

Física IV para Engenharia Elétrica IFUSP - 4320293

P3 - 26/11/2013

Gabarito

Q1a: supondo órbitas circulares que compreendem um número inteiro de comprimentos de onda: $n\lambda = 2\pi r$ $\lambda = h/p = h/mv$ $nh/mv = 2\pi r$ $L = mvr = nh/2\pi = n\hbar$

Q1b:
$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$$
 $\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = 2m(E - V)$ $\frac{p^2}{2m} = (E - V)$ $E = \frac{1}{2}mv^2 + V$ que é

o teorema de conservação de energia.

Q1c:
$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2Vem}} = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{\sqrt{2.54.1,6 \times 10^{-19}.9,11 \times 10^{-31}}} = 16,7 \text{ nm}$$

Q1d:
$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k = 1,055 \times 10^{-34}.6,28 \times 10^{10} = 6,63 \times 10^{-24} \text{kg.m.s}^{-1}$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{2}} = E\psi \qquad E = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} = 2,41 \times 10^{-17} \, kgm^{2}s^{-2} = 151eV$$

Q1d: supondo que
$$-a < x < +a$$
 e $-a < x + L < +a$ $P = \int_{x}^{x+L} \psi^* \psi \, dx' = \frac{1}{a}L$

Q2.

a) Uma partícula confinada em um poço de potencial infinito terá sua energia quantizada de acordo com a relação abaixo

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

Portanto para os estados n = 1 (fundamental), n = 2, (primeiro estado excitado), n = 3 e n = 4 (terceiro estado excitado) as energias são respectivamentes

$$E_1 = 6,038eV$$

 $E_2 = 24,154 eV$ primeiro estado excitado

$$E_3 = 54,346eV$$

 $E_4 = 96,615 eV\ terceiro\ estado\ excitado$

Portanto para ir do primeiro estado excitado para o terceiro é necessário uma energia igual a

$$E_4 - E_2 = 96,615 - 24,154 = 72,461eV$$

b) Comprimento de onda

$$E = \omega \hbar = \frac{2\pi.c.\hbar}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi.c.\hbar}{E}$$

As diferenças de enrgia entre os estados são respectivamente

$$E_{4-3} = E_4 - E_3 = 42,269eV$$

$$E_{4-2} = E_4 - E_2 = 72,461eV$$

$$E_{4-1} = E_4 - E_1 = 90,577eV$$

$$E_{3-2} = E_3 - E_2 = 30,192eV$$

$$E_{3-1} = E_3 - E_1 = 48,308eV$$

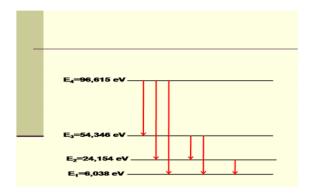
$$E_{2-1} = E_2 - E_1 = 18,116eV$$

Logo o menor comprimento de onda é aquele onde a diferença de energia é maior, ou seja

$$\lambda_{4-1} = 136,569$$
Å

c) Diagrama.

As energias referentes a cada uma das possíveis transições já foram calculadas no item a)



Solução 1B):

a) Seja $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U-K)}}{\hbar},$ dai temos que

$$T = e^{-2\alpha L} \Rightarrow \alpha = -\frac{ln(T)}{2L} = 4,605.10^9 m^{-1}$$

Temos ainda que

$$U = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} + K = 5,811eV$$

b) Seja

$$T_1 = e^{-2\alpha L_1}$$

onde $L_1=7,51$ Å. Temos portanto $T_1=9,911.10^{-4},$ logo a variação percentual será de

$$\frac{T - T_1}{T} = 0,89\%$$

Q3.

a) O estado fundamental é caracterizado pelos números quânticos $n_1 = n_2 = n_3 = 1$, portanto a função onda e energia tem a forma

$$\Psi_{1,1,1}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right).\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right).\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \right) \Rightarrow E_1 = 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

b) Como a energia do estado fundamental é $3\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, isto significa que $\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right)=6$ o que corresponderia as seguintes combinações $n_1=2,\ n_2=1\ e\ n_3=1$ ou $n_1=1,\ n_2=2\ e\ n_3=1$ ou $n_1=1,\ n_2=1\ e\ n_3=2$. Portanto a degenerescência é tripla.

