P3

Física IV

Escola Politécnica - 2006

FAP 2204 - GABARITO DA P3

5 de dezembro de 2006

Questão 1

Uma partícula de massa m executa oscilações harmônicas, em uma dimensão, num potencial $U(x) = m\omega^2 x^2/2$.

(a) (0.5 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para a partícula.

(b) (1,0 ponto) Considere a função de onda $\psi(x) = Ae^{-bx^2}$, onde A e b são constantes. Determine o valor de b para que ψ seja solução da equação do item (a). Qual é o valor da energia associada a esta função de onda?

(c) (1,0 ponto) Calcule a constante de normalização A. Dado: $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) = \sqrt{\pi/\alpha}$

$\boxed{\textbf{Solução da questão 1}}$

(a) A equação de Schrödinger é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

(b) Precisamos da derivada segunda de $\psi(x)=A\exp(-bx^2)$

$$\frac{d\psi}{dx}=-Ae^{-bx^2}2bx$$
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=Ae^{-bx^2}4b^2x^2-Ae^{-bx^2}2b=2(2b^2x^2-b)\psi.$$

Substituindo na eq. de Schrödinger obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}2(2b^2x^2-b)\psi+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

$$\Longrightarrow\left[-\frac{\hbar^2 2b^2}{m}+\frac{1}{2}m\omega^2\right]x^2+\frac{\hbar^2 b}{m}-E=0$$

$$\Longrightarrow\begin{cases} b^2=\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}\Longrightarrow\boxed{b=\dfrac{m\omega}{2\hbar}} & (b<0\Longrightarrow\psi\quad\text{não normalizável})\\ E=\frac{\hbar^2 b}{m}\Longrightarrow\boxed{E=\hbar\omega/2} \end{cases}$$

(c) A constante A é determinada impondo-se $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dx=1$

$$\Longrightarrow A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{2bx^2}dx=1\Longrightarrow A^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}}=1$$

$$\boxed{A=\left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}}$$

$\boxed{\text{Questão 2}}$

Considere um elétron de carga $-e$ que se move num potencial coulombiano nuclear de carga $+Ze$ ($Z = 1$ para o átomo de hidrogênio, $Z = 2$ para o átomo de Hélio uma vez ionizado, etc.). A função de onda do elétron no estado fundamental é dada por

$$\psi(r) = Ce^{-Zr/a_0},$$

onde a_0 é o raio de Bohr.

(a) (1,0 ponto) Determine a constante C de modo que a função de onda seja normalizada.

(b) (1,0 ponto) Calcule a probabilidade de se encontrar o elétron a uma distância maior que a_0/Z do núcleo.

(c) (0,5 pontos) Calcule o valor esperado (ou valor médio) da coordenada radial $\langle r \rangle$.

<u>Dados:</u>

$$\int x^2 e^{-x} dx = (-x^2 - 2x - 2)e^{-x} \,, \qquad \int x^3 e^{-x} dx = (-x^3 - 3x^2 - 6x - 6)e^{-x}$$

Solução da questão 2

(a) A condição de normalização é

$$\int |\psi|^2 dV = |C|^2 \int_0^\infty e^{-2Zr/a_0}(4\pi r^2)dr = 1.$$

Chamando $2Zr/a_0 = x$ obtemos

$$4\pi|C|^2 \left(\frac{a_0}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty x^2 e^{-x}dx = \frac{\pi|C|^2}{2}\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 \Big[-(x^2+2x+2)e^{-x}\Big]_0^\infty = \pi|C|^2\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 = 1.$$

Escolhendo C real e positivo

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

(b) A probabilidade de se encontrar o elétron a uma distância maior que a_0/Z é

$$\mathrm{Prob}(r > a_0/Z) = \int_{a_0/Z}^\infty |\psi(r)|^2(4\pi r^2)dr = 4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \int_{a_0/Z}^\infty e^{-2Zr/a_0}r^2 dr.$$

Chamando $2Zr/a_0 = x$ obtemos

$$\mathrm{Prob}(r > a_0/Z) = \frac{1}{2}\int_2^\infty x^2 e^{-x}dx = \frac{1}{2}\Big[-(x^2+2x+2)e^{-x}\Big]_2^\infty = 5e^{-2}.$$

(c) O valor esperado da coordenada radial é

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty r|\psi(r)|^2(4\pi r^2)dr = 4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \int_0^\infty e^{-2Zr/a_0}r^3 dr.$$

Chamando $2Zr/a_0 = x$ obtemos

$$\langle r\rangle = \frac{1}{4}\left(\frac{a_0}{Z}\right)\int_0^\infty x^3 e^{-x}dx = \frac{1}{4}\left(\frac{a_0}{Z}\right)\Big[-(x^3+3x^2+6x+6)e^{-x}\Big]_0^\infty = \frac{3}{2}\left(\frac{a_0}{Z}\right).$$

Questão 3

Um átomo de potássio com número atômico $Z = 19$ encontra-se no seu estado fundamental.

