Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 23

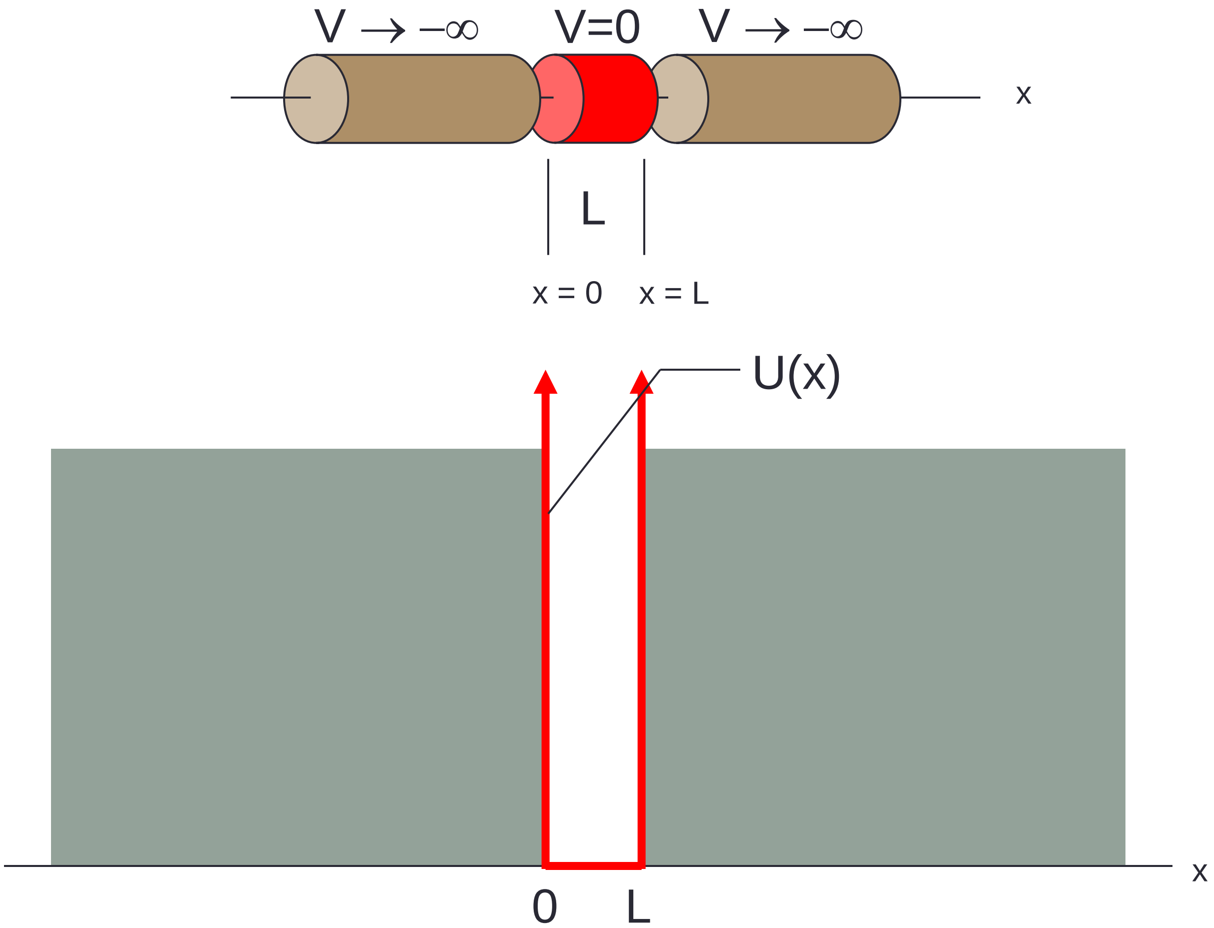
Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

2o. Semestre de 2017

Página do curso:
https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=53869

06/11/2017

Armadilhas unidimensionais

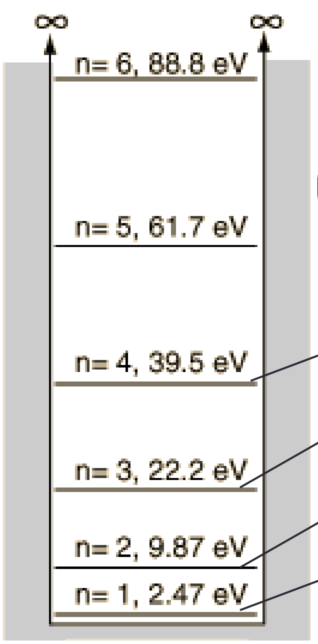


Cálculo das energias quantizadas

De Broglie
(onda de matéria)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \Rightarrow E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

$$L = \frac{n\lambda}{2} \Rightarrow \boxed{E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots}$$



3o. Estado excitado

2o. Estado excitado

1o. Estado excitado

Estado fundamental

L=0.39 nm

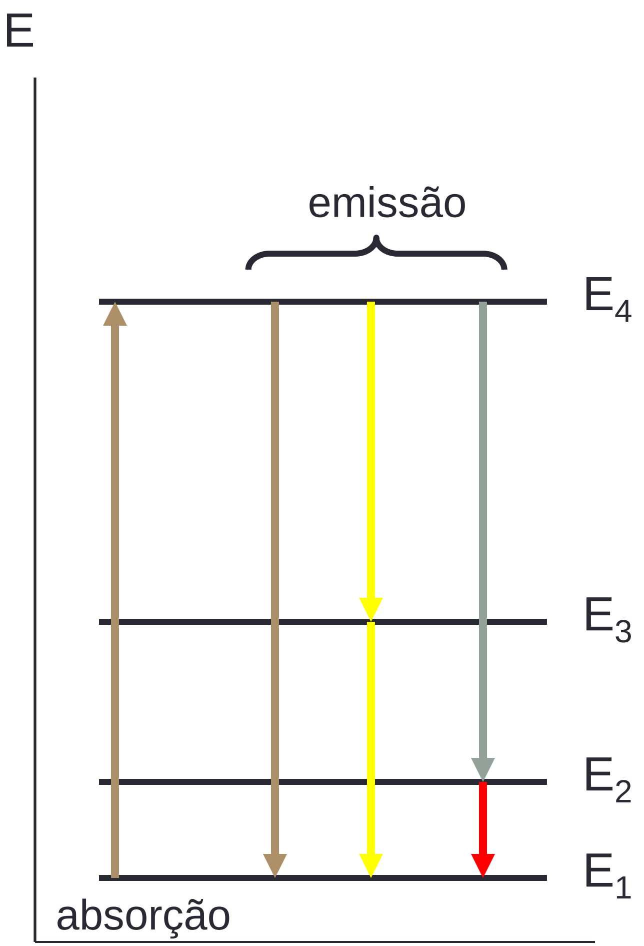
Poço de potencial infinito

Mudanças de energia

$$\Delta E = E_{alta} - E_{baixa}$$

Emissão ou absorção de fótons:

