Física IV - 4323204

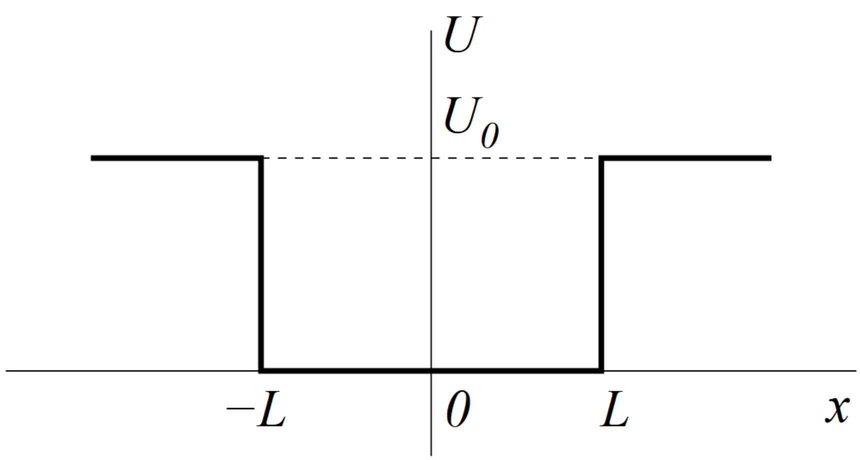
Escola Politécnica - 2019

GABARITO DA P3

P3 – 21 de novembro de 2019

Questão 1

Uma partícula de massa m se move em uma dimensão na presença de um poço de potencial de profundidade U_0 e largura $2L$ conforme a figura abaixo. A partícula se encontra num estado estacionário de energia $E < U_0$.



(a) (1,0 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo desta partícula para $-L < x < L$ e sua solução geral.

(b) (1,0 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo desta partícula para $x < -L$ e $x > L$ e sua solução geral. Qual solução é fisicamente aceitável?

(c) (0,5 ponto) Encontre as condições de contorno que as constantes arbitrárias introduzidas nos itens (a) e (b) devem satisfazer (não é necessário resolver o sistema).

(d) (1,0 ponto) Calcule a probabilidade de encontrar a partícula na região $|x| \geq L$ como função dessas constantes.

Solução da questão 1

(a) A equação de Schrödinger independente do tempo é dada por

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

. A solução geral neste caso é dada por

$$\psi(x) = A\cos(k_1 x) + B\sin(k_1 x)$$

com $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

(b) Para $|x| > L$ a equação de Schrödinger independente do tempo é dada por

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

. A solução geral neste caso é dada por

$$\psi(x) = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x}$$

, onde $k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$.

Para $x > L$ a solução fisicamente aceitável é dada por

$$\psi(x) = De^{-k_2 x}$$

, enquanto para $x < -L$ a solução fisicamente aceitável é

$$\psi(x) = Ce^{k_2 x}.$$

(c) A condição de contorno em $x = L$ fornece a relação

$$A\cos(k_1 L) + B\sin(k_1 L) = De^{-k_2 L}$$

e a condição de contorno em $x = -L$ fornece a relação

$$A\cos(k_1 L) - B\sin(k_1 L) = Ce^{-k_2 L}$$

(d) Usando a relação $P(a < x < b) = \int_{x=a}^{x=b} |\psi(x)|^2 dx$, encontramos que a probabilidade da partícula ser encontrada na região $x \geq -L$ ou $x \geq L$ é dada por

$$p(|x| > L) = \int_{-\infty}^{-L} C^2 e^{2k_2 x} dx + \int_{L}^{\infty} D^2 e^{-2k_2 x} dx = \frac{C^2 e^{-2k_2 L}}{2k_2} + \frac{D^2 e^{-2k_2 L}}{2k_2}.$$

Questão 2

PARTE I

(1,0 ponto) Um átomo de hidrogênio sofre uma transição eletrônica do estado 2p para o estado 1s, emitindo um fóton. A transição transcorre num intervalo de tempo τ, denominado "tempo de vida" do estado 2p. Admitindo que a incerteza na posição do fóton seja igual ao comprimento do pulso de luz associado ao fóton emitido, estime a incerteza no momento linear do fóton.

PARTE II

Um elétron encontra-se num poço de potencial unidimensional com barreiras infinitas, situado entre $0 < x < L$. No instante $t = 0$, a função de onda deste elétron é dada por $\Psi(x, t = 0) = iA(x - L/2)^3$, sendo A uma constante real.

(a) (1,0 ponto) Encontre a derivada $\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$ na posição $x = L/4$ no instante $t = 0$. Expresse sua resposta em termos de A, L e das constantes universais.

