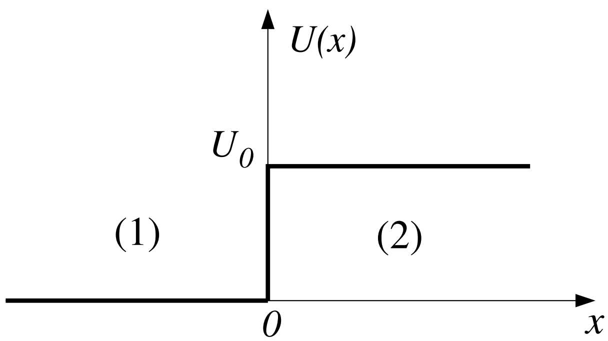
Física IV - 4323204

Escola Politécnica - 2017

P3 – 7 de dezembro de 2017

Questão 1

Uma partícula de massa m que se move em uma dimensão possui energia potencial que varia com a posição como mostra a figura.



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

A partícula está em um estado estacionário com energia $E < U_0$. As soluções $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ da equação de Schrödinger correspondente aos intervalos $x < 0$ (região 1) e $x \geq 0$ (região 2) respectivamente, são

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$
$$\psi_2(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx},$$

onde A, B, C e D são constantes arbitrárias.

(a) (0,5 ponto) Determine D. Justifique.

(b) (1,0 ponto) Calcule k e K em função de m, E, U_0 e $\hbar$.

(c) (1,0 ponto) Para $A = 1$, determine B e C.

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

(a) Para que $\psi_2(x)$ seja limitada quando $x \to \infty$, $\boxed{D = 0}$.

(b) Na região 1 a equação de Schrödinger se escreve como

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1$$

Substituindo $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx}$ na equação acima obtemos

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = -k^2\psi_1 = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 \Longrightarrow \boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Na região 2 a equação de Schrödinger se escreve como

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\psi_2$$

Substituindo $\psi_2(x) = Ce^{-Kx}$ na equação acima obtemos

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = K^2\psi_2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\psi_2 \Longrightarrow \boxed{K = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}}$$

(c) As constantes B e C são determinadas impondo-se em $x = 0$ a continuidade da função de onda e de sua derivada que denotaremos $\psi'(x)$.

$$\left.\begin{array}{l} \psi_1(0) = \psi_2(0) \Longrightarrow 1 + B = C \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Longrightarrow ik - ikB = -KC \end{array}\right\} \Longrightarrow \boxed{B = \frac{ik + K}{ik - K}}, \quad \boxed{C = \frac{i2k}{ik - K}}.$$

Questão 2

Uma partícula quântica de massa m executa oscilações harmônicas, em uma dimensão, num potencial $V(x) = kx^2/2$, onde k é a constante da "mola". Sua função de onda num estado estacionário é $\psi(x) = Ae^{-b\,x^2}$, onde A e b são constantes.

(a) (1,0 ponto) Determine o valor de b (como função de m, k e $\hbar$).

(b) (0,5 ponto) Determine o valor da energia desta partícula neste estado.

(c) (1,0 ponto) Determine o valor médio esperado de x^2 neste estado. Deixe sua resposta em função da constante b.

Solução da questão 2

(a) A equação de Schrödinger é

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

Substituindo $\psi(x) = Ae^{-b\,x^2}$ na equação acima obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-2b + 4b^2x^2)Ae^{-b\,x^2} + \frac{kx^2}{2}Ae^{-b\,x^2} = EAe^{-b\,x^2}$$

$$\Longrightarrow \left(-\frac{\hbar^2 2b^2}{m} + \frac{k}{2}\right)x^2 + \left(\frac{\hbar^2 b}{m} - E\right) = 0.$$

Para um polinômio se anular é necessário que os coeficientes das várias potências sejam nulos. O termo proporcional a x^2 fornece b.

$$\boxed{b = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}}.$$

(b) O coeficiente constante do polinômio do item (a) fornece E.

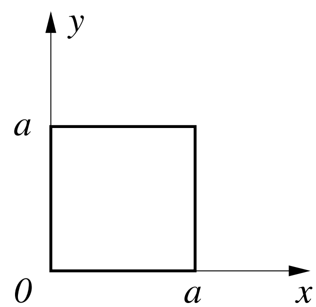
$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 b}{m} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}}.$$

(c) O valor esperado de x^2 é

$$\langle x^2\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2b\,x^2}dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2b\,x^2}dx} = \frac{(2b)^{1/2}}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2(2b)^{3/2}} = \boxed{\frac{1}{4b}}.$$

Questão 3

Um elétron está confinado dentro de uma caixa quadrada de lado a, mostrada na figura abaixo.



