Física IV - 4320402

Escola Politécnica - 2012

GABARITO DA P3

27 de novembro de 2012

Questão 1

Considere uma partícula de massa m e energia E num potencial unidimensional que é nulo na região $0 < x < d$ e infinito para $x \leq 0$ ou $x \geq d$.

(a) (0,5 ponto) Escreva a função de onda $\psi(x)$ nas regiões $x \leq 0$ e $x \geq d$. Justifique.

(b) (1,0 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo na região $0 < x < d$ e as condições de contorno que a função de onda deve satisfazer.

(c) (1,0 ponto) Resolva a equação de Schrödinger com as condições de contorno, determinando as funções de onda (não é necessário normalizá-las) e os níveis de energia.

(a) Nas regiões $x \leq 0$ e $x \geq d$ o potencial é infinito. Portanto a probabilidade $|\psi(x)|^2 dx$ é nula e $\boxed{\psi(x) = 0}$.

(b) Na região $0 < x < d$ temos a equação de Schrödinger unidimensional com potencial nulo, dada por

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)}.$$

A função de onda $\psi(x)$ deve ser contínua em $x = 0$ e $x = d$. Assim, as condições de contorno são

$$\boxed{\psi(0) = \psi(d) = 0}.$$

(c) A equação de Schrödinger em $0 < x < d$ pode ser reescrita como,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \equiv -k^2\psi(x), \quad \text{onde} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

As soluções desta equação são da forma

$$\psi(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx},$$

onde A' e B' são constantes.

Usando as condições de contorno obtemos

$$\psi(0) = 0 \Longrightarrow B' = -A' \Longrightarrow \psi(x) = A\text{sen}(kx),$$

onde A é outra constante e usamos $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\text{sen}\theta$.

Para que a condição de contorno em $\psi(d) = 0$ seja satisfeita, devemos ter

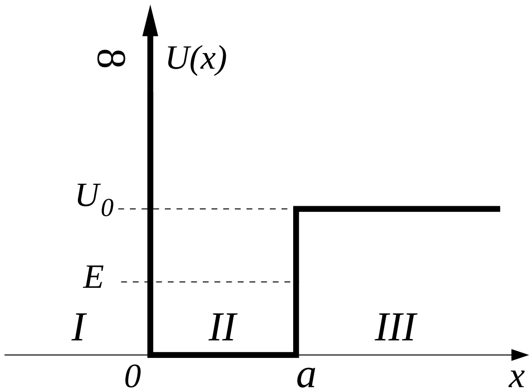
$$A\text{sen}(kd) = 0 \Longrightarrow kd = n\pi \quad \text{com} \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots.$$

Portanto,

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2md^2} \quad \text{e} \quad \psi_n(x) = A\text{sen}(\frac{n\pi x}{d}); \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots}.$$

Questão 2

Uma partícula de massa m, confinada num poço de potencial como indicado na figura, tem energia total $E < U_0$.



$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{para} \quad x \leq 0 \quad (I) \\ 0 & \text{para} \quad 0 < x < a \quad (II) \\ U_0 & \text{para} \quad x \geq a \quad (III) \end{cases}$$

A função de onda da partícula é

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = 0 & \text{na região } I \\ \psi_{II}(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) & \text{na região } II \\ \psi_{III}(x) = Ce^{-\beta x} & \text{na região } III \end{cases}$$

(a) (1,0 ponto) Determine a probabilidade da partícula estar na região III ($x \geq a$), supondo conhecidas as constantes A, B, C, k e β da função de onda e que ela está normalizada.

(b) (1,0 ponto) Determine as constantes k e β.

(c) (0,5 ponto) Escreva as condições de contorno qe a função de onda deve satisfazer (não é necessário resolvê-las).

