Física IV - 4323204

Escola Politécnica - 2023

GABARITO DA P3

14 de dezembro de 2023

Questão 1

Considere uma partícula, de massa m, que se encontra em uma caixa unidimensional de largura a e potencial $U(x)$ dado por:

$$U(x) = \begin{cases} 0, x \in [0,a] \\ \infty, x \notin [0,a] \end{cases}$$

na qual a função de onda independente do tempo é descrita por:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 1, 2, 3, ...$$

(a) (1,0 ponto) Calcule os valores permitidos para a energia E_n da partícula.

(b) (1,0 ponto) Considerando que a partícula faz uma transição do nível $n = 3$ para o nível $n = 2$, calcule o comprimento de onda do fóton emitido.

(c) (1,0 ponto) Considerando n = 1, calcule a probabilidade de encontrar a partícula entre $x = a/4$ e $x = 3a/4$.

Solução da questão 1

(a) Utilizando a Equação de Schrödinger indepedente do tempo para $n = 2$ no intervalo $[0, a]$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + 0\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} = E_n\psi_n(x) \Rightarrow$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = E_n\sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

(b) A energia do fóton emitido é:

$$\Delta E = E_3 - E_2 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} \Rightarrow \Delta E = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{5h^2}{8ma^2}$$

Logo, o comprimento de onda do fóton emitido é:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{8ma^2c}{5h} \Rightarrow \boxed{\lambda = \frac{8ma^2c}{5h}}$$

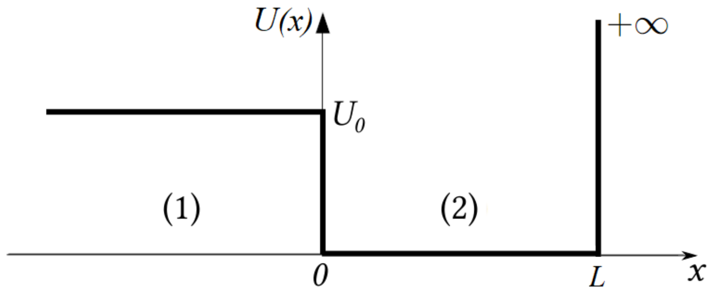
(c) $$P = \int_{a/4}^{3a/4} |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{2}{a}\int_{a/4}^{3a/4} \mathrm{sen}^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx = \frac{2}{a}\left[\frac{x}{2} - \frac{a\,\mathrm{sen}(2\pi x/a)}{4\pi}\right]_{a/4}^{3a/4} \Rightarrow$$

$$\boxed{P = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}}$$

Questão 2

Uma partícula de massa m e energia constante E ($0 < E < U_0$) se move em uma dimensão e está sujeita a um pontecial dado por

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x \leq 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ +\infty & x \geq L \end{cases}$$



(a) (1,0 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo desta partícula para $x \leq 0$ (região 1) e para $0 < x < L$ (região 2).

(b) (1,0 ponto) Considere a lista de funções de onda abaixo, onde A, B, C e D são constantes. Desta lista, escolha a função de onda compatível com cada uma das regiões: região 1 ($x \leq 0$), região 2 ($0 < x < L$) e região 3 ($x \geq L$). Determine k e γ e justifique sua resposta.

- $\psi =$ constante
- $\psi = 0$
- $\psi = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x}$
- $\psi = Ae^{\gamma x}$
- $\psi = Be^{-\gamma x}$
- $\psi = C\,\mathrm{sen}kx + D\cos kx$
- $\psi = C\,\mathrm{sen}kx$
- $\psi = D\cos kx$

(c) (1,0 ponto) Escreva as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada nas regiões (1) e (2) e expresse a condição de contorno que a função de onda deve satisfazer em $x = L$.

(d) (1,0 ponto) Qual é a probabilidade da partícula ser encontrada na região 1? Calcule o valor esperado da posição $\langle x \rangle$ na região 1.

(e) (0,5 ponto) Faça um esboço da função de onda da partícula para o estado fundamental.

Solução da questão 2

(a) A eq. de Schrödinger independente do tempo na região 1 é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + U_0\psi_1 = E\psi_1 \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_1}$$

A eq. de Schrödinger independente do tempo na região 2 é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = E\ \psi_2 \ \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\ \psi_2}$$

(b) A solução geral para a região 1 é

$$\psi_1(x) = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Dado que a função de onda deve ser finita em qualquer ponto do espaço, a solução na região 1 se reduz a

$$\boxed{\psi_1(x) = Ae^{\gamma x}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}}$$

A solução geral para a região 2 é

$$\boxed{\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}kx + D\cos kx, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}$$

A solução geral para a região 3 é

$$\boxed{\psi_3(x) = 0}$$

(c) As condições de continuidade e de contorno da função de onda são:

$$\boxed{\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A = D \\ \psi_2(L) = 0 \Rightarrow C\sin kL + D\cos kL = 0 \\ \frac{d\psi_1}{dx}|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}|_{x=0} \Rightarrow A\gamma = kC \end{cases}}$$

(d) A probabilidade de encontrar a particula na região (1) ($x \leq 0$) é

$$\begin{aligned} P_{\text{barreira}} =& P(x \leq 0) \\ =& \int_{-\infty}^{0} |A|^2 e^{2\gamma x} dx \\ =& \frac{|A|^2}{2\gamma} \end{aligned} \tag{1}$$

