www.estudar.com.vc

Física IV

Resumo e Exercícios P3

1. Princípio da Incerteza

A incerteza de uma grandeza está associada ao conceito estatístico de desvio padrão.
Relembrando:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

$\Delta x = desvio\ padrão\ da\ posição\ x$
$\langle x \rangle = valor\ médio\ da\ posição\ x$

Incerteza: posição e momento linear

$$\Delta x\ \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Incerteza: energia/tempo

$$\Delta E\ \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

2. Função de Onda

A função de onda $\Psi(x, y, z, t)$ nos ajuda a determinar os valores médios da posição, do momento linear, da energia e do momento angular das partículas na mecânica quântica.

$|\Psi(x, y, z, t)|^2$ é $uma\ \boldsymbol{densidade\ de\ probabilidade}\ , ou\ seja, |\Psi(x, y, z, t)|^2\ dV$ é $a\ probabilidade\ de\ encontrar\ a\ partícula\ dentro\ de\ um\ volume\ dV\ no\ instante\ t.$

3.Estado estacionário

Estado com energia bem definida E, nesse caso a função de onda pode ser separada em duas funções, uma que só depende das coordenada espaciais ($\psi(x,y,z)$) e outra que só depende do tempo.

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z) * e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

No caso estacionário a densidade de probabilidade se resume a :

$$|\Psi(x,y,z,t)|^2 = |\psi(x,y,z)|^2$$

4. Normalização da Função de Onda

Em um caso genérico para função de onda de estado estacionário, tridimensional, como o módulo ao quadrado da função de onda representa uma densidade de probabilidade, tem-se:

$$\iiint_{espaço\ todo} |\psi(x,y,z)|^2\, dxdydz = 1$$

Se o problema é unidimensional:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1$$

5. Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger fornece uma forma de se determinar a função de onda de uma partícula sujeita a uma energia potencial $U(x)$.

A equação de Schrödinger para uma partícula em um estado estacionário de energia E que se move apenas ao longo do eixo x é dada por:

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

6. Condições que a Função de Onda deve obedecer.

1. A função de onda $\psi(x)$ é sempre contínua
2. A derivada da função de onda $\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)$ é contínua nos pontos em que $U(x)$ é finito.
3. Para $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,dx=1$ é necessário que $\psi(x)\to 0$ quando $x\to\ \pm\infty$.

7. Partícula em uma caixa.

A caixa é representada por três regiões:

$$\begin{cases} 1)\ U(x)=\ \infty, & x\le 0 \\ 2)\ U(x)=0, & 0<x<L \\ 3)\ U(x)=\infty, & x\ge L \end{cases}$$

Quando $U(x)\to\infty$, para que haja solução da equação de Schrödinger devemos necessariamente ter $\psi(x)\to 0$, em virtude do termo $U(x)\psi(x)$ $(eq\ de$ Schrödinger) ter que necessariamente ser limitado. Em virtude disso, temos que $\psi_1(x)=\psi_3(x)=0$.
Na região 2, temos $U(x)=0\ e\ E$ representando a energia no estado estacionário, logo a eq de Schrödinger fica:

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

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2(x)$$

$\frac{2mE}{\hbar^2}$ é $uma\ constante\ positiva\ que\ chamaremos\ de\ k^2, assim$:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k^2\psi_2(x) = 0$$

Como essa é uma equação diferencial linear a coeficientes constantes homogênea sua solução será do tipo:

$$Ae^{bx} = \psi_2(x)$$

Substituindo essa expressão na equação diferencial e calculando as raízes do polinômio característico encontramos a solução geral da equação:

$$\psi_2(x) = A\ e^{+ikx} + B\ e^{-ikx}$$

Como a função de onda é sempre contínua, podemos falar que:

$$(1)\ \psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) = 0$$
$$(2)\ \psi_2(x=L) = \psi_3(x=L) = 0$$

$$(1)\ A + B = 0 \Rightarrow A = -B$$
$$\Rightarrow \psi_2(x) = A\left(e^{+ikx} - e^{+ikx}\right)$$
$$\Rightarrow 2Ai\sin(kx) = A'\sin(kx)$$

$$(2)\ A'\sin(kL) = 0$$
$$kL = n\pi\ com\ n\ \epsilon\ Z^*$$

$$k = \frac{n\pi}{L} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

$$\psi_2(x) = A' \sin\left(\frac{n\pi}{L}\,x\right)$$

Finalmente, podemos aplicar a condição de normalização para determinar a constante A'.