$\boxed{\textbf{Solução da questão 2}}$

(a) A probabilidade de encontrar a função na região III é

$$P_{III} = \int_a^\infty C^2 e^{-2\beta x} dx = -\frac{C^2}{2\beta} e^{-2\beta x}\Big|_a^\infty \Longrightarrow \boxed{P_{III} = \frac{C^2}{2\beta} e^{-2\beta a}}.$$

(b) A função de onda $\psi_{II} = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ obedece a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = E\psi_{II}(x)$$

Como $d^2\psi_{II}/dx^2 = -k^2[A\sin(kx) + B\cos(kx)] = -k^2\psi_{II}$ obtemos

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \Longrightarrow k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Longrightarrow \boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}.$$

A função de onda $\psi_{III} = Ce^{-\beta x}$ obedece a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + U_0\psi_{III}(x) = E\psi_{III}(x)$$

Como $d^2\psi_{III}/dx^2 = \beta^2 Ce^{-\beta x} = \beta^2\psi_{III}$ obtemos

$$\frac{\hbar^2}{2m}\beta^2\psi_{III} = (U_0 - E)\psi_{III}(x) \Longrightarrow \beta^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \Longrightarrow \boxed{\beta = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}}.$$

(c) As condições de contorno são as seguintes:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Longleftrightarrow B = 0; \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Longleftrightarrow A\sin(ka) + B\cos(ka) = Ce^{-\beta a}; \\ \left.\dfrac{d\psi_{II}(x)}{dx}\right|_a = \left.\dfrac{d\psi_{III}(x)}{dx}\right|_a \Longleftrightarrow k[A\cos(ka) - B\sin(ka)] = -\beta Ce^{-\beta a}. \end{cases}$$

Questão 3

A função de onda normalizada ψ_0 do elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio é dada por

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

onde a_0 é o raio de Bohr e r é a distância ao núcleo.

(a) (1,0 ponto) Calcule a probabilidade de encontrarmos o elétron, no estado fundamental, dentro de uma esfera de raio $2a_0$ centrada no núcleo.

(b) (0,5 ponto) Qual é o módulo do momento angular no modelo de Bohr e na mecânica quântica de Schrödinger para o elétron no estado fundamental? Expresse suas respostas em termos de $\hbar$.

(c) (1,0 ponto) Se um átomo de hidrogênio estiver no 3º nível excitado ($n = 4$), qual é o nível final atingido após a emissão de um fóton com <u>maior</u> comprimento de onda possível? Explique.

Solução da questão 3

(a) A probabilidade de encontrarmos o elétron numa casca esférica de raio r e espessura dr é:

$$P(r)dr = |\psi_0|^2 dV_{casca} = |\psi_0|^2 4\pi r^2 dr = \left(\frac{4r^2}{a_0^3}\right) e^{-2r/a_0} dr$$

A probabilidade $\mathcal{P}(2a_0)$ de encontrarmos o elétron dentro de uma esfera de raio $2a_0$ é

$$\mathcal{P}(2a_0) = \int_0^{2a_0} P(r)dr = \frac{4}{a_0^3}\int_0^{2a_0} r^2 e^{-2r/a_0} dr = \frac{1}{2}\int_0^4 x^2 e^{-x} dx = -\frac{1}{2}(x^2 + 2x + 2)e^{-x}|_0^4.$$

$$\Longrightarrow \boxed{\mathcal{P}(2a_0) = 1 - 13e^{-4}}.$$

(b) Na teoria de Bohr o módulo do momento angular é dado por $L = n\hbar$ com $n = 1, 2, 3...$ enquanto que na mecânica quântica ele é dado por $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ com $\ell = 0, 1, ..., n-1$. No estado fundamental $n = 1$ e portanto $\boxed{L_{Bohr} = \hbar}$ enquanto que $\boxed{L_{Schrödinger} = 0}$.

(c) A energia do fóton é $E_{fóton} = hc/\lambda$. Assim, a transição de $n = 4$ (3º estado excitado) para $n = 3$ (2º estado excitado) é o que corresponde à menor diferença $1/n_f^2 - 1/n_i^2$ (a energia do enésimo nível do átomo de hidrogênio é $E_n = -13,6/n^2$ eV) e portanto ao maior comprimento de onda possível do fóton emitido.