$$hf = \Delta E = E_{alta} - E_{baixa}$$



Verificação

Coloque em ordem os seguintes pares de estados quânticos de um elétron confinado a um poço unidimensional infinito de acordo com as diferenças de energia entre os estados, começando pela maior: (a) $n = 3$ e $n = 1$; (b) $n = 5$ e $n = 4$; (c) $n = 4$ e $n = 3$.

$$\Delta E = E_{alta} - E_{baixa}$$

(a) $$\Delta E = E_3 - E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) 3^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) 1^2 = 8\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

(b) $$\Delta E = E_5 - E_4 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) 5^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) 4^2 = 9\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

(c) $$\Delta E = E_4 - E_3 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) 4^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) 3^2 = 7\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

Portanto (b) > (a) > (c)

Exercícios e Problemas

11P. Um elétron está confinado em um poço de potencial infinito unidimensional de 250 pm de largura e se encontra no estado fundamental. Quais são os quatro maiores comprimentos de onda que podem ser absorvidos pelo elétron de uma só vez?

$$\Delta E = E_{alta} - E_{baixa} = hf = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E}$$

$$\boxed{\Delta E \uparrow \Rightarrow \lambda \downarrow}$$

$$\Delta E_{21} = E_2 - E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)2^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)1^2 = 3\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

$$\Delta E_{31} = E_3 - E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)3^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)1^2 = 8\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

$$\Delta E_{41} = E_4 - E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)4^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)1^2 = 15\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

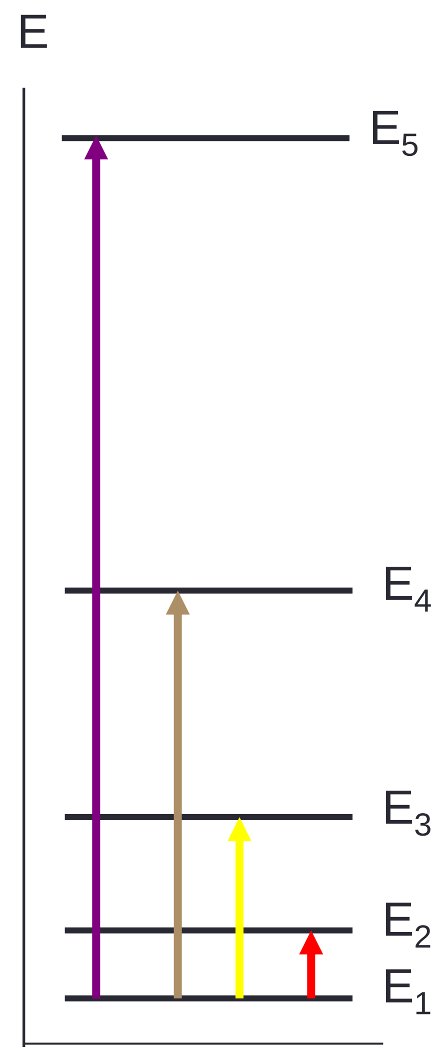
$$\Delta E_{51} = E_5 - E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)5^2 - \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)1^2 = 24\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

$$\lambda_{21} = \frac{hc}{3\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)} = \frac{3 \times 10^8}{3\left(\frac{6{,}63\times10^{-34}}{8(9{,}11\times10^{-31})(250\times10^{-12})^2}\right)} = \boxed{68{,}7\,nm}$$

$$\lambda_{31} = \boxed{25{,}8\,nm}$$

$$\lambda_{41} = \boxed{13{,}7\,nm}$$

$$\lambda_{51} = \boxed{8{,}59\,nm}$$

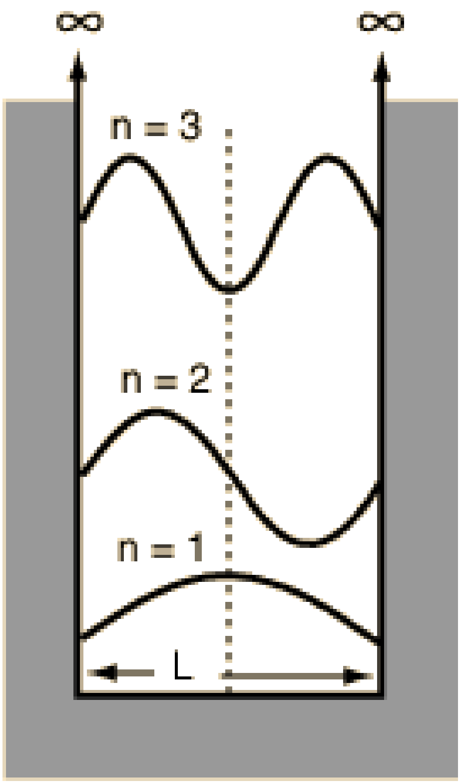


40.4 Funções de onda de um elétron aprisionado

Resolvendo eq. de Schroedinger:

$$\psi_n(x) = A\,\text{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

para $\quad 0 \leq x \leq L$



x = 0 at left wall of box.

