Física IV - 4323204

Escola Politécnica - 2018

GABARITO DA P3

P3 – 29 de novembro de 2018

Questão 1

Considere um elétron que se encontra confinado dentro de um poço de potencial unidimensional, com altura infinita e largura d.

(a) (0,5 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para este elétron na região $0 < x < d$ (dentro do poço).

(b) (1,0 ponto) Obtenha as soluções normalizadas $\psi(x)$ do problema acima e as correspondentes energias permitidas E_n para o elétron na região $0 < x < d$.

(c) (1,0 ponto) Considere agora que o elétron encontra-se no estado quântico descrito pela função de onda $\psi(x) = A\sin(3\pi x/d)$, sendo A a constante de normalização obtida no item (b). Determine o comprimento de onda de de Broglie e o momento linear associado à este estado.

(d) (1,0 ponto) Para o mesmo estado do item (c) determine a probabilidade de encontrar o elétron entre $x = 0$ e $x = d/6$.

Solução da questão 1

(a) Como $V(x) = 0$ entre $0 < x < d$, a equação de Schrödinger é dada por

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

e $\psi(x) = 0$ para $x < 0$ ou $x > d$.

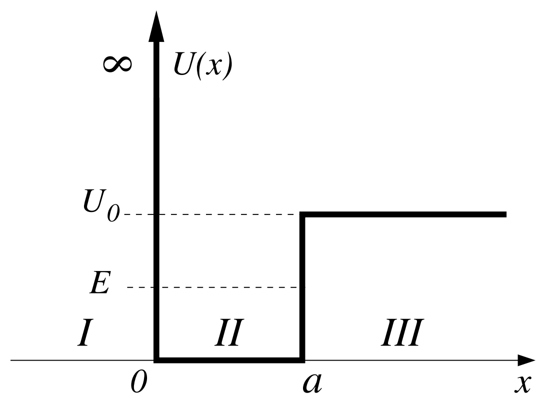
(b) A equação acima admite soluções do tipo $\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$, onde $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Uma vez que $\psi(0) = \psi(d) = 0$ temos que $B = 0$ e $k = \frac{n\pi}{d}$, onde $n = 1, 2, 3, ...$ Portanto $\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8md^2}.}$
As funções de onda normalizadas são obtidas tendo em vista que $\int_0^d |\psi|^2 dx = 1$, de forma que $A^2 \int_0^d \sin^2(kx)dx = 1$. Uma vez que $\int_0^d \sin^2(kx)dx = \frac{d}{2} - \frac{\sin(2kd)}{4k}$, obtemos $A = \sqrt{\frac{2}{d}}$ e finalmente $\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{d}}\sin(\frac{n\pi x}{d})}$.

(c) Comparando $\psi(x)$ com a forma geral do item (b), obtemos $\boxed{n = 3}$ cuja energia é dada por $\boxed{E_3 = \frac{9h^2}{8md^2}}$. O comprimento de onda λ pode ser obtido a partir de $k_n = \frac{2\pi}{\lambda}$ de forma que $\boxed{\lambda = \frac{2\pi}{k_n} = 2d/3}$. O módulo do momento linear é calculado por meio da relação $p^2 = 2mE$, de forma que $\boxed{p_3 = \pm\frac{3h}{2d}}$.

(d) A probabilidade de encontrarmos o elétron entre $x = 0$ e $x = d/6$ é dada por $\int_0^{d/6} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{d}\int_0^{d/6} \sin^2(3\pi x/d)dx$. Uma vez que $\int_0^d \sin^2(kx)dx = \frac{d}{2} - \frac{\sin(2kd)}{4k}$, obtemos que $\boxed{\int_0^{d/6} |\psi(x)|^2 dx = 1/6}$.

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) (1,5 ponto) Escreva a solução geral da equação de Schrödinger independente do tempo em termos dos parâmetros do problema. Justificar as respostas através da análise da equação de Schrödinger. *Não é necessário encontrar o valor das constantes arbitrárias não nulas.*

(b) (1,0 ponto) Escreva as condições de contorno que a função de onda deve satisfazer (não é necessário resolvê-las).

(c) (1,0 ponto) Determine a probabilidade da partícula estar na região III ($x \geq a$), em termos das constantes obtidas no item (a).

Solução da questão 2

(a) A função de onda da partícula é

$$\psi_I(x) = 0 \qquad \text{na região } I.$$

Na região II, a equação de Schrödinger é dada por

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

cuja solução é uma função de onda do tipo $\psi_{II}(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$. Como $d^2\psi_{II}/dx^2 = -k^2[A\sin(kx) + B\cos(kx)] = -k^2\psi_{II}$ obtemos

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

Na região III, a equação de Schrödinger é dada por

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

cuja solução é a função de onda $\psi_{III} = Ce^{-\beta x}$ obedece a equação. Como $d^2\psi_{III}/dx^2 = \beta^2 Ce^{-\beta x} = \beta^2\psi_{III}$ obtemos

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

(b) As condições de contorno são as seguintes:

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

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

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

onde C foi calculado no item (b).

Questão 3

Considere a seguinte função de onda do elétron no átomo de hidrogênio dada por

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

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

(a) (1,0 ponto) Calcule a distância, medida a partir do centro do núcleo, onde a probabilidade radial de encontrar o elétron é máxima.

(b) (1,5 ponto) Calcule a constante C e valor médio de r neste estado.

(c) (0,5 ponto) Quais são os números quânticos associados ao estado do elétron correspondente à função de onda acima. Obtenha o módulo do momento angular orbital L.

Solução da questão 3

(a) Usando o elemento de volume em coordenadas esféricas e tendo em vista que a função de onda não depende de θ e ϕ, a densidade de probabilidade radial $P(r)$ de encontrarmos o elétron a uma distância r é dada por

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2 = 4\pi C^2 e^{-2r/a_0} r^2.$$

A posição $\tilde{r}$ em que $P(r)$ é máxima é obtida derivando a expressão acima de forma que

$$\frac{dP(r)}{dr}\Big|_{r=\tilde{r}} = (1 - \frac{\tilde{r}}{a_0})e^{-2\tilde{r}/a_0} 2\tilde{r} = 0 \qquad \text{e} \qquad \text{portanto} \qquad \boxed{\tilde{r} = a_0.}$$

(b) Podemos encontrar a constante de normalização utilizando a mudança de variável $x = 2r/a_0$ de forma que

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

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

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

(c) A função de onda acima corresponde à $n = 1$ e consequentemente $\ell = 0$, $m_\ell = 0$ (estado 1s). Como elétrons possuem spin 1/2, o número quântico associado à componente z do spin pode ser $m_s = 1/2$ ou $-1/2$. O módulo do momento angular orbital é $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = 0$, uma vez que $\ell = 0$.

Formulário

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

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

$\int\,\text{sen}\,^2(ax)dx = \dfrac{x}{2} - \dfrac{\text{sen}\,(2ax)}{4a}.$

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

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad dV = dxdydz, \quad dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi,$