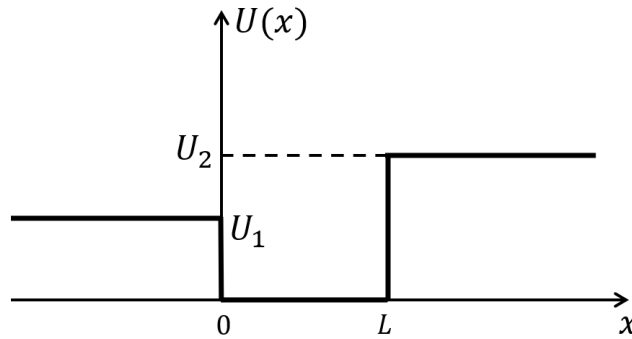


Física IV - 4323204
 Escola Politécnica - 2024
 GABARITO DA P3
28 de novembro de 2024

Questão 1

Um elétron é confinado pelo potencial

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{se } x < 0 \quad (\text{Região I}) \\ 0 & \text{se } 0 \leq x < L \quad (\text{Região II}) \\ U_2 & \text{se } x \geq L \quad (\text{Região III}), \end{cases}$$



onde $U_2 > U_1$. A solução geral para a função de onda do elétron é dada por $\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \varphi(x)$, onde

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\text{I}} = Ae^{-\gamma_1 x} + Be^{+\gamma_1 x}, & \gamma_1^2 = \frac{2m_0(U_1 - E)}{\hbar^2}, \text{ se } x < 0 \\ \varphi_{\text{II}} = C \cos kx + D \sin kx, & k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \text{ se } 0 \leq x < L \\ \varphi_{\text{III}} = Fe^{-\gamma_2 x} + Ge^{+\gamma_2 x}, & \gamma_2^2 = \frac{2m_0(U_2 - E)}{\hbar^2}, \text{ se } x \geq L, \end{cases}$$

A, B, C, D, F e G são constantes reais, e E ($0 < E < U_1$) é a energia do elétron.

(a) (1,0 ponto) Encontre os valores das constantes A e G . Justifique.

- (b) (1,0 ponto) Escreva as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada em $x = 0$ e $x = L$.
- (c) (1,0 ponto) Determine a probabilidade, P_{III} , de encontrar o elétron na região III, em termos de L , F e γ_2 .

Solução da questão 1

(a) A função de onda deve ser finita em todo o espaço. Logo $A = G = 0$.

(b) As condições de continuidade da função de onda e suas derivadas são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_{\text{I}}(0) = \varphi_{\text{II}}(0) \Rightarrow B = C \\ \varphi_{\text{II}}(L) = \varphi_{\text{III}}(L) \Rightarrow C \cos(kL) + D \sin(kL) = F e^{-\gamma_2 L} \\ \frac{d\varphi_{\text{I}}}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{d\varphi_{\text{II}}}{dx} \Big|_{x=0} \Rightarrow \gamma_1 B = kD \\ \frac{d\varphi_{\text{II}}}{dx} \Big|_{x=L} = \frac{d\varphi_{\text{III}}}{dx} \Big|_{x=L} \Rightarrow -kC \sin(kL) + kD \cos(kL) = -\gamma_2 F e^{-\gamma_2 L} \end{array} \right.$$

(c) $P_{\text{III}} = \int_L^\infty F^2 e^{-2\gamma_2 x} dx \Rightarrow P_{\text{III}} = \frac{F^2 e^{-2\gamma_2 L}}{2\gamma_2}$

Questão 2

Uma partícula de massa m encontra-se no estado estacionário cuja função de onda é dada por

$$\Psi(x, t) = Ae^{-(bmx^2)/\hbar}e^{-ibt},$$

com A e b são constantes positivas e reais.

- (a) (1,0 ponto) Determine a constante A .
- (b) (1,0 ponto) Neste estado, determine a energia E da partícula.
- (c) (1,0 ponto) Calcule $\langle x \rangle$ (valor médio da posição x) e $\langle x^2 \rangle$. Usando a relação $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, determine a incerteza Δx . A partir do princípio de incerteza, determine a incerteza mínima para o momento da partícula.

