Física IV - 4323204

Escola Politécnica - 2016

GABARITO DA P3

1 de dezembro de 2016

Questão 1

Uma partícula de massa m e com energia potencial $U(x)$ move-se ao longo do eixo x. A função de onda do estado estacionário (estado com energia bem definida) em que a partícula se encontra é dada por

$$\Psi(x,t) = Ce^{-ax^2/2}e^{-i\,b\,t},$$

onde C, a e b são constantes positivas e reais.

Nos itens abaixo forneça suas respostas em termos de a, b, m e $\hbar$.

(a) (0,5 ponto) Qual é a energia desta partícula?

(b) (1,0 ponto) Calcule a constante C.

(c) (1,0 ponto) Determine $U(x)$.

(d) (0,5 ponto) Calcule $\langle x^2 \rangle$ (valor médio do quadrado da posição).

(e) (0,5 ponto) A incerteza na posição da partícula é dada por $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. Sabendo-se que para este sistema $\langle x \rangle = 0$, determine a incerteza mínima na medida do momento da partícula.

Solução da questão 1

(a) A função de onda de um estado estacionário com energia E tem a forma $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Comparando com a função de onda dada obtemos

$$\boxed{E = \hbar b}.$$

(b) Usando a condição de normalização,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)\Psi^*(x,t)\mathrm{d}x = 1,$$

teremos

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = |C|^2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2} = 1 \Longrightarrow \boxed{C = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4}}.$$

(c) O potencial $U(x)$ pode ser obtido substituindo $\Psi(x,t)$ na equação de Schrödinger dependente do tempo. Usando

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -ib\,Ce^{-ax^2/2}e^{-i\,b\,t} = -i\,b\,\Psi(x,t),$$
$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = (a^2x^2 - a)Ce^{-ax^2/2}e^{-i\,b\,t} = (a^2x^2 - a)\Psi(x,t)$$

obtemos

$$U(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \left[\hbar\,b + \frac{\hbar^2}{2m}(a^2x^2 - a)\right]\Psi(x,t)$$

Como essa relação dever ser válida para quaisquer x e t obtemos

$$\boxed{U(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(a^2x^2 - a + \frac{2mb}{\hbar}\right)}.$$

Solução alternativa: Podemos obter $U(x)$ substituindo o valor da energia calculado no item (a) e a função de onda independente do tempo $\psi(x) = C\exp(-ax^2/2)$ na equação de Schrödinger independente do tempo.

(d) O valor médio do quadrado de x é

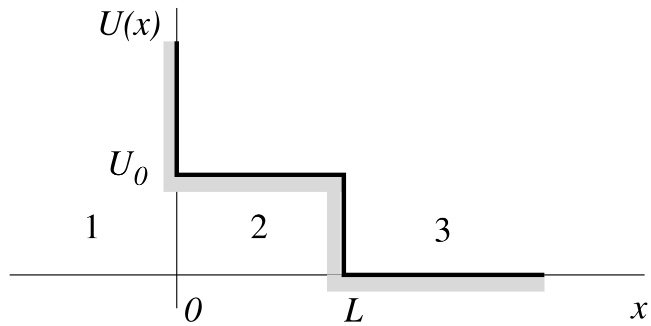
$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{a^3}\right)^{1/2} = \boxed{\frac{1}{2a}}.$$

(e) Obtemos a incerteza mínima do momento usando a igualdade na relação de incerteza de Heisenberg:

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\Delta x} = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{\langle x^2 \rangle}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{2a} = \boxed{\hbar\sqrt{\frac{a}{2}}}.$$

Questão 2

Uma partícula de massa m e energia $E < U_0$ que se move da direita para a esquerda incide sobre a barreira de potencial $U(x)$ mostrada na figura.



$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{para} \quad x \leq 0, \\ U_0 & \text{para} \quad 0 < x < L, \\ 0 & \text{para} \quad x \geq L. \end{cases}$$

(a) (0,5 ponto) Qual é a função de onda $\psi_1(x)$ na região 1 ($x \leq 0$) ?

(b) (1,0 ponto) Escreva a equação de Schrödinger para a partícula na região 2 ($0 < x < L$) e determine a solução geral $\psi_2(x)$ nessa região.