Portanto:

$$\boxed{P_{\text{barreira}} = \frac{|A|^2}{2\gamma}}$$

e o valor esperado da posição $\langle x \rangle$ na região 1 é

$$\begin{aligned} \langle x \rangle =& \int_{-\infty}^{0} x \, |\psi(x)|^2 dx \\ =& |A|^2 \int_{-\infty}^{0} x \, e^{2\gamma x} \, dx \end{aligned}$$

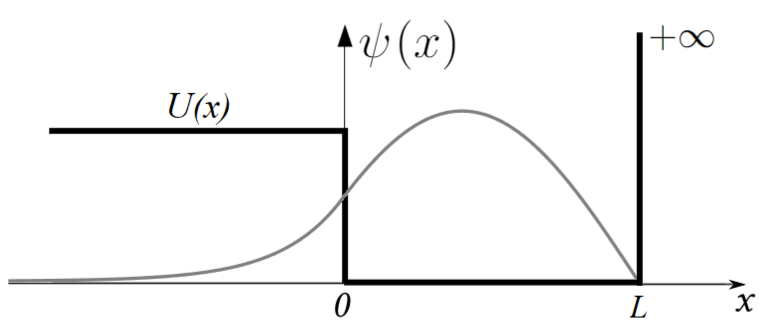
fazendo a mudança de variável $u = 2\gamma x$, a média é

$$\begin{aligned} \langle x \rangle =& \frac{|A|^2}{(2\gamma)^2} \int_{-\infty}^{0} u e^u \, du \\ \langle x \rangle =& - \frac{|A|^2}{(2\gamma)^2} < 0 \end{aligned}$$

Portanto:

$$\boxed{\langle x \rangle = -\frac{|A|^2}{(2\gamma)^2} < 0}$$

(e) Para o estado fundamental, a função de onda é apresentada na figura abaixo.



Questão 3

Considere a função de onda independente do tempo, $\psi = \psi(r, \theta, \phi)$, para o elétron de um átomo de hidrogênio :

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

onde a_0 é denominado raio de Bohr.

(a) (1,0 ponto) Calcule o valor esperado do raio $\langle r \rangle$ nesse estado em termos do raio de Bohr e da constante A.

(b) (1,0 ponto) Calcule a constante de normalização A.

(c) (0,5 ponto) Para esse estado, calcule o módulo do momento angular orbital.

Solução da questão 3

(a) $\langle r\rangle = \int_0^\infty r|\psi|^2 dV = \int_0^\infty r\left[A^2\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2r/a_0}\right](4\pi r^2 dr) \Rightarrow$

$$\langle r\rangle = \left(\frac{4\pi A^2}{a_0^3}\right)\int_0^\infty r^3\left[e^{-2r/a_0}\right]dr$$

Utilizando a mudança de variável $x = 2r/a_0$ na equação acima, encontramos:

$$\langle r\rangle = \left(\frac{4\pi A^2}{a_0^3}\right)\int_0^\infty \left(\frac{a_0^3x^3}{8}\right)e^{-x}\frac{a_0}{2}dx = \left(\frac{\pi a_0 A^2}{4}\right)\int_0^\infty x^3 e^{-x}dx = \left(\frac{\pi a_0 A^2}{4}\right)3! \Rightarrow$$

$$\boxed{\langle r\rangle = \frac{3\pi a_0 A^2}{2}}$$

(b) $\int_0^\infty |\psi|^2 dV = 1 \Rightarrow \int_0^\infty \left[A^2\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2r/a_0}\right](4\pi r^2 dr) = 1 \Rightarrow$

$$\left(\frac{4\pi A^2}{a_0^3}\right)\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0}dr = 1$$

Utilizando a mudança de variável $x = 2r/a_0$ na equação acima, encontramos:

$$\left(\frac{\pi A^2}{2}\right)\int_0^\infty x^2 e^{-x}dx = 1 \Rightarrow \left(\frac{\pi A^2}{2}\right)2 = 1 \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{1}{\pi}}}$$

(c) A função de onda acima possui os números quânticos $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0$. Portanto:

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = 0 \Rightarrow \boxed{L = 0}$$

Formulário

$\hbar \approx 1 \times 10^{-34}$J·s, $\quad$ 1eV $= 1,6 \times 10^{-19}$J, $\quad h = 4,2 \times 10^{-15}$ eV · s, $\quad c = 3 \times 10^{8}$ m/s

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \hbar = h/2\pi$$

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar,\ L_z = m_\ell\,\hbar,\ S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar,\ S_z = m_s\,\hbar,$$

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad E_n = -\frac{13,6}{n^2}\ \text{eV}$$

$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t), \qquad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ onde E é a energia.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad dV = 4\pi r^2 dr$$

$\int_0^d x^2 e^{-x}dx = 2 - (d^2+2d+2)e^{-d}$ e $\int_d^\infty x^2 e^{-x}dx = (d^2+2d+2)e^{-d}$.

$$\int \operatorname{sen}^2(ax)dx = \frac{x}{2} - \frac{\operatorname{sen}(2ax)}{4a}, \quad \int x \operatorname{sen}^2(ax)dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x\operatorname{sen}(2ax)}{4a} - \frac{\cos(2ax)}{8a^2},$$

$$\int x^2 \operatorname{sen}^2(ax)dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4a} - \frac{1}{8a^3}\right)\operatorname{sen}(2ax) - \frac{x\cos(2ax)}{4a^2}, \quad \int_{-\infty}^0 xe^x dx = -1$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-x}dx = n!, \quad \int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\pi}\,\alpha^{-1/2}, \quad \int_{-\infty}^\infty x^2 e^{-\alpha x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\,\alpha^{-3/2}.$$