(b) (1,0 ponto) Justifique se o estado acima é estacionário.

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

PARTE I

De acordo com o princípio da incerteza $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$. Uma vez que o fóton possui tempo de vida τ e se propaga com velocidade c, podemos estimar sua incerteza na posição por $\Delta x = c\tau$. Portanto, obtemos $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2c\tau}$. OBS: Caso seja usada a relação $\Delta p \Delta x \geq \hbar$, obtém-se $\Delta p \geq \frac{\hbar}{c\tau}$.

PARTE II

(a) De acordo com a equação de Schrödinger é dada por $i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t)$. No caso do poço infinito, $V(x) = 0$ entre $0 < x < L$, ela torna-se

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = 6iA(x - \frac{L}{2}).$$

Utilizando o lado direito da equação acima, obtemos $\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{3\hbar L}{4M}A$.

(b) Para o estado ser estacionário devemos ter $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, sendo E a energia do elétron, de forma que $\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi(x,t)$. Uma vez que no presente caso $\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \neq \Psi(x,t)$ em $t = 0$ o estado acima não é estacionário.

Questão 3

A função de onda do elétron no átomo de hidrogênio, no estado $1s$, é dada por

$$\psi_{100}(r,\theta,\phi) = Ce^{-\frac{r}{a_0}},$$

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

(a) (1,0 ponto) Determine a região do espaço em torno do próton onde a energia deste elétron, na descrição da mecânica quântica, é menor do que a energia potencial do elétron, na descrição da mecânica clássica. Apresente a resposta em termos do raio de Bohr a_0.

(b) (0,5 ponto) Use a condição de normalização para determinar o valor de C.

(c) (1,0 ponto) Para este estado, escreva a expressão da distribuição de probabilidade radial (densidade de probabilidade radial). Calcule o valor de r para o qual ela é máxima.

(d) (1,0 ponto) Calcule o valor numérico da probabilidade de encontrar o elétron a uma distância maior do que a_0. Utilize as estimativas para potências de e: $e = 2.7$, $e^2 = 7.4$, $e^3 = 20$, $e^4 = 55$.

$\boxed{\textbf{Solução da questão 3}}$

(a) A energia do átomo de hidrogênio é dada por $E_n = -\frac{me^4}{32\epsilon_0^2\hbar^2\pi^2n^2}$. A região em que ela é menor que sua energia potencial satisfaz a condição

$$-\frac{me^4}{32\epsilon_0^2\hbar^2\pi^2n^2} < \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

No estado $n = 1$ equivale a $r > \frac{8\pi\hbar^2\epsilon_0}{me^2} = 2a_0$, sendo a_0 o raio de Bohr.

(b) A constante de normalização é obtida lembrando-se que

$$\int_0^\infty C^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} 4\pi r^2 dr = 1 \rightarrow 4\pi C^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = 1$$

Efetuando os cálculos, obtemos que

$$4\pi C^2 \left(-\frac{a_0 r^2}{2} - \frac{a_0^2 r}{2} - \frac{a_0^3}{4}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} \Bigg|_0^\infty = 4C^2 a_0^3 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}.$$

(c) Dada a distribuição de probabilidades radial

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}},$$

o valor de r no qual $\rho(r)$ é máximo satisfaz a condição

$$\rho'(r) = \frac{1}{\pi a_0^3}\left(2r - \frac{2r^2}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}}.$$

Temos então que

$$\rho'(r) = 0 \Rightarrow r = a_0.$$

(d) A probabilidade de encontrarmos o elétron na região $r > a_0$ é dada por

$$p\left(r > a_0\right) = \int_{a_0}^{\infty} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} 4\pi r^2 dr.$$

Efetuando a integral acima, obtemos

$$p\left(r > a_0\right) = \frac{4}{a_0^3}\left(-\frac{a_0 r^2}{2} - \frac{a_0^2 r}{2} - \frac{a_0^3}{4}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}}\Bigg|_{a_0}^{\infty} \tag{1}$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\left(\frac{a_0^3}{2} + \frac{a_0^3}{2} + \frac{a_0^3}{4}\right) e^{-\frac{2a_0}{a_0}} = 5e^{-2} = 0,675. \tag{2}$$

Formulário

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

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

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

$E_n = -\frac{me^4}{32\epsilon_0^2\hbar^2\pi^2 n^2}$, $\quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$

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

$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t)$, $\qquad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ onde E é a energia.

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

$\int_0^d x^2e^{-x}dx = 2 - (d^2+2d+2)e^{-d}$ e $\int_d^\infty x^2e^{-x}dx = (d^2+2d+2)e^{-d}$.