Probabilidade de detecção

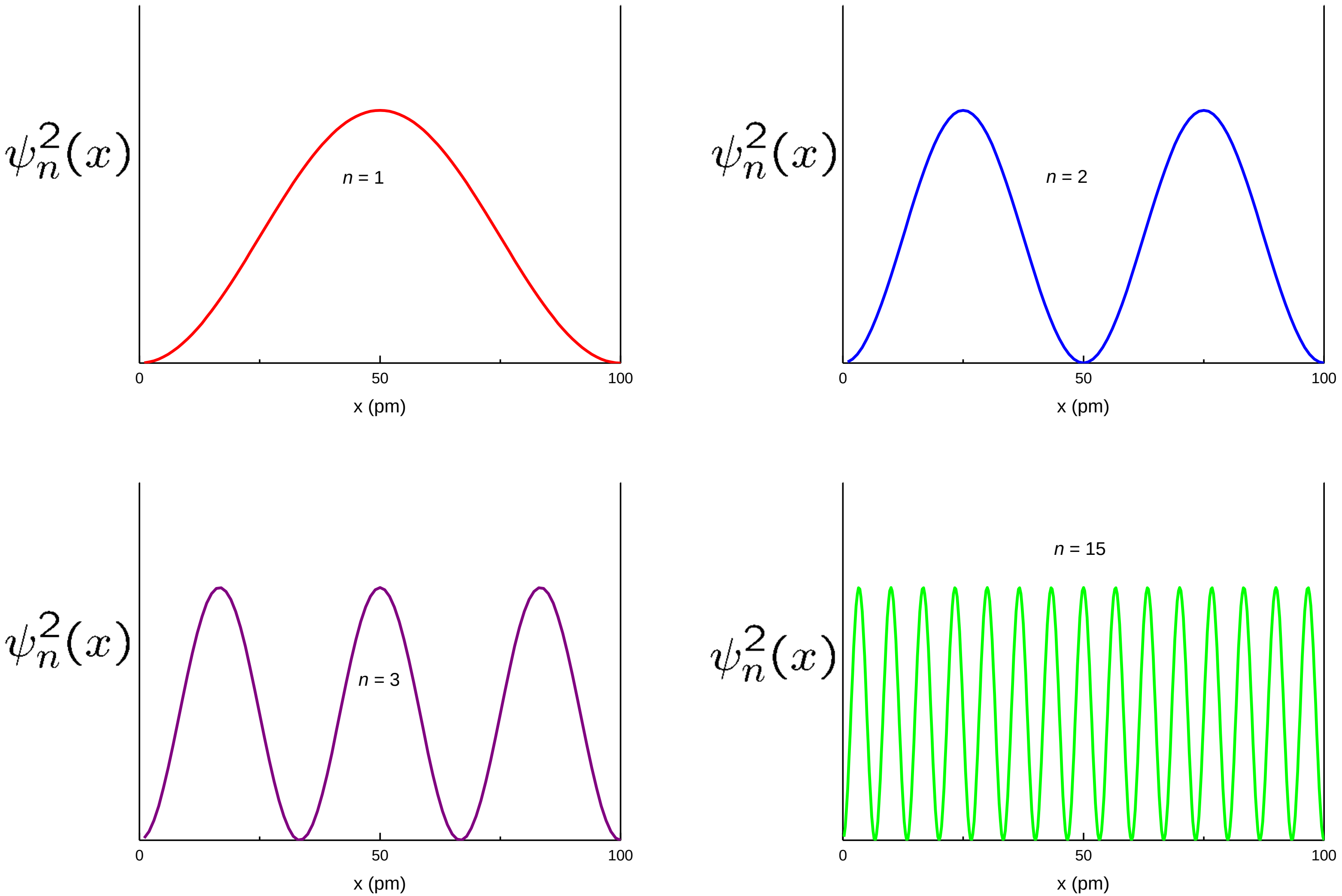
$$\left[\text{Probabilidade } p(x) \text{ de detecção no intervalo } dx \text{ com centro em } x\right] = \left[\text{Densidade de probabilidade } \psi_n^2(x) \text{ no ponto } x\right] \quad (\text{Intervalo } dx\text{)}$$

$$p(x) = \psi_n^2(x)\, dx$$

$$\psi_n^2(x) = A^2 \,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

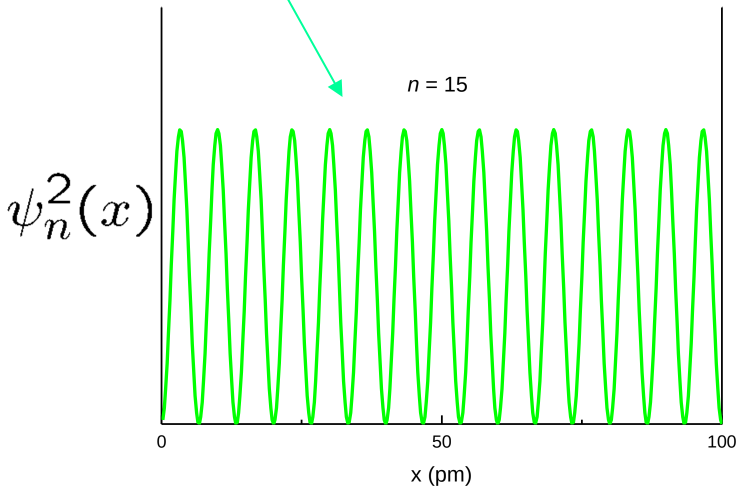
$$\left[\text{Probabilidade de detecção entre } x_1 \text{ e } x_2\right] = \int_{x_1}^{x_2} p(x) = \int_{x_1}^{x_2} \psi_n^2(x)\, dx = \int_{x_1}^{x_2} A^2 \,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx$$

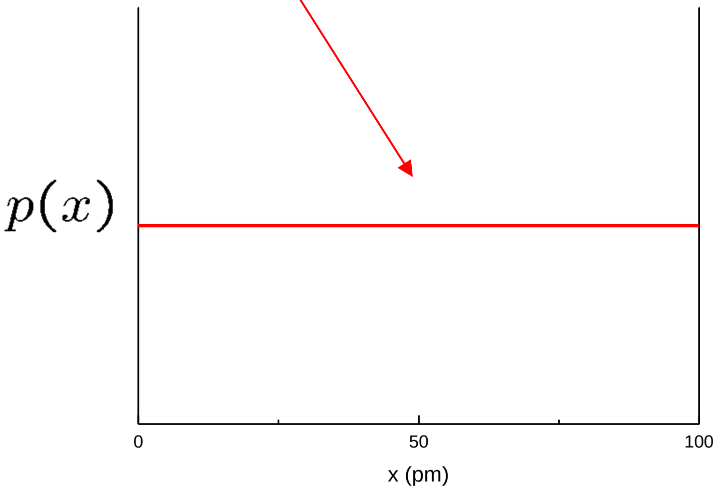
$$\psi_n^2(x) = A^2 \,\text{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$