(c) (1,0 ponto) Escreva a equação de Schrödinger para a partícula na região 3 ($x \geq L$) e determine a solução geral $\psi_3(x)$ nessa região.

(d) (1,0 ponto) Escreva as condições de contorno que as funções de onda determinadas nos trechos 1, 2 e 3 devem satisfazer. Determine o sistema de equações que as constantes arbitrárias contidas nas soluções da equação de Schrödinger satisfazem (não é necessário resolver o sistema).

Solução da questão 2

(a) A função de onda $\psi_1(x)$ na região 1, onde o potencial é infinito, deve se anular. Assim,

$$\boxed{\psi_1(x) = 0 \quad \text{para} \quad x \leq 0}.$$

(b) A equação de Schrödinger para a função de onda $\psi_2(x)$ na região 2 é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + U_0\psi_2(x) = E\psi_2(x) \quad \Longrightarrow \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} = K^2\psi_2(x),$$

onde $K = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$. A solução geral é

$$\boxed{\psi_2(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx} \quad \text{para} \quad 0 < x < L}.$$

(c) A equação de Schrödinger para a função de onda $\psi_3(x)$ na região 3 é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = E\psi_3(x) \quad \Longrightarrow \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = -k^2\psi_3(x),$$

onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. A solução geral é

$$\boxed{\psi_3(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad \text{para} \quad x \geq L}.$$

(d) As condições de contorno que devem ser satisfeitas em $x = 0$ e $x = L$ são

$$\begin{aligned}
\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0 &\Longrightarrow A + B = 0, \\
\psi_2(L) = \psi_3(L) &\Longrightarrow Ae^{KL} + Be^{-KL} = Ce^{ikL} + De^{-ikL}, \\
\left.\frac{d\psi_2(x)}{dx}\right|_{x=L} = \left.\frac{d\psi_3(x)}{dx}\right|_{x=L} &\Longrightarrow K(Ae^{KL} - Be^{-KL}) = ik(Ce^{ikL} - De^{-ikL}).
\end{aligned}$$

Questão 3

A função de onda do elétron no átomo de hidrogênio no estado 1s é

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

onde a_0 é o raio de Bohr e C é uma constante real.

(a) (0,5 ponto) Para este estado, dê os possíveis valores dos números quânticos n, ℓ, m_ℓ e m_s do elétron e também o módulo do seu momento angular orbital.

(b) (0,5 ponto) Qual é energia necessária para levar este elétron para o estado 3p?

(c) (1,0 ponto) Use a condição de normalização para determinar o valor de C.

(d) (1,0 ponto) Calcule o valor médio de r no estado 1s.

Solução da questão 3

(a) O estado 1s tem $n = 1$, $\ell = 0$, $m_\ell = 0$ e $m_s = 1/2$ ou $-1/2$. O módulo do momento angular orbital é $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = 0$, uma vez que $\ell = 0$.

(b) Os níveis de energia do átomo de hidrogênio para $n > 1$ são degenerados e só dependem de n. A energia do fóton é

$$E_\gamma = E_3 - E_1 = -13,6\left(\frac{1}{3^2} - 1\right) \approx 12{,}1 \text{ eV}.$$

(c) Usando o elemento de volume em coordenas esféricas, no caso em que o integrando não depende de θ e ϕ ($dV = 4\pi r^2 dr$), teremos (supondo C real)

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

Utilizando a mudança de variável $x = 2r/a_0$, teremos

$$4\pi C^2 \left(\frac{a_0}{2}\right)^3 \int_0^\infty e^{-x} x^2 dx = 4\pi C^2 \left(\frac{a_0}{2}\right)^3 2 = \pi a_0^3 C^2 = 1 \Longrightarrow C = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}$$

(d) O valor médio de r é

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r|\psi|^2 dV = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} r^3 dr.$$

Utilizando novamente a mudança de variável $x = 2r/a_0$, teremos

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{4} \int_0^\infty e^{-x} x^3 dx = \frac{a_0}{4} 6 = 1{,}5\, a_0.$$

Formulário

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2, \quad \Delta E \Delta t \geq \hbar/2, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t},$$

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

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar,\ L_z = m_\ell\,\hbar,\ S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar,\ S_z = m_s\,\hbar,\ E = -\frac{13{,}6}{n^2}\,\mathrm{eV},$$

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