$$\int_0^L |\psi_2(x)|^2\,dx = 1$$

$$\int_0^L |A'|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}\,x\right)dx = 1$$

$$A' = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

8. Poço de Potencial

O poço de potencial finito é uma região descrita pelas seguintes energias potenciais:

$$\begin{aligned}
&1)\ U(x) = U_0, && x \leq 0\\
&2)\ U(x) = 0, && 0 < x < L\\
&3)\ U(x) = U_0, && x \geq L
\end{aligned}$$

Tomando $U_0 > E$ $(energia\ do\ estado\ estacionário)$, temos nas regiões 1 e 3:

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

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

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

Note que agora $\psi(x)$ é multiplicado por uma constante positiva, pois $U_0 > E$. Assim, se denotarmos:

$$b = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

As soluções gerais para as regiões 1 e 3, serão do tipo:

$$\psi_1(x) = Ae^{-bx} + B\ e^{+bx}$$
$$\psi_3(x) = Ee^{-bx} + F\ e^{+bx}$$

Porém, como a função de onda tem que ser normalizável temos pela condição 3 do item 6 $A = 0\ e\ F = 0$, logo:

$$\psi_1(x) = Be^{+bx}$$
$$\psi_3(x) = Ee^{-bx}$$

Na região 2 a solução geral é idêntica ao obtido para a partícula na caixa, no entanto as condições de contorno serão diferentes

$$\psi_2(x) = C\ e^{+ikx} + D\ e^{-ikx}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

9. Barreira de Potencial

Para analisar a barreira de potencial vamos considerar uma partícula que viaja da esquerda para a direita. A barreira de potencial é uma região, cujas energias potenciais serão dadas por:

$$1)\ U(x) = 0, \qquad x \leq 0$$
$$2)\ U(x) = U_0, \qquad 0 < x < L$$
$$3)\ U(x) = 0, \qquad x \geq L$$

Vamos analisar o caso em que $U_0 > E$. Dessa forma, as formas gerais das funções de onda nas regiões 1, 2 e 3 serão:

$$\psi_1(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$$
$$\psi_2(x) = Ce^{-bx} + De^{+bx}$$
$$\psi_3(x) = Ee^{+ikx} + Fe^{-ikx}$$

Na região 3 , Fe^{-ikx} representa uma partícula que viaja no sentido decrescente de x, como a partícula viaja da esquerda para a direita essa solução não é fisicamente aceita, porém na região 1 há a possibilidade de reflexão na barreira, então Be^{-ikx} é fisicamente possível. Assim, as soluções ficam:

$$\psi_1(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$$
$$\psi_2(x) = Ce^{-bx} + De^{+bx}$$
$$\psi_3(x) = Ee^{+ikx}$$

Obs: quando uma partícula penetra uma barreira de potencial damos o nome de tunelamento.

10. Caso $E > U_0$

Suponha agora que uma partícula esteja sujeita a um potencial $U_0 < E$, então:

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

Chamaremos $\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$ de k'^2, de tal forma que equação fica:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k'^2\,\psi(x)$$

A solução geral de $\psi(x)$ será:

$$\psi(x) = Ae^{+ik'x} + Be^{-ik'x}$$

11. Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico quântico é definido para uma energia potencial $U(x)$ similar ao que acontecia em um oscilador massa-mola, ou seja:

$$U(x) = \frac{K(mola)x^2}{2} = \frac{m\omega^2x^2}{2}$$

Dessa forma, a equação de Schrödinger fica:

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

A solução dessa equação diferencial é bem mais complicada que as anteriores, ela pode ser escrita em função do n-ésimo polinômio de Hermite, de tal forma que a energia E_n associada a cada ψ_n será:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

A solução para o estado fundamental $(n = 0)$ $será$:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

12.Problemas tridimensionais

Em um caso tridimensional a equação de Schrödinger (para estado estacionário) se torna da forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z).$$

No caso do átomo de hidrogênio temos o problema bem representado por simetria esférica, onde:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\, r}$$

Assim, a equação de Schrödinger pode ser resolvida utilizado o Laplaciano em coordenadas esféricas e a energia potencial radial, essa solução nos leva a 3 funções separadas.

