixo z , $m\hbar$.
- Ⓔ Os níveis energéticos discretos do átomo de hidrogênio são exclusivamente uma consequência da anulação no infinito da solução radial da equação de Schrödinger e são os únicos valores de energia (E) possíveis correspondentes a soluções finitas, contínuas e quadraticamente somáveis.

QUESTÃO 72

O número de autoestados degenerados correspondentes ao nível energético E_5 do átomo de hidrogênio não relativístico e sem *spin* é igual a

- Ⓐ 0.
- Ⓑ 1.
- Ⓒ 5.
- Ⓓ 15.
- Ⓔ 25.

QUESTÃO 73

Na solução do átomo de hidrogênio não relativístico e sem *spin*, substitui-se os sistemas de coordenadas referentes ao elétron e ao próton pelas coordenadas de movimento relativo do elétron e próton e as coordenadas do movimento do centro de massa do átomo. Considerar a partícula de massa reduzida como sendo o elétron em um potencial central corresponde a desprezar um termo de ordem

- A $\frac{m_e}{m_p}$.
- B $\frac{m_e^2}{m_p}$.
- C $\frac{m_e}{m_e + m_p}$.
- D m_p .
- E m_e^2 .

QUESTÃO 74

Com a função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio dada por $\Psi(r) = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-r/a}$, a distância da origem na qual a probabilidade de encontrar o elétron será máxima é

- A 0.
- B a .
- C $\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{\frac{1}{2}}$.
- D $\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)$.
- E ∞ .

QUESTÃO 75

As autofunções eletrônicas do átomo de hidrogênio, $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, são usualmente expressas em termos de

- A funções delta de Dirac.
- B polinômios de Legendre e funções de Bessel.
- C funções associadas de Legendre de primeira espécie e funções de Bessel.
- D séries de Fourier e funções de Heaviside.
- E harmônicos esféricos e polinômios associados de Laguerre.

QUESTÃO 76

Para uma partícula sem *spin* sujeita a um potencial central e em um estado ligado, com o quadrado de seu momento angular igual a $2\hbar^2$, a projeção do seu momento angular na direção z poderá assumir os valores

- A $-\frac{\hbar}{2}$ e $\frac{\hbar}{2}$.
- B 0 e $2\hbar^2$.
- C $-\sqrt{2}\hbar$ e $\sqrt{2}\hbar$.
- D $-\hbar$, 0 e \hbar .
- E $-\sqrt{2}\hbar$, 0 e $\sqrt{2}\hbar$.

QUESTÃO 77

Caso se use amônia, NH_3 , para a geração de radiação MASER (*microwave amplification by stimulated emission of radiation*),

- A a MASER será gerada pelas moléculas de amônia, cujo operador dipolo elétrico fica proporcional ao operador posição do átomo de nitrogênio, caso se submeta as moléculas a um campo magnético dependente do tempo.
- B as moléculas de amônia sujeitas à radiação de micro-ondas poderão ser consideradas como sistemas de dois níveis sujeitos a uma perturbação independente do tempo.
- C caso a amônia seja tratada como um sistema de dois níveis sujeito a perturbações dependentes do tempo, oscilatória e senoidal, a frequência da radiação incidente necessária para a ressonância e a emissão de radiação estimulada será: $\frac{E_2 - E_1}{\hbar}$,

em que E_1 e E_2 são as energias correspondentes aos estados com o átomo de nitrogênio acima e abaixo, respectivamente, do plano dos átomos de hidrogênio da molécula de NH_3 .

- D a frequência de micro-ondas necessária para a geração do MASER via ressonância é a mesma com que a molécula de amônia gira em torno de seu próprio eixo, que passa pelo átomo de nitrogênio e é perpendicular ao plano formado pelos três átomos de hidrogênio.
- E é importante fazer com que o tempo em que as moléculas de amônia ficam sujeitas à radiação de micro-ondas ressonante

seja igual a $\frac{\pi \hbar}{2 \gamma}$, sendo γ proporcional ao elemento de matriz

do momento de dipolo elétrico da molécula.