Princípio da correspondência

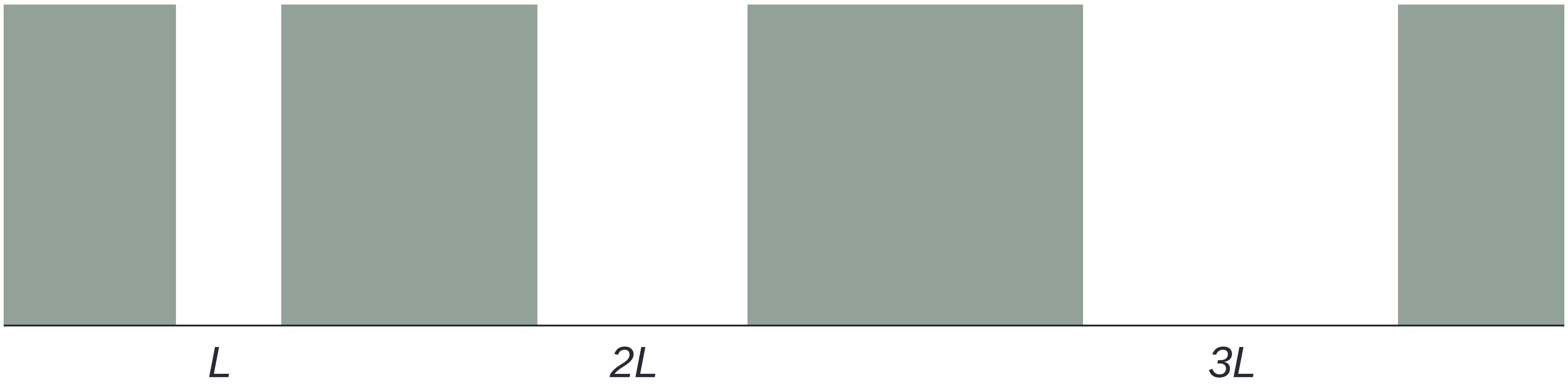
"Para grandes valores dos números quânticos, os resultados da física quântica tendem para os resultados da física clássica."





Verificação

A figura abaixo mostra três poços infinitos de potencial de largura *L*, *2L* e *3L*; cada poço contém um elétron no estado n=10. Coloque os poços na ordem (a) do número máximo de máximos da densidade de probabilidade do elétron, começando pelo maior; (b) na ordem das energias do elétron, começando pela maior.



$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Normalização

Partícula em algum lugar do espaço, logo:

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

Ex.:

$$\psi_n^2(x) = A^2 \, \text{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x)\, dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{2/L}$$

Energia de ponto zero

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Menor valor para *n* é 1, portanto menor energia é:

$$E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

“Em sistemas confinados não existem estados de energia zero.”

Verificação

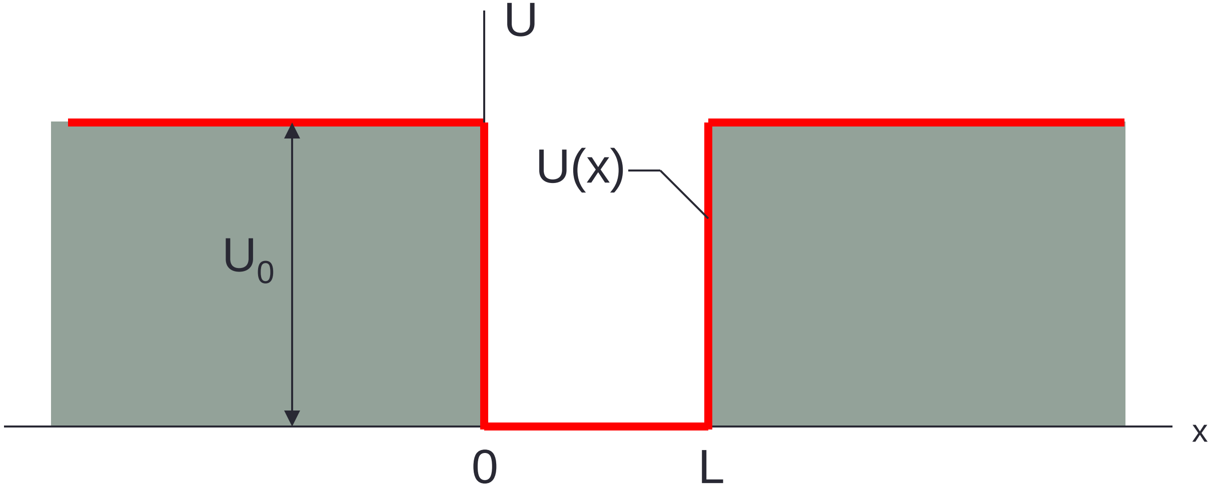
As partículas a seguir estão confinadas em poços de potencial infinitos de mesma largura: (a) um elétron, (b) um próton, (c) um deuteron e (d) uma partícula alfa. Coloque as partículas na ordem das energias de ponto zero, começando pela maior.