$$\psi(r,\theta,\varphi) = F(r)\,G(\theta)\,H(\varphi)$$

Essas soluções nos conduziram a 3 números inteiros $n, l\ e\ m_l$, onde:

$$n\ (número\ quântico\ principal) = 1,2,3, \dots$$
$$n = 1 \rightarrow camada\ K$$
$$n = 2 \rightarrow camada\ L \dots$$
$$E_n = -\frac{13{,}6}{n^2}\ eV\ (depende\ apenas\ de\ n)$$

$$l\ (número\ quântico\ magnético)$$
$$0 \leq l \leq n-1$$
$$l = 0 \rightarrow subnível\ s$$
$$l = 1 \rightarrow subnível\ p \ldots$$

$$m_l\ (número\ quântico\ magnético\ orbital)$$
$$-l \leq m_l \leq l$$

O momento angular do elétron será dado por:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

Note que, como l pode ser zero o momento angular poderá ser nulo, o que não ocorria no modelo de Bohr.
O momento angular projetado em uma direção, por exemplo z, será dado por:

$$L_z = m_l\,\hbar$$

13.Normalização da função de onda do átomo de hidrogênio

Como a função de onda é agora tridimensional e com simetria esférica, porém que depende apenas de r, a condição de normalização será:

$$\int_0^{+\infty} |\psi(r)|^2\, 4\pi r^2\, dr = 1$$

14. Experiência de Stern-Gerlach

Nesta experiência foram espalhados átomo de Ag através de um campo magnético não uniforme, os momentos de dipolo medidos não podiam ser explicados pelo momento angular orbital L_z.

Em 1925, Gouldsmit e Uhlembeck propuseram que o elétron tivesse um momento angular intrínseco $\vec{S}$

$$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar, s = \frac{1}{2} \Rightarrow S = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\hbar$$

$$S_z = m_s\hbar,\ \ m_s = \pm\frac{1}{2}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m}\vec{S} \Rightarrow \mu_z = \pm\frac{e}{2m}\,\hbar$$

15. Princípio da Exclusão de Pauli

Dois elétrons não podem possuir os mesmos quatro números quânticos (n, l, m_l, m_s), ou seja, não podem estar no mesmo estado quântico.

Orbital $\Rightarrow$ estado caracterizado pelos números quânticos n, l e m_l, devido ao princípio da exclusão em cada orbital podemos colocar dois elétrons, um com número quântico de spin (m_s) $-1/2$ e outro com spin $+1/2$.

Exercícios

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

$$\Psi(x,t) = Ce^{-\frac{ax^2}{2}}e^{-ibt}$$

Onde $a, b\ e\ C$ são constantes reais e positivas
Nos itens abaixo as respostas devem ser dadas em função de $a, b, C, m\ e\ \hbar$.

a. Qual a energia dessa partícula?

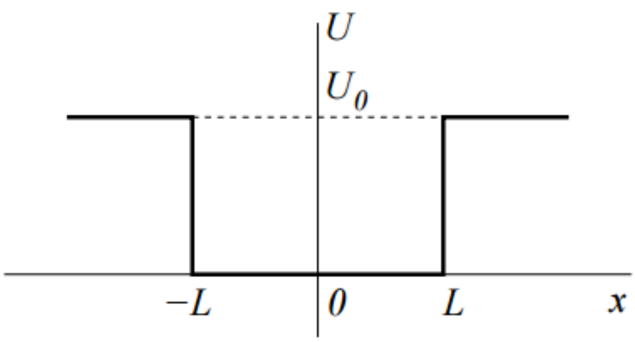
b. Calcule a constante C.

c. Determine $U(x)$.

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

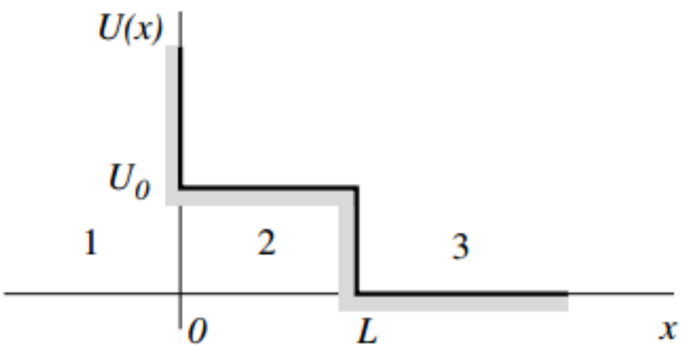
e. A incerteza na posição da partícula é dada por $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. Sabendo-se que para este sistema $\langle x \rangle = 0$, determine a incerteza mínima na medida do momento da partícula.
Use: $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\, a^{-3/2}$

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



a. A densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em uma das regiões fora do poço é $C\,\exp\,(-2bx)$, onde C e b são constantes positivas. Explicite a região fora do poço na qual é aceitável esta densidade e explique o porquê. Calcule a probabilidade de encontrar a partícula nesta região (suponha que C e b são conhecidos).
b. Calcule a constante b para que a função de onda associada à densidade de probabilidade $Cexp\,(-2bx)$ satisfaça a equação de Schrödinger na região apropriada.
c. Escreva a equação de Schrödinger para a região $-L < x < L$ e determine a solução geral desta equação.