QUESTÃO 78

Com relação à ressonância magnética de *spin*, que considera um sistema de *spin* $\frac{1}{2}$ sujeito a dois campos magnéticos perpendiculares, um uniforme e independente do tempo na direção de z , B_0 , e o outro dependente do tempo e oscilatório, $B_1(t)$, assinale a opção correta.

- A Esse sistema pode ser tratado como um problema de dois níveis com perturbação dependente do tempo, cujos hamiltoniano não perturbado H_0 e potencial perturbativo podem ser convenientemente expressos em termos dos operadores S_x , S_y e S_z do momento angular de *spin*.
- B Esse sistema pode ser tratado como um problema de dois níveis com perturbação dependente do tempo, cuja equação diferencial acoplada fornece os coeficientes da expansão linear de um dado estado dependente do tempo e deve ser resolvida por uma série perturbativa.
- C Esse sistema pode ser tratado como um problema de dois níveis com perturbação dependente do tempo, cuja representação matricial do potencial dependente do tempo é diagonal em termos dos autoestados do operador de momento angular S_z .
- D Esse sistema pode ser tratado como um problema de dois níveis com perturbação dependente do tempo, em que a frequência de $B_1(t)$ para a qual o sistema passa a alternar entre os estados de *spin up* e *down* não depende do módulo de B_0 .
- E Esse sistema pode ser tratado como um problema de dois níveis com perturbação dependente do tempo, cujo potencial dependente do tempo somente fornece energia ao sistema, mas não a absorve.

QUESTÃO 79

Com relação às expansões perturbativas para potenciais dependentes do tempo, assinale a opção correta.

- A São utilizáveis apenas para pequenas perturbações cujos termos de ordem superior são desprezáveis.
- B Não se utilizam para potenciais de longo alcance.
- C São utilizáveis caso seja possível somar classes de termos da série com infinitos elementos e desprezar as outras classes.
- D As séries perturbativas precisam ser truncadas a partir de uma dada ordem em termos do potencial perturbativo.
- E Como o potencial perturbativo depende do tempo, todos os termos da expansão também dependerão dele.

QUESTÃO 80

Considerando o efeito fotoelétrico, no qual elétrons são emitidos por átomos de uma placa metálica quando esta é submetida à radiação, assinale a opção correta.

- A Esse efeito poder ser descrito pela transição de estados atômicos ligados para estados com energia positiva.
- B Esse efeito não pode ser descrito sem a o uso da teoria quântica de campos.
- C A aproximação de dipolo elétrico é fundamental para a descrição apropriada desse efeito.
- D A expressão da seção de choque diferencial para o efeito fotoelétrico depende do cálculo dos elementos de matriz entre os estados atômicos $1s$ e $2s$.
- E Esse efeito deve ser tratado com a teoria da perturbação dependente do tempo, pois os campos de radiação dependem explicitamente do tempo.

QUESTÃO 81

Em átomos hidrogenoides,

- A o potencial eletrostático ao qual o elétron mais energético está sujeito tem a forma de um potencial coulombiano puro.
- B a chamada estrutura fina do espectro não se deve à interação *spin*-órbita.
- C estados eletrônicos com menor número quântico azimutal são mais suscetíveis à repulsão da nuvem eletrônica das camadas internas.
- D o espaçamento típico entre raias de estrutura fina é relacionado ao espaçamento entre as raias de Balmer na proporção de $\frac{1}{137}$ para 1.
- E a degenerescência dos estados associados ao elétron mais energético pode ser levantada devido à interação com estados eletrônicos das camadas internas.

QUESTÃO 82

Considerando o efeito Zeeman de átomos hidrogenoides, colocados em um campo magnético uniforme, tratados mediante a teoria da perturbação, assinale a opção correta.