$$E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

$$m_e < m_p < m_d < m_\alpha$$

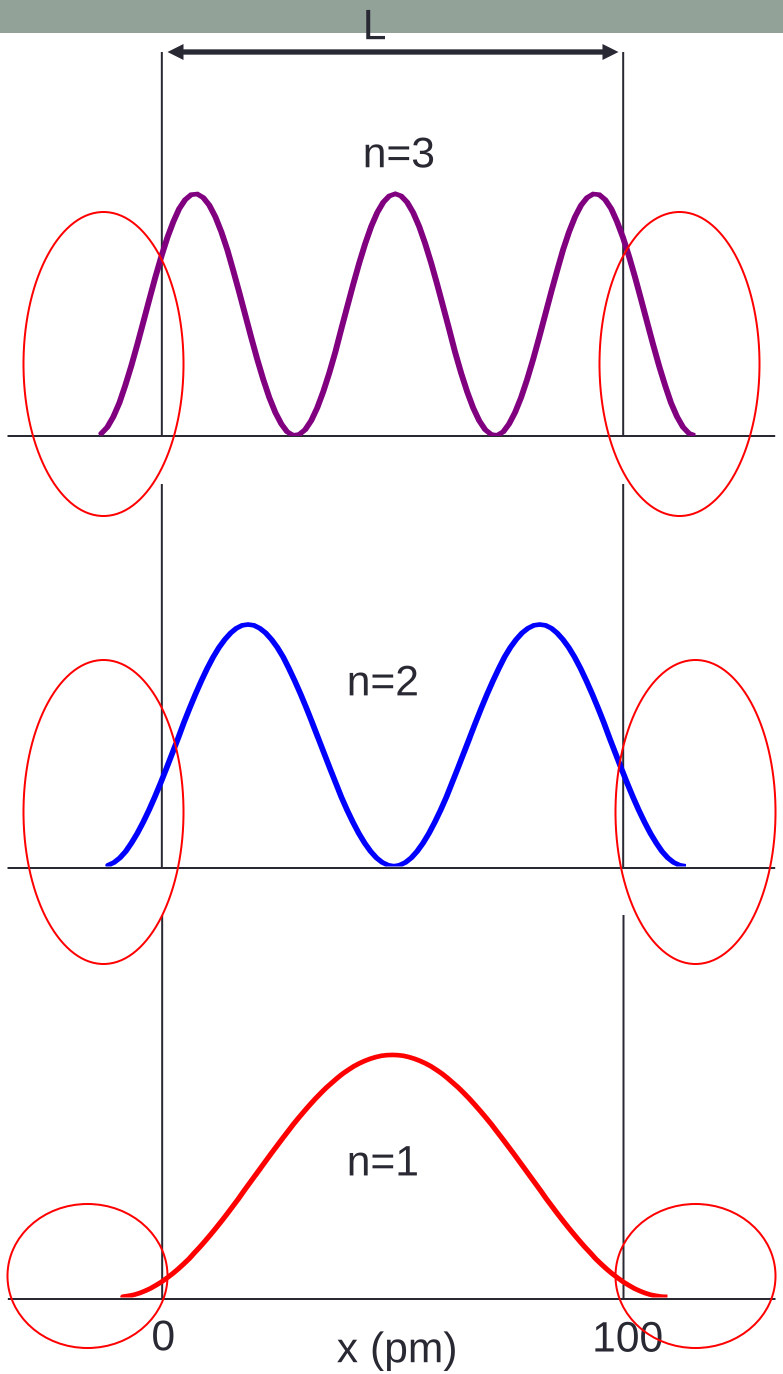
40.5 Um elétron em um poço finito

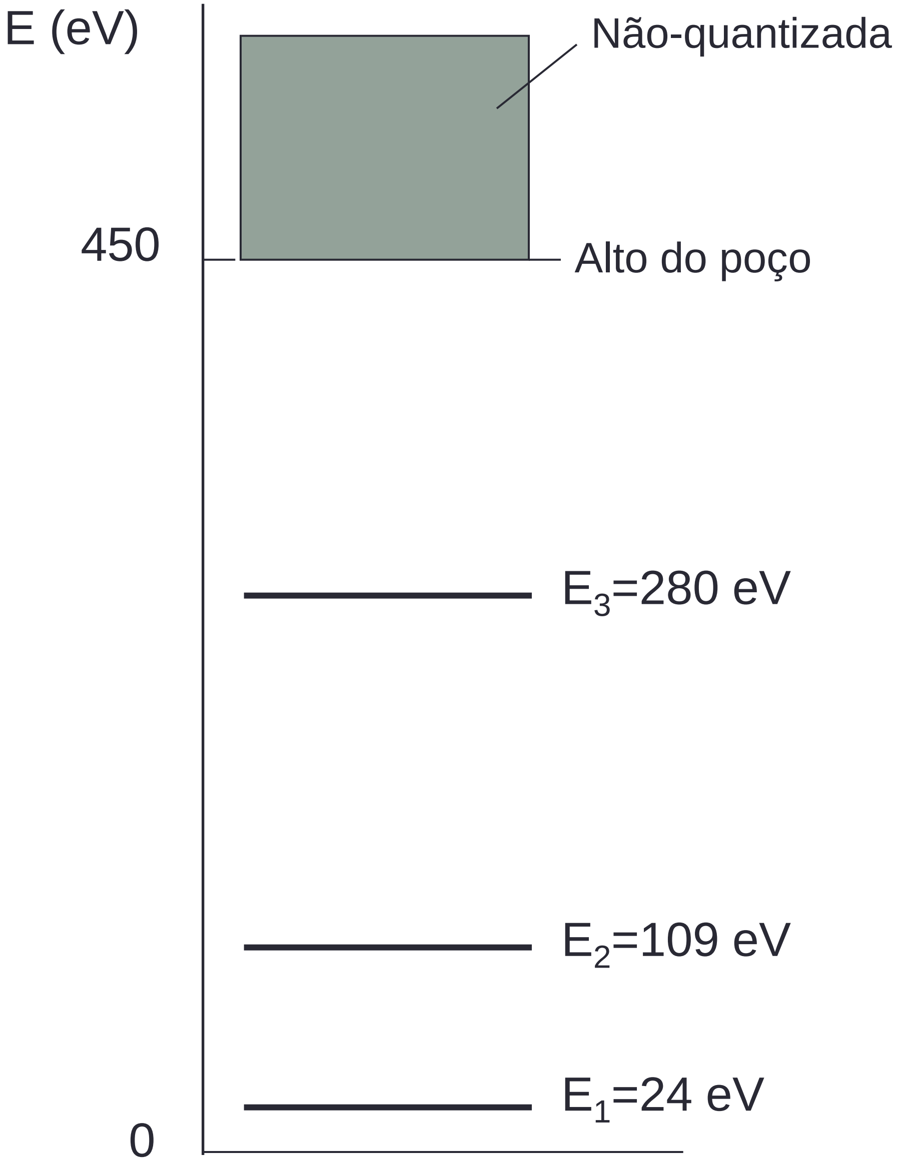
Poço infinito = idealização
Poço finito = mais realista