Os estados estacionários normalizados deste elétron são dados por

$$\psi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{a}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,\mathrm{sen}\left(\frac{m\pi y}{a}\right),$$

onde n, m são números inteiros positivos. A energia de cada um destes estados é dada por

$$E_{n,m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e a^2}\left(n^2 + m^2\right),$$

onde m_e é a massa do elétron.

(a) (1,0 ponto) Determine a probabilidade de encontrar o elétron na região do plano com $0 \leq x \leq a/2$ e $0 \leq y \leq a/2$, para m e n quaisquer.

(b) (0,5 ponto) Quais são os 4 pares de valores distintos dos números quânticos n e m correspondentes às três menores energias?

(c) (1,0 ponto) Quantos elétrons são necessários para preencher completamente os estados com as energias calculadas no item (b)? Suponha que os elétrons não interagem entre si e leve em conta o princípio de exclusão de Pauli.

Solução da questão 3

(a) A probabilidade de encontrar o elétron na região do plano com $0 \leq x \leq a/2$ e $0 \leq y \leq a/2$ é

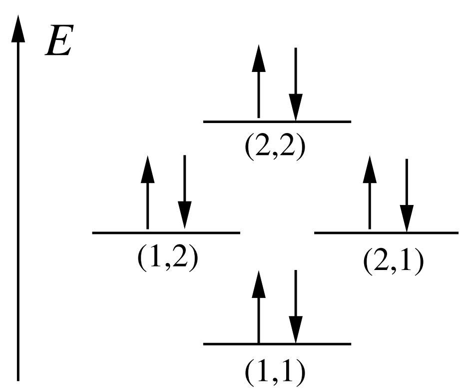
$$P = \frac{4}{a^2} \int_0^{a/2} \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \int_0^{a/2} \operatorname{sen}^2\left(\frac{m\pi y}{a}\right) dy = \frac{4}{a^2}\frac{a^2}{16} = \boxed{\frac{1}{4}}.$$

(b) Os pares de números quânticos (n, m) associados às três menores energias são

$$\boxed{(1,1),\ (1,2),\ (2,1),\ (2,2)}.$$

Observação: a estes pares estão associados estados quânticos com energias $E_{1,1} = \hbar^2\pi^2/ma^2$, $E_{1,2} = E_{2,1} = 5\hbar^2\pi^2/2ma^2$ e $E_{2,2} = 4\hbar^2\pi^2/ma^2$.

(c) Como os elétrons são férmions, só pode haver 2 deles, com spins opostos, em cada um dos 4 estados. Para preencher totalmente os níveis são necessários 8 elétrons, conforme a figura abaixo. Os estados com $(n, m) = (1, 2)$ e $(n, m) = (2, 1)$ têm a mesma energia (degenerados).



Questão 4

(I) (1,5 ponto) Estime o valor da incerteza mínima na velocidade de um elétron não relativístico que está confinado em um poço de potencial unidimensional de largura igual a 10^{-10} m. Dado: massa do elétron $m_e \approx 10^{-30}$ kg.

(II) Um elétron de um átomo de hidrogênio tem os seguintes números quânticos: $n = 2$, $\ell = 1$, $m_\ell = -1$ e $m_s = 1/2$.

(a) (0,5 ponto) Quanto vale a energia deste elétron?

(b) (0,5 ponto) Quanto vale a componente do momento angular orbital deste elétron na direção do eixo z?

Solução da questão 4

(I) Princípio da Incerteza

A incerteza na velocidade do elétron Δv_x pode ser estimada a partir da incerteza no momento:

$$v_x = \frac{p_x}{m} \Longrightarrow \Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m}.$$

A incerteza mínima no momento pode ser obtida tomando-se a igualdade no princípio de incerteza de Heisenberg ($\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$):

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \Longrightarrow \Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} \Longrightarrow \Delta v_x = \frac{\hbar}{2m\Delta x}.$$

Colocando Δx igual à largura do poço obtemos

$$\Delta v_x = \frac{7 \times 10^{-34}}{2(10^{-30})(10^{-10})} = \boxed{3,5 \times 10^6 \text{ m/s}}.$$

(II) Átomo de hidrogênio

(a) A energia dos estados do hidrogênio só dependem do número quântico principal n:

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \Longrightarrow \boxed{E_2 = -\frac{13,6}{2^2} = -3,4 \text{ eV}}.$$

(b) A componente z do momento angular orbital do elétron é

$$\boxed{L_z = m_z\hbar = -\hbar}.$$

Formulário

$$\hbar = 7\times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s},\quad 1\text{eV} = 1,6\times 10^{-19}\text{J},\quad \Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2},\quad \hbar = h/(2\pi),$$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2}\ \text{eV},\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

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

$$\textstyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}},\quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}},\quad \int \operatorname{sen}^2(ax)dx = \frac{x}{2} - \frac{\operatorname{sen}(2ax)}{4a}.$$