- A A degenerescência dos estados deve ser considerada.
- B O termo de interação *spin*-órbita não precisa ser considerado.
- C O termo de interação do momento magnético orbital com o campo magnético uniforme não precisa ser considerado.
- D O termo de interação do momento magnético de *spin* com o campo magnético uniforme não precisa ser considerado.
- E A perturbação deve ser tratada como uma pequena perturbação mesmo para grandes valores do campo magnético.

RASCUNHO

QUESTÃO 83

A interação de Van Der Waals poder ser tratada como uma perturbação independente do tempo. Se a distância entre dois átomos de hidrogênio for tomada como um parâmetro R , o potencial perturbativo terá a seguinte forma:

$$V = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2), \text{ em que } (x_1, y_1, z_1) \text{ e } (x_2, y_2, z_2)$$

são as coordenadas dos dois elétrons. Tomando a energia do sistema e sua dependência com R como a parte atrativa do potencial de Van Der Waals, assinale a opção correta.

- Ⓐ O potencial atrativo independe da distância entre os átomos.
- Ⓑ O potencial atrativo é proporcional a $\frac{1}{R^3}$ e representa um potencial atrativo de longo alcance.
- Ⓒ O potencial atrativo é proporcional a $\frac{1}{R^6}$ e representa um potencial atrativo de longo alcance.
- Ⓓ O potencial atrativo é proporcional a $\frac{1}{R^{12}}$ e representa um potencial atrativo de longo alcance.
- Ⓔ O potencial atrativo é proporcional a $\frac{1}{R^{\frac{3}{2}}}$ e representa um potencial atrativo de longo alcance.

QUESTÃO 84

Considerando o hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2m} + e\varphi(x, t) - \frac{e}{mc} A(x, t) \cdot p$, em que x e p representam os operadores posição e momento linear, respectivamente; e considerando, ainda, que o potencial escalar, $\varphi(x, t)$, e o potencial vetor, $A(x, t)$, são os geradores do campo de radiação clássica, assinale a opção correta.

- Ⓐ Se $\varphi(x, t)$ e $A(x, t)$ forem independentes do tempo, $\varphi(x, t)$ for o potencial gerado por uma carga pontual positiva e $A(x, t)$ for um campo vetorial uniforme no espaço, o hamiltoniano fornecerá uma boa descrição para o átomo de hidrogênio, com m sendo, aproximadamente, a massa do elétron.
- Ⓑ Se $\varphi(x, t)$ for nulo, o hamiltoniano representará uma partícula livre sujeita à ação de um campo magnético e o sistema poderá ser tratado com o formalismo da teoria da perturbação dependente do tempo.
- Ⓒ Se $A(x, t)$ for nulo, o hamiltoniano representará uma partícula livre sujeita a um campo elétrico constante.
- Ⓓ Se $\varphi(x, t)$ for nulo, o hamiltoniano não poderá representar uma partícula sujeita a um campo elétrico.
- Ⓔ Com a escolha conveniente de $\varphi(x, t)$ e $A(x, t)$, o hamiltoniano poderá representar o átomo de hidrogênio com interação *spin-órbita*.

QUESTÃO 85

Partículas de *spin* semi-inteiro são chamadas de férmions e partículas de *spin* inteiro são chamadas de bósons. A respeito desse assunto, assinale a opção correta.

- A Uma partícula pode ser convertida de férmion em bóson pela aplicação de campos magnéticos apropriados.
- B A transição de férmions para bósons só é possível com radiação de alta frequência, como raios X e raios gama.
- C Dois elétrons ligados formam necessariamente uma nova partícula fermiônica.
- D *Spins* semi-inteiros estão associados a funções de onda simétricas em sistemas de partículas idênticas.
- E Núcleos atômicos podem ser férmions ou bósons.