Equação de Schrödinger:

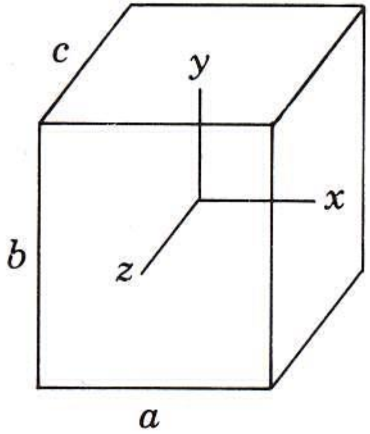
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}[E - U(x)]\psi = 0$$





U_0 = 450 eV
L = 100 pm

Aplicação: Partícula confinada em uma caixa retangular

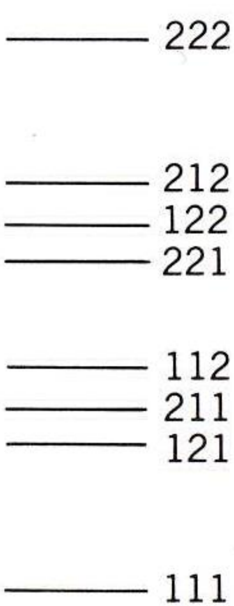


$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, \text{ se: } -a/2 < x < a/2;\ -b/2 < y < b/2; \\ -c/2 < z < c/2 \\ \infty \text{ no resto do espaço} \end{cases}$$

o caso tridimensional $\psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$

$a \neq b \neq c$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{2}{a}}\begin{Bmatrix}\cos\\ \text{sen}\end{Bmatrix}\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right)\cdot\sqrt{\frac{2}{b}}\begin{Bmatrix}\cos\\ \text{sen}\end{Bmatrix}\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right)\cdot\sqrt{\frac{2}{c}}\begin{Bmatrix}\cos\\ \text{sen}\end{Bmatrix}\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right)$$



Os autovalores de energia são dados em termos dos 3 n^{os} quânticos (n_1, n_2 e n_3)

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$$

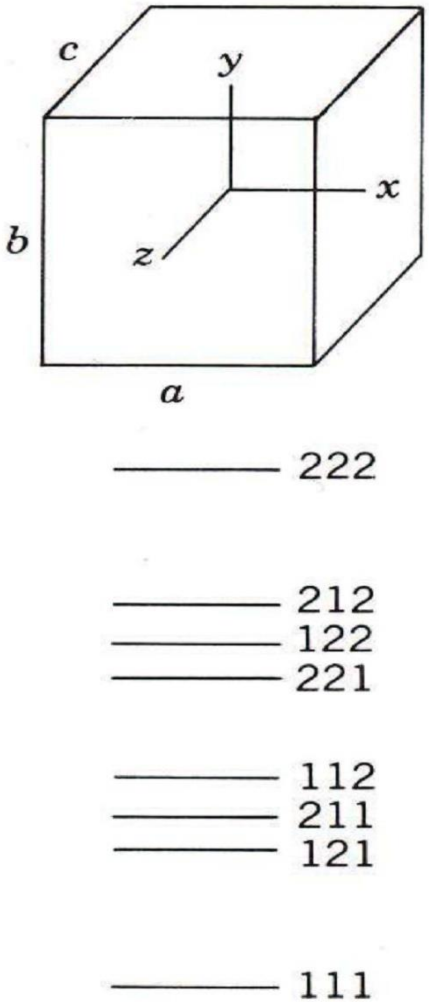
$$E = E_{n1} + E_{n2} + E_{n3}$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{c}\right)^2\right]$$

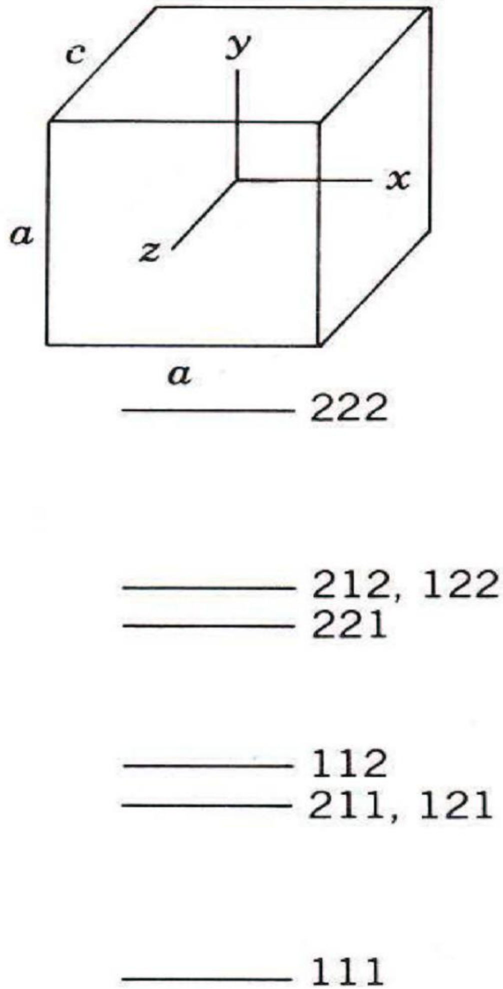
$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{c}\right)^2\right]$$

