Física IV

2020

Professor: Valdir Guimarães

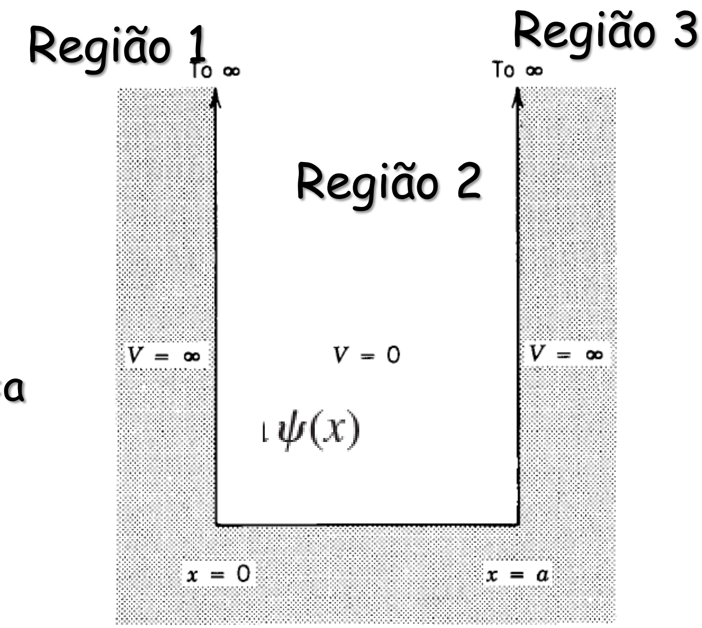
E-mail: valdir.guimaraes@usp.br

Exercícios aula 17-18

Poço de potencial infinito:

$$V(x) = \infty \qquad x < 0, \quad x > a$$

Solução $= 0 \qquad 0 \leq x \leq a$



- A partícula está confinada entre $0 \leq x \leq L$
- A função de onda deve ser continua em x=0 e x=a
- Região 1 $\Psi_1(x) = 0$
- Região 3 $\Psi_3(x) = 0$
- Região 2 (dentro da caixa) partícula livre.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Equação oscilador harmônico