QUESTÃO 86

Considerando-se a molécula de H_2 , aproximadamente, como um sistema de dois níveis degenerados, em que o hamiltoniano não perturbado, H_0 , é a soma dos hamiltonianos de dois átomos de hidrogênio isolados um do outro, e a perturbação, V , é tomada como os potenciais eletrostáticos entre partículas de diferentes átomos, se os elementos de matriz da perturbação forem dados por $V_{11} = V_{22} = A$ e $V_{12} = V_{21}^* = B$, então as correções de primeira ordem nos níveis de energia dentro da teoria da perturbação para estados degenerados serão

- A $E_1^{(1)} = \sqrt{A^2 + |B|^2}$, $E_2^{(1)} = -\sqrt{A^2 + |B|^2}$.
- B $E_1^{(1)} = \sqrt{A^2 + |B|^2}$, $E_2^{(1)} = -\sqrt{A^2 - |B|^2}$.
- C $E_1^{(1)} = A + |B|$, $E_2^{(1)} = A - |B|$.
- D $E_1^{(1)} = -A + |B|$, $E_2^{(1)} = -A - |B|$.
- E $E_1^{(1)} = |B|$, $E_2^{(1)} = -|B|$.

QUESTÃO 87

Com relação ao método variacional, assinale a opção correta.

- A O método variacional é muito útil para estimar a energia do estado fundamental, E_0 , quando uma solução exata de um problema semelhante estiver disponível.
- B O método variacional se baseia no teorema que afirma que $\bar{E} \geq E_0$, em que \bar{E} é o valor esperado do hamiltoniano com relação à função tentativa $\bar{\psi}$; dividido pela integral do módulo ao quadrado de $\bar{\psi}$, em que E_0 é a energia do estado fundamental.
- C Uma função tentativa relativamente pobre não pode dar uma boa estimativa para a energia do estado fundamental.
- D O método variacional não pode ser usado para calcular autoenergias além da energia do estado fundamental.
- E Uma maneira de enunciar o teorema base do método variacional é afirmar que o valor esperado de H , com relação à função tentativa $\bar{\psi}$, dividido pela integral do módulo ao quadrado de $\bar{\psi}$, não é estacionário com respeito a mudanças infinitesimais em $\bar{\psi}$.

QUESTÃO 88

Usando-se o método variacional, determina-se a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio com a função tentativa $\psi(r) = Ae^{-\alpha r}$, em que A é a constante de normalização e α é o parâmetro variacional. Expressando-se o resultado em termos do raio de Bohr, $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$, a energia é

- A 0.
- B $-\frac{e^2}{4a_0}$.
- C $-\frac{e^2}{2a_0}$.
- D $-\frac{e^2}{a_0}$.
- E $-\frac{2e^2}{a_0}$.

QUESTÃO 89

Considerando-se o problema de uma partícula livre em uma caixa unidimensional definida de $x = -a$ até $x = a$, em que a partícula experimenta um potencial $V = 0$ dentro da caixa e $V = \infty$ fora dela, e usando-se a função tentativa $\psi(x) = a^2 - x^2$, o método variacional fornecerá para a energia do estado fundamental o valor

- A 0.
- B $\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{ma^2}$.
- C $\frac{\pi^2}{8} \frac{\hbar^2}{ma^2}$.
- D $\frac{5}{4} \frac{\hbar^2}{ma^2}$.
- E $\frac{5}{2} \frac{\hbar^2}{ma^2}$.

QUESTÃO 90

O cálculo da energia do estado fundamental do oscilador harmônico simples, $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$, com o método variacional, usando-se a função tentativa $\bar{\psi}(x) = Axe^{-\alpha x^2}$, que corresponde à forma funcional do primeiro estado excitado, mas com o parâmetro variacional a e constante de normalização A , resulta em

- A 0.
- B $\frac{\hbar\omega}{4}$.
- C $\frac{\hbar\omega}{2}$.
- D $\hbar\omega$.
- E $\frac{3}{2} \hbar\omega$.

RASCUNHO

QUESTÃO 91

Considerando a teoria da perturbação independente do tempo para estados não degenerados, em que o hamiltoniano perturbado é expresso por $H = H_0 + V$, sendo que $H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$, e V é o potencial perturbativo, assinale a opção correta.