(a) (1,0 ponto) Escreva a configuração eletrônica do átomo.

(b) (0,5 pontos) Qual é o maior valor do módulo do momento angular (L) do elétron nesse átomo?

(c) (0,5 pontos) Quais são os possíveis valores para a componente z do momento angular (L_z) para os elétrons na subcamada $2p$?

(d) (0,5 pontos) Qual é o módulo do momento angular de spin (S) do elétron de valência? Quais são os possíveis valores da componente z do spin S_z para esse elétron?

Solução da questão 3

(a) A configuração eletrônica é

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$$

(b) O maior valor do número quântico orbital nesse átomo é $l = 1$ correspondendo aos orbitais nas subcamadas $2p$ ou $3p$. Portanto o maior valor possível de L é

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \sqrt{2}\hbar.$$

(c) Para os elétrons da subcamada $2p$ o valor do número quântico orbital é $l = 1$. O número quântico magnético podem assumir valores inteiros tais que $|m| \leq l$. Portanto,

$$L_z = \hbar m = 0, \pm\hbar.$$

(d) O spin do elétron é sempre $s = 1/2$. Portanto o módulo do momento angular de spin do elétron é

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar.$$

O número quântico de spin pode assumir os valores inteiros e semi-inteiros tais que $|m_s| \leq s$. Portanto,

$$S_z = \hbar m_s = \pm\frac{\hbar}{2}.$$

Questão 4

A largura da banda de energia proibida entre a banda de valência e a banda de condução é igual a $1,12$ eV para o silício e $5,47$ eV para o diamante.

(a) (1,0 ponto) Um núcleo excitado de níquel emite um fóton com comprimento de onda $9,3 \times 10^{-13}$ m. Quantos elétrons poderão ser excitados desde o topo da banda de valência até o fundo da banda de condução quando o fóton for absorvido pelo silício?

(b) (1,0 ponto) Considere uma fotocélula feita com silício puro. Qual é o comprimento de onda máximo que pode ser detado por esta fotocélula? Em qual região do espectro eletromagnético este fóton se encontra?

(c) (0,5 ponto) Explique porque o diamante puro é transparente enquanto que o silício puro é opaco.

Dados: O espectro visível está no intervalo 4×10^{-7} m $< \lambda < 7 \times 10^{-7}$ m;
$h = 4,1 \times 10^{-15}$ eV $\cdot$ s.

Solução da questão 4

(a) Para excitar um elétron da banda de valência até a banda de condução são necessários 1,12 eV. O fóton tem energia

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(4,1 \times 10^{-15})(3 \times 10^{8})}{9,3 \times 10^{-13}} \approx 1,32 \times 10^{6} \text{ eV}$$

$$\Longrightarrow \text{número de elétrons} = \frac{1,32 \times 10^{6}}{1,12} \approx 1,2 \times 10^{6} \quad \text{elétrons}$$

(b) O comprimento de onda máximo de um fóton para excitar um elétron da banda de valência para a banda de condução do Si é

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{E} = \frac{(4,1 \times 10^{-15})(3 \times 10^{8})}{1,12} \approx 1,1 \times 10^{-6} \text{ m}$$

Este fóton está na região do infravermelho. Assim, fótons na região do espectro visível, por terem comprimentos de onda menores, podem excitar os elétrons do Si.

(c) No caso do diamante

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{E} = \frac{(4,1 \times 10^{-15})(3 \times 10^{8})}{5,47} \approx 2,2 \times 10^{-7} \text{ m (ultravioleta)}$$

Os fótons na região do espectro visível têm comprimentos de onda maiores e não são absorvidos. O Si absorve fótons na região do espectro visível, enquanto que o diamante não. Desta forma, o Si é opaco e o diamante é transparente.