Questão 4

As energias dos estados para um elétron que se move dentro de um poço de potencial infinito unidimensional, são dadas por

$$E_n = Dn^2 \qquad n = 1, 2, 3, ...,$$

sendo $D > 0$ uma constante. As suas respostas devem ser dadas em termos de D. Considere 7 elétrons supostos não interagentes entre si, todos eles dentro deste poço de potencial.

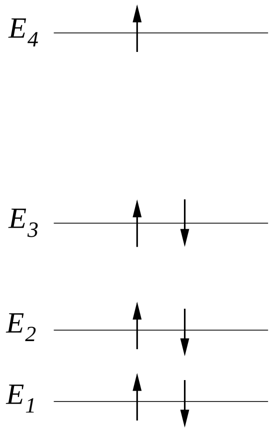
(a) (1,0 ponto) Calcule a energia do estado fundamental deste sistema, levando em conta o spin dos elétrons e o princípio de exclusão de Pauli. Represente a distribuição dos elétrons em um diagrama de energias.

(b) (1,0 ponto) Determine a energia necessária para elevar o sistema para o primeiro estado excitado. Sugestão: utilize o diagrama que você construiu no ítem (a) e teste as possibilidades.

(c) (0,5 ponto) No átomo de hidrogênio as linhas da série de Balmer são devidas aos fótons emitidos quando o elétron passa de um estado com $n \geq 3$ para o estado com $n = 2$. Encontre a expressão equivalente para o poço infinito deste problema com apenas um elétron, isto é escreva $1/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda do fóton emitido pelo elétron na transição $n \to 2$, em função de n, D, h e c.

Solução da questão 4

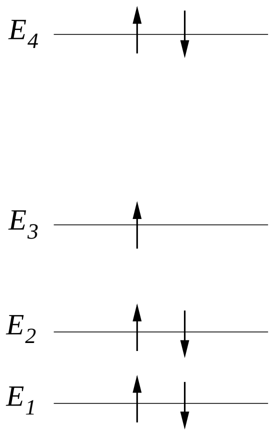
(a) Os níveis de energia são dados por $E_n = Dn^2$. Devido ao princípio de exclusão de Pauli só podemos colocar 2 elétrons com spins opostos em cada nível. Podemos representar o estado fundamental através do diagrama.



A energia do estado fundamental do sistema de 7 elétrons é

$$\boxed{\mathcal{E}_0 = D[2(1^2 + 2^2 + 3^2) + 4^2] = 44D}.$$

(b) O estado excitado com energia mais próxima do estado fundamental é obtido promovendo-se um elétron do nível com energia E_3 para o nível com energia E_4 conforme a figura.



A energia do primeiro estado excitado é

$$\mathcal{E}_1 = D[2(1^2 + 2^2 + 4^2) + 3^2] = 51D.$$

A energia para levar o sistema do estado fundamental até este estado é

$$\boxed{\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0 = 51D - 44D = 7D}.$$

(c) A energia do elétron no nível n é $E_n = Dn^2$. Numa transição $n \to 2$ a energia do fóton é

$$E(n \to 2) = \frac{hc}{\lambda} = Dn^2 - D2^2 \Longrightarrow \boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{D}{hc}(n^2 - 2^2)}.$$

Formulário

$E = hf = hc/\lambda, \quad E = pc, \quad L = n\hbar, \quad \lambda = \dfrac{h}{p},$

$\Delta p_x \, \Delta x \geq \hbar/2, \quad \Delta E \, \Delta t \geq \hbar/2, \quad \hbar = h/(2\pi),$

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x),$

$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar, \; L_z = m_\ell\,\hbar, \; S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar, \; S_z = m_s\,\hbar, \quad E_n = -13,6\dfrac{1}{n^2}\text{ eV},$

$\int e^{-x} dx = -e^{-x}, \quad \int x e^{-x} dx = -(x+1)e^{-x}, \quad \int x^2 e^{-x} dx = -(x^2+2x+2)e^{-x}.$