- A Para se obter a correção de primeira ordem na energia, não é suficiente calcular o valor esperado de V com respeito aos estados não perturbados.
- B A correção de segunda ordem na energia do estado fundamental é sempre negativa. O estado mais baixo tende a ficar ainda mais baixo como resultado da mistura de estados.
- C A correção de segunda ordem nos níveis de energia tende a atrair os níveis conectados por V_{ij} . O de maior energia se desloca para baixo e o de menor energia para cima, com modificações de mesmo módulo.
- D A autofunção Ψ_n é proporcional à autofunção não perturbada $\Psi_n^{(0)}$, ou seja, a perturbação V não mistura autofunções não perturbadas de energias diferentes.
- E O método só desperta interesse prático se a aproximação gerar uma série convergente.

QUESTÃO 92

Considerando H_0 um hamiltoniano com autofunções e autovalores conhecidos, $H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$, e considerando, ainda, que o sistema descrito por H_0 sofre uma pequena perturbação devido a um potencial V , de modo que o novo hamiltoniano se torne $H = H_0 + V$, assinale a opção que apresenta, respectivamente, as correções de primeira ordem na energia e nas autofunções, de acordo com a teoria da perturbação independente do tempo para estados não degenerados.

- A V_{nn} e $\sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)}$
- B $E_n^{(0)}$ e $\Psi_n^{(0)}$
- C $\sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$ e $\sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)}$
- D V_{nn} e $\Psi_n^{(0)}$
- E $E_n^{(0)}$ e $\sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k^{(0)}$

QUESTÃO 93

Considerando que um oscilador harmônico simples seja descrito pelo operador hamiltoniano não perturbado

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \text{ e que a função de onda do estado fundamental seja obtida como } \Psi_0^{(0)}(x) = (\pi a)^{-1/4} e^{-x^2/2a},$$

$a = \frac{\hbar}{m\omega}$, se o sistema sofrer uma perturbação que modifique a

constante de mola $K = m\omega^2$ para um valor ligeiramente diferente $K' = K + \varepsilon m\omega^2$, com $\varepsilon \ll 1$, a correção de primeira ordem na energia do oscilador harmônico, considerando-se a perturbação

$$V = \frac{1}{2} \varepsilon m\omega^2 x^2, \text{ será}$$

- A $\frac{3}{2} \varepsilon \hbar \omega$.
- B $\varepsilon \hbar \omega$.
- C $\frac{1}{2} \varepsilon \hbar \omega$.
- D $\frac{1}{4} \varepsilon \hbar \omega$.
- E 0.

QUESTÃO 94

O efeito Stark é obtido quando se submete um sistema atômico a um campo elétrico uniforme. Nesse sentido, considerando-se apenas o estado fundamental não degenerado do átomo de hidrogênio e a perturbação devida a um campo elétrico na direção z dada por $V = -e|E|z$, se a função de onda do estado fundamental $1s$ for

$$\Psi_0^{(0)}(\mathbf{x}) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}, \text{ em que } a_0 \text{ é o raio de Bohr, } a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

a correção de primeira ordem na energia do estado fundamental será

- A 0.
- B $-ea_0|E|$.
- C $-\frac{1}{\pi}ea_0|E|$.
- D $-2ea_0|E|$.
- E $-3ea_0|E|$.

QUESTÃO 95

Com relação à perturbação de estados degenerados, assinale a opção correta.