Degenerescência: diferentes estados apresentam a mesma energia

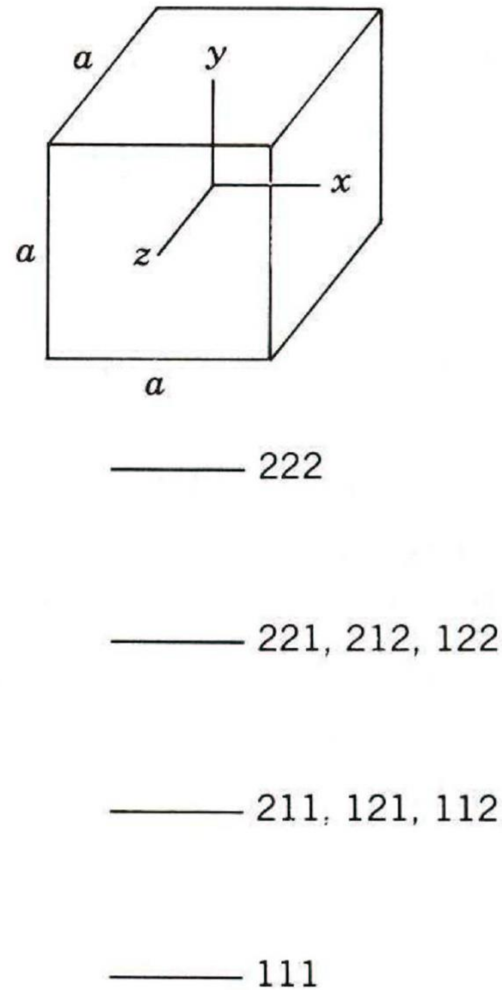
$\boldsymbol{a \neq b \neq c}$



$\boldsymbol{a = b \neq c}$

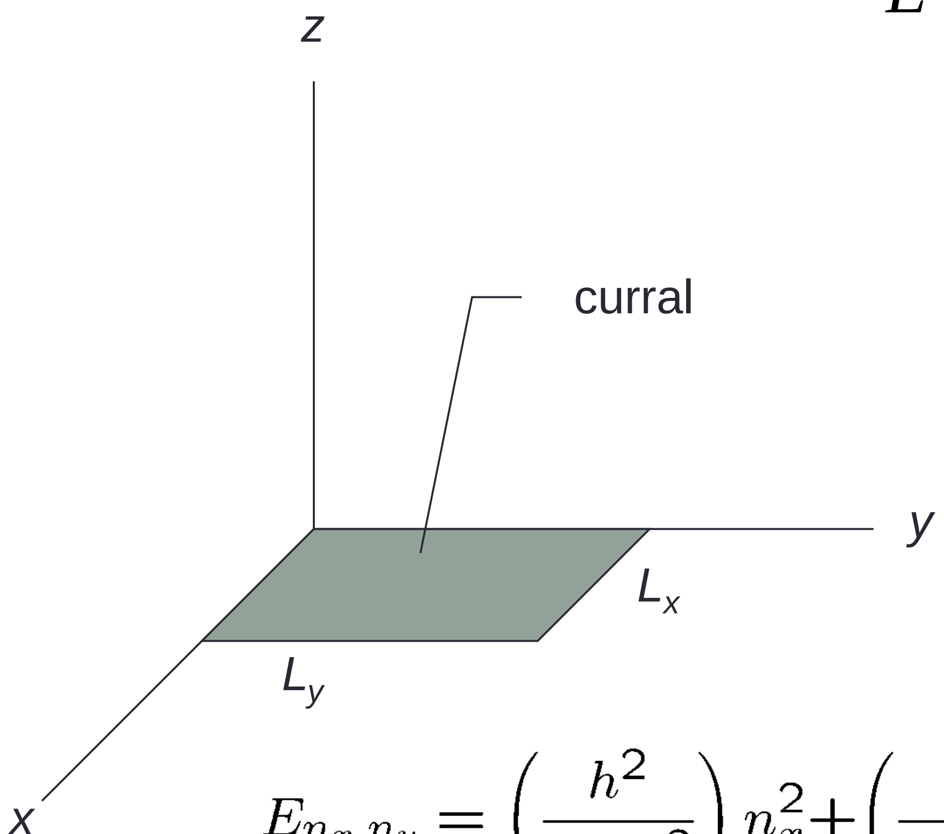


$\boldsymbol{a = b = c}$



Curral retangular (2D)

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$$



$$E_{n_x,n_y} = \left(\frac{h^2}{8mL_x^2}\right) n_x^2 + \left(\frac{h^2}{8mL_y^2}\right) n_y^2 = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$

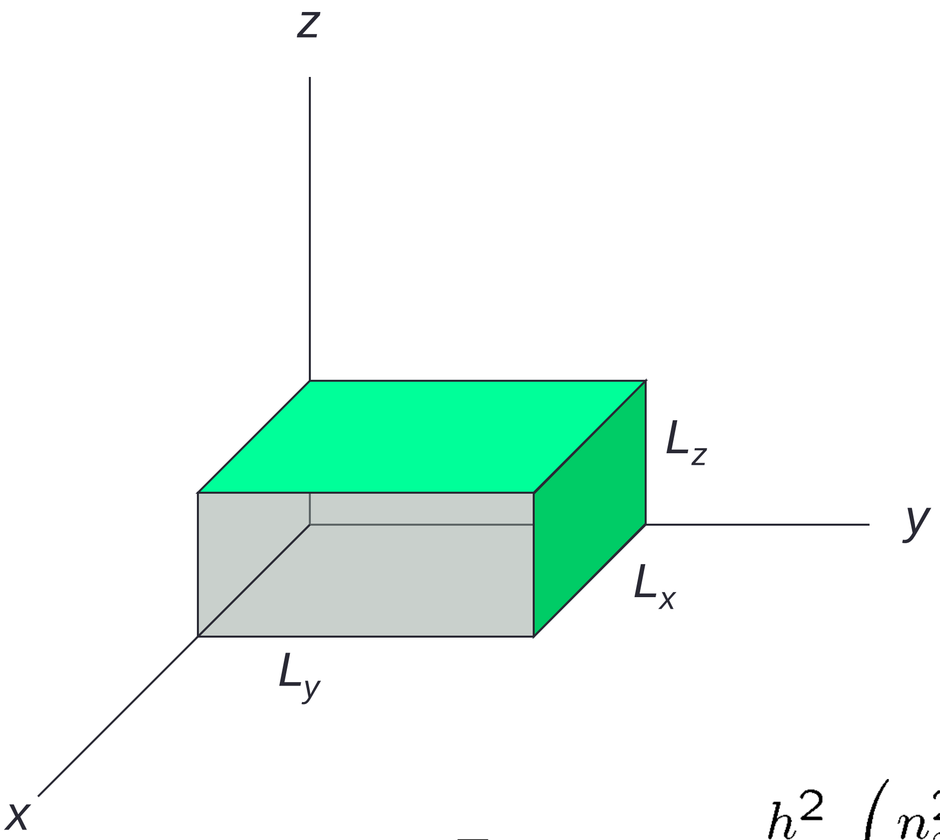
Verificação

Na notação da equação abaixo, a energia do estado fundamental do elétron em uma caixa retangular é $E_{0,0}$; $E_{1,0}$; $E_{0,1}$ ou $E_{1,1}$?