c) A degenerescência está relacionada com a simetria do sistema, portanto ela pode ser evitada se tomarmos uma caixa com lados diferentes.

d) Como $\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right)=11$ as possibilidades são: $n_1=3,\ n_2=1\ e\ n_3=1,\ n_1=1,\ n_2=3\ e\ n_3=1$ e $n_1=1,\ n_2=1\ e\ n_3=3$. Portanto a energia vale

$$E_3 = 11 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Funções ondas

$$\Psi_{3,1,1}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right).\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right).\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)$$

$$\Psi_{1,3,1}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right).\sin\left(\frac{3\pi}{L}y\right).\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)$$

$$\Psi_{1,1,3}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right).\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right).\sin\left(\frac{3\pi}{L}z\right)$$

Q4.

a) As soluções possíveis devem satisfazer as relações

$$\ell = 0,1,2,...,n-1$$

 $m_{\ell} = -\ell, -\ell+1,....,0,....\ell-1,\ell.$

Os únicos estados que satisfazem estas relações são B (n = 4), C (n = 3), F (n = 3), G (n = 2), H (n = 4), J (n = 3). Como os níveis de energia dos estados são dados por

$$E = -\frac{13.6}{n^2}eV,$$

Temos que os estados C, F e J têm a mesma energia, $E = -13,6/9 \approx -1,4$ eV, e também os estados B e H, com energia $E = -13,6/16 \approx -0,85$ eV.

b) Chamando de $A = 1/(2a_0)^{3/2}$, temos que as derivadas da função dada são

$$\frac{dR_{20}}{d\rho} = -Ae^{-\rho/2} - \frac{A}{2}(c-\rho)e^{-\rho/2};$$

$$\frac{d^2 R_{20}}{d\rho^2} = Ae^{-\rho/2} + \frac{A}{4}(c - \rho)e^{-\rho/2}.$$

Substituindo essas derivadas na equação diferencial para $R_{n\ell}$ com $\ell=0$, temos

$$\frac{1}{4}(c-\rho)+1-\frac{2}{\rho}-\frac{1}{\rho}(c-\rho)+\left[\frac{2}{\rho}-\frac{1}{4}\right](c-\rho)=0,$$

cuja solução é c = 2.

Atenção: na prova houve um erro de digitação: $\frac{d^2R_{n\ell}}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dR_{n\ell}}{d\rho} - \left[\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} + \frac{1}{n^2}\right]R_{n\ell} = 0 \text{ deveria ter}$ sido $\frac{d^2R_{n\ell}}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dR_{n\ell}}{d\rho} - \left[\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{2n}{\rho} + \frac{1}{n^2}\right]R_{n\ell} = 0, \text{ o que inviabiliza a solução. Será atribuído o ponto dessa questão para todos os alunos.}$

c) Como a probabilidade de encontrar o elétron em uma posição radial é proporcional a $\rho^2 |R|^2$, temos que

$$P \propto \rho^2 (2 - \rho)^2 e^{-\rho};$$

 $\frac{dP}{d\rho} \propto \left[2\rho (2 - \rho)^2 - 2\rho^2 (2 - \rho) - \rho^2 (2 - \rho)^2 \right] e^{-\rho}$

Igualando a derivada à zero, encontramos três soluções

$$r = 2a_0; r = \left[3 \pm \frac{\sqrt{20}}{2}\right]a_0.$$

d) A função de onda tem que satisfazer a condição de normalização

$$\int_{0}^{\infty} r^{2} dr \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\pi} \sin\theta d\theta \Big| \psi_{n\ell m_{\ell}} (r, \theta, \varphi) \Big|^{2} = 1$$

Substituindo a expressão para a função de onda e utilizando o resultado dado sobre a integral dos harmônicos esféricos, temos

$$A^{2}\int_{0}^{\infty}r^{2}e^{-2r/a_{0}}dr=A^{2}\frac{a_{0}^{3}}{8}\int_{0}^{\infty}t^{2}e^{-t}dt=1.$$

A integral é facilmente resolvida, dando o valor 2, de forma que $A=2/\sqrt{a_0^3}$.