3. 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. Qual é a função de onda $\psi_1(x)$ na região 1 $(x \leq 0)$?
b. Escreva a equação de Schrödinger para a partícula na região 2 $(0 < x < L)$ e determine a solução geral de $\psi_2(x)$ nessa região
c. Escreva a equação de Schrödinger para a partícula na região 3 $(x \geq L)$
d. 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).

4. Uma partícula de massa m executa oscilações em uma reta em torno de sua posição de equilíbrio em $x = 0$, sujeita a um potencial harmônico dado por $U(x) = m\omega^2 x^2/2$,com $-\infty < x < \infty$ e ω uma constante. A função de onda do estado fundamental da partícula é

$$\psi(x) = C\, e^{-bx^2}$$

Onde b e C são constantes positivas.

a. Calcule b e a energia E_0 do estado fundamental do oscilador, em termos dos parâmetros dados: $m, \hbar$ e ω.

b. Calcule a constante C.

c. Qual a probabilidade de encontrar a partícula na região $x \geq 0$?

5. Nesta questão denotamos ψ_{nlm_l} os estados do átomo de hidrogênio sem levar em conta o spin do elétron, onde n, l e m_l são respectivamente os números quântico principal, orbital e magnético. Os números quânticos magnéticos foram determinados com respeito a um campo magnético com componente somente na direção z.

a. A função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio é

$$\psi_{100} = Ae^{-\frac{r}{a_0}}$$

Onde a_0 é o raio de Bohr. Calcule o valor da constante A de normalização.

b. Um elétron está no estado ψ_{321} .Considere a energia E e o momento angular orbital $\vec{L} = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2}$. Quais são os valores de E, L e L_z ?

c. Considere agora um átomo com muitos elétrons na aproximação onde se despreza a iteração entre os elétrons. Neste caso, a função de onda de cada elétron é semelhante à do hidrogênio e possui os mesmos números quânticos.

Levando em conta o número quântico de spin, determine o número máximo de elétrons que possuem o número quântico principal igual a 3.

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

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

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

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

b. Qual a energia necessária para levar o elétron para o estado $3p$?

c. Use a condição de normalização para determinar o valor de C.

d. Calcule o valor médio de r no estado $1s$.

Nessa questão, utilize $\int_0^{+\infty} x^n e^{-x} dx = n!$

Gabarito

1.

a. $E = b\hbar$

b. $C = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4}$

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

d. $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2a}$

e. $\Delta_{px} = \hbar\sqrt{\frac{a}{2}}$

2.

a. A região aceitável é para $x \geq L \; e \; P(x > L) = \frac{C}{2b}e^{-2bL}$

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

c. $\psi(x) = A\cos Kx + b\sin Kx \;\; onde \; K = \sqrt{2mE}/\hbar$

3.

a. $\psi_1(x) = 0 \; para \; x \leq 0$

b. $\psi_2(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx}, para \; 0 \leq x \leq L \; e \; K = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$

c. $\psi_3(x) = Ce^{iK'x} + De^{-iK'x}, para \; x \geq L \; e \; K' = \sqrt{2mE}/\hbar$

d. $A + B = 0$

$Ae^{KL} + Be^{-KL} = Ce^{iK'L} + De^{-iK'L}$

$K(Ae^{KL} - Be^{-KL}) = iK'\left(Ce^{iK'L} - De^{-iK'L}\right)$

4.

a. $b = \frac{m\omega}{2\hbar} \; e \; E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

b. $C = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{0,25}$.

c. $P = \frac{1}{2}$

5.

a. $A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$

b. $E = -\frac{13{,}6}{9}\ eV; \quad L = \sqrt{6}\,\hbar\,; L_z = 1\hbar$

c. 18 elétrons

6.

a. $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\ ou - \frac{1}{2}\ e\ L = 0$

b. $\approx 12{,}1\ eV$

c. $C = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}$

d. $\langle r \rangle = 1{,}5\ a_0$