- A Em caso de degenerescência, para se usar a teoria da perturbação, a especificação apenas do autovalor de energia não será suficiente. Alguma outra observável será necessária para completar a descrição, ou seja, pode-se tomar como base estados que não são simultaneamente autoestados de H_0 e alguma outra observável A .
- B Diagonalizando-se a matriz construída com a representação matricial da perturbação no subespaço gerado pelos estados degenerados, obtém-se como resultado a correção de ordem zero dos autovetores e da energia.
- C Sempre que houver degenerescência, pode-se escolher o conjunto base de estados não perturbados. Deve-se escolher o conjunto base de modo que a perturbação não tenha elementos fora da diagonal no subespaço varrido pelos estados degenerados, evitando-se, assim, as divergências nos termos da expansão perturbativa.
- D Se o operador perturbação V não for diagonal na representação dos estados base que se esteja usando, pode-se imediatamente escrever a correção de primeira ordem tomando-se o valor esperado de V , exatamente como no caso não degenerado.
- E As correções de ordem superiores podem ser obtidas com as mesmas fórmulas da teoria da perturbação não degenerada, desde que se incluam todas as contribuições dos autoestados não perturbados dos subespaços degenerados.

QUESTÃO 96

Considerando-se o efeito Stark resultante da aplicação de um campo elétrico constante ($V = -ez|E|$), no segundo nível energético do átomo de hidrogênio, usando a teoria da perturbação para estados degenerados, e sabendo que os únicos elementos de matriz de V não nulos são dados por $\langle 2s|V|2p_z \rangle = \langle 2p_z|V|2s \rangle = 3ea_0|E|$, as correções de primeira ordem na energia dos quatro estados degenerados serão

- A 0, 0, 0, 0.
- B $0, 0, -\frac{3}{2}ea_0|E|, \frac{3}{2}ea_0|E|$.
- C $0, 0, -3ea_0|E|, 3ea_0|E|$.
- D $-3ea_0|E|, -\frac{3}{2}ea_0|E|, \frac{3}{2}ea_0|E|, 3ea_0|E|$.
- E $-3ea_0|E|, -ea_0|E|, ea_0|E|, 3ea_0|E|$.

QUESTÃO 97

O operador de levantamento de *spin* S_+ é definido como $S_+ = S_x + iS_y$, e o operador de abaixamento, S_- , é o seu adjunto. O comutador desses dois operadores, $[S_+, S_-]$, é igual a

- A 0.
- B $i\hbar$.
- C $2\hbar S_z$.
- D $-2i\hbar$.
- E $2\hbar^2$.

QUESTÃO 98

Considerando que um feixe de partículas de *spin* $\frac{3}{2}$ deixe um forno e atravesse um campo magnético não uniforme, a interação do momento magnético de *spin* das partículas com o campo magnético

- A não dividirá o feixe inicial.
- B dividirá o feixe em dois feixes separados.
- C dividirá o feixe em três feixes separados.
- D dividirá o feixe em quatro feixes separados.
- E dividirá o feixe em seis feixes separados.

QUESTÃO 99

Com relação ao *spin*, assinale a opção correta.

- A O elétron possui um momento angular próprio, dependente de seus movimentos de translação, chamado de *spin*. Um momento magnético, o momento magnético próprio ou de *spin*, é associado a esse momento angular.
- B Os operadores de *spin*, S_x , S_y e S_z são obtidos pela quantização do momento angular $\mathbf{S} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ do elétron, ou seja, $\mathbf{S} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla)$, da qual seguem as relações de comutação entre S_x , S_y e S_z .
- C A constante de proporcionalidade entre o momento angular de *spin* e o momento magnético de *spin* é a metade da constante de proporcionalidade entre o momento angular orbital e o momento magnético orbital.
- D O operador momento angular total, J , de um elétron é dado pela soma do operador de *spin*, S , e o operador de momento angular orbital, L , ou seja, $J = L + S$, e as autofunções de J são obtidas mediante a combinação linear do produto das autofunções de L e S .
- E O deslocamento do elétron em torno de um núcleo produz um campo magnético proporcional ao momento magnético angular que age sobre o momento magnético próprio do elétron, criando a interação *spin*-órbita, que sempre levanta a degenerescência dos níveis energéticos.