Solução da questão 2

(a) Usando a condição de normalização,

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

teremos

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{2bm}{\hbar} x^2 \right] dx = 1.$$

Usando o resultado (formulário) para integrais gaussianas,

$$|A|^2 \left(\frac{\pi \hbar}{2bm} \right)^{1/2} = 1.$$

Logo,

$$A = \left(\frac{2bm}{\pi \hbar} \right)^{1/4} = \left(\frac{4bm}{\hbar} \right)^{1/4}$$

(b) A função de onda $\Psi(x, t) = Ae^{-(bm x^2)/\hbar} e^{-ibt}$ pode ser escrita como

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar},$$

onde

$$\psi(x) = Ae^{-(bm x^2)/\hbar},$$

$$e^{-ibt} = e^{-iEt/\hbar}.$$

Utilizando a equação acima, a energia E da partícula é

$$-ibt = -\frac{iEt}{\hbar} \Rightarrow \boxed{E = b\hbar}$$

(c)

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2bm}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp \left[-\frac{2bm}{\hbar} x^2 \right] dx = 0 \Rightarrow \boxed{\langle x \rangle = 0}$$

(função ímpar integrada em intervalo simétrico).

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{2bm}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp \left[-\frac{2bm}{\hbar} x^2 \right] dx = \left(\frac{2bm}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\hbar}{2bm} \right)^{3/2} = \frac{\hbar}{4bm} \Rightarrow$$

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{4bm}}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{bm}} \Rightarrow \boxed{\Delta x = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{bm}}}$$

Usando a relação de incerteza, teremos

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2 \Delta x} = \sqrt{bm\hbar} \Rightarrow \boxed{\Delta p_x \geq \sqrt{bm\hbar}}.$$

Questão 3

O estado fundamental eletrônico do átomo de hidrogênio (H) é dado pela função de onda $\Psi(r, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \varphi(r)$, onde $E = -13.6$ eV,

$$\varphi(r) = \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}},$$

e $a_B = 0.0529$ nm é o raio de Bohr. Para este estado fundamental,

- (a) (1,0 ponto) Calcule a função densidade de probabilidade radial $P(r)$ de encontrar o elétron em torno do núcleo.
- (b) (1,0 ponto) Calcule a distância, medida a partir do centro do núcleo, onde a probabilidade radial de encontrar o elétron é máxima.
- (c) (1,0 ponto) No modelo de Bohr, o elétron realiza uma órbita circular de raio a_B e possui momento angular igual a $\hbar$ no estado fundamental. Na mecânica quântica, qual o momento angular orbital do elétron neste mesmo estado, e qual o significado de a_B ?
- (d) (1,0 ponto) Suponha agora que um elétron realiza uma transição do nível $n = 2$ para o estado fundamental ($n = 1$). Calcule a energia do fóton emitido em Elétron-volt.

Solução da questão 3

- (a) A densidade de probabilidade radial $P(r)$ de encontrarmos o elétron a uma distância r do núcleo é dada por:

$$P(r) = 4\pi r^2 \varphi^2(r) \Rightarrow P(r) = \frac{4r^2 e^{-2r/a_B}}{a_B^3}$$

- (b)

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{8r e^{-2r/a_B}}{a_B^3} + \frac{-8r^2 e^{-2r/a_B}}{a_B^4} = 0 \Rightarrow 1 - \frac{r}{a_B} = 0 \Rightarrow r = a_B$$

- (c) Na mecânica quântica, no estado fundamental do H, o momento angular do elétron é zero, e a_B corresponde à distância entre o elétron e o núcleo onde a densidade de probabilidade radial é máxima.

- (d)

$$E = E_2 - E_1 = -\frac{13,6 \text{ eV}}{2^2} + \frac{13,6 \text{ eV}}{1^2} \Rightarrow E = 10,2 \text{ eV}$$

Formulário

$$\hbar \approx 1 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}, \quad 1\text{eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}, \quad h = 4,2 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}, \quad c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \hbar = h/2\pi$$

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

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t), \quad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \text{ onde } E \text{ é a energia.}$$

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

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

$$\int \sin^2(ax) dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}, \quad \int x \sin^2(ax) dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(2ax)}{4a} - \frac{\cos(2ax)}{8a^2},$$

$$\int x^2 \sin^2(ax) dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4a} - \frac{1}{8a^3} \right) \sin(2ax) - \frac{x \cos(2ax)}{4a^2}, \quad \int_{-\infty}^0 x e^x dx = -1$$

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

$$\int_{-\infty}^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 0 \text{ se } f(-x) = -f(x)$$