$$E_{n_x,n_y} = \left(\frac{h^2}{8mL_x^2}\right) n_x^2 + \left(\frac{h^2}{8mL_y^2}\right) n_y^2 = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$

n_x, n_y = 1, 2, 3, …

Caixa retangular (3D)



$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

Exercícios e Problemas

26P. Um curral retangular de larguras $L_x = L$ e $L_y = 2L$ contém um elétron. Determine, em múltiplos de $h^2/8mL^2$, onde m é a massa do elétron, (a) a energia do estado fundamental do elétron, (b) a energia do primeiro estado excitado, (c) a energia dos primeiros estados degenerados e (d) a diferença entre as energias do segundo e do terceiro estado excitado.

(a)
$$E_{n_x,n_y} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right) = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + \frac{n_y^2}{4}\right)$$

$$E_{1,1} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{1^2}{L^2} + \frac{1^2}{(2L)^2}\right) = \frac{h^2}{8mL^2}\left(1 + \frac{1}{4}\right) = \boxed{\frac{5}{4}\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)}$$

(b)

n_x	n_y	$Energia(\frac{h^2}{8mL^2})$
1	1	$\frac{5}{4}$
1	2	$\frac{8}{4}$
1	3	$\frac{13}{4}$
2	1	$\frac{17}{4}$
2	2	$\frac{20}{4}$
1	4	$\frac{20}{4}$

(c)

n_x	n_y	$Energia(\frac{h^2}{8mL^2})$
1	1	$\frac{5}{4}$
1	2	$\frac{8}{4}$
1	3	$\frac{13}{4}$
2	1	$\frac{17}{4}$
2	2	$\frac{20}{4}$
1	4	$\frac{20}{4}$

(d)

$$\Delta E_{(2,1),(1,3)} = E_{(2,1)} - E_{(1,3)} = \left(\frac{17}{4} - \frac{13}{4}\right)\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) = \boxed{\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)}$$

Equação de Schröedinger para o átomo de H

Para uma boa aproximação para a energia potencial do sistema elétron-próton : é eletrostática:

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

O potencial depende somente da distância entre o próton e o elétron

Este será o primeiro sistema que será necessário a complexidade total da Equação de Schroedinger em três dimensões.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x,y,z)}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right) = E - V(r)$$

Massa reduzida

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$$

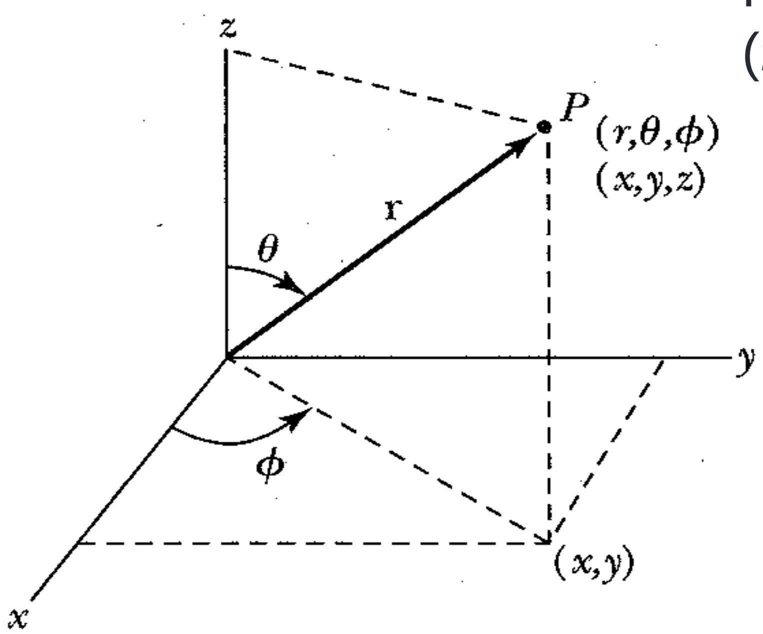
Forças centrais $\longrightarrow$ Interação Coulombiana entre um elétron e o núcleo de um átomo

Agora é função das coordenadas r, θ e ϕ

Átomo de hidrogênio

Coordenadas esféricas: $\psi \equiv \psi(r,\theta,\varphi)$ e

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$



Relações entre coordenadas esféricas (r,θ,φ) e cartesianas (x,y,z)

$$x = r\sin\theta\cos\phi$$
$$y = r\sin\theta\sin\phi$$
$$z = r\cos\theta$$

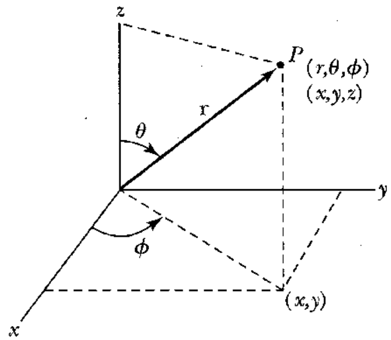
$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$\theta = \cos^{-1}\frac{z}{r}$$ (Ângulo polar)

$$\phi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$ (Ângulo azimutal)

A eq. de Schrödinger em coordenadas esféricas

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$



Lembre-se que a dependência temporal é parametrizada por um autovalor da energia, E.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi$$

Podemos, então, escrever a eq. de Schrödinger como:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sen^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) + V\psi = E\psi$$