QUESTÃO 100

Aplicando-se uma rotação de 2π em torno de um eixo qualquer sobre uma partícula de *spin* $\frac{1}{2}$ em um estado Ψ , o estado dessa partícula

- A voltará a ser Ψ .
- B passará a ser $-\Psi$.
- C não se alterará se Ψ estiver na direção do eixo de rotação.
- D será multiplicado por um fator de fase que dependerá do estado inicial.
- E será um novo estado decorrente de uma combinação linear de outros estados, dependendo do ângulo entre o eixo de rotação e o momento angular de *spin*.

RASCUNHO

PROVA DISCURSIVA

- Nesta prova, faça o que se pede, usando os espaços para rascunho indicados no presente caderno. Em seguida, transcreva os textos para o **CADERNO DE TEXTOS DEFINITIVOS DA PROVA DISCURSIVA**, nos locais apropriados, pois **não serão avaliados fragmentos de texto escritos em locais indevidos**.
- Em cada questão, qualquer fragmento de texto além da extensão máxima de **trinta** linhas será desconsiderado. Será desconsiderado também o texto que não for escrito na **folha de texto definitivo** correspondente.
- No **caderno de textos definitivos**, identifique-se apenas no cabeçalho da primeira página, pois **não será avaliado** texto que tenha qualquer assinatura ou marca identificadora fora do local apropriado.

QUESTÃO 1

A nanometrologia desempenha um papel crucial na produção de nanomateriais e dispositivos com um alto grau de precisão e confiabilidade. Isso se deve, em grande parte, ao desenvolvimento de estudos teóricos sobre materiais e sistemas nanoestruturados, além do desafio em desenvolver novas técnicas de medição e padrões para atender às necessidades da produção em nanoescala.

Em sistemas complexos, como nanopartículas, nanotubos, poços quânticos, fios quânticos etc., estudos têm sido desenvolvidos com base em procedimentos quânticos bem estabelecidos, os quais se utilizam de métodos de primeiros princípios. Em situações envolvendo sistemas eletrônicos com mais de um elétron, entretanto, a solução de equações diferenciais (como a equação de Schrödinger) é extremamente laboriosa e não permite soluções analíticas. Nesse contexto, como abordagem alternativa e complementar aos experimentos, o advento de simulações de alto desempenho têm atuado de forma indispensável à produção de materiais com propriedades estruturais e eletrônicas desejáveis.

Considerando que o texto acima tem caráter unicamente motivador, redija um texto dissertativo que aborde, necessariamente, de forma objetiva e devidamente fundamentada, os seguintes tópicos:

- ▶ método de Hartree-Fock;
- ▶ teoria do funcional da densidade;
- ▶ aproximação de pseudopotencial.

RASCUNHO – QUESTÃO 1

1	
2	
3	
4	
5	
6	
7	
8	
9	
10	
11	
12	
13	
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	
21	
22	
23	
24	
25	
26	
27	
28	
29	
30	

QUESTÃO 2

A aproximação de Hartree-Fock ocupa um papel fundamental no cálculo das propriedades de sistemas físicos, seja mediante o cálculo direto das propriedades, seja como ponto de partida para tratamentos mais elaborados. Essa aproximação está presente em física nuclear, teoria quântica de campos, estado sólido e física atômica e molecular, ocupando uma posição de destaque nessa última. Partindo da física atômica e molecular, essa aproximação se espalhou pela química, biologia e farmacologia. Programas de computador comerciais, com base nessa aproximação e em suas extensões, calculam propriedades de fármacos, moléculas biológicas e uma enorme gama de sistemas físico-químicos.

Considerando que o texto tem caráter unicamente motivador, redija um texto dissertativo acerca dos aspectos formais da aproximação de Hartree-Fock. Ao elaborar seu texto, aborde, necessariamente, os seguintes aspectos:

- ▶ determinante de Slater;
- ▶ método variacional;
- ▶ combinação linear de orbitais atômicos;
- ▶ campo autoconsistente.

RASCUNHO – QUESTÃO 2

1	
2	
3	
4	
5	
6	
7	
8	
9	
10	
11	
12	
13	
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	
21	
22	
23	
24	
25	
26	
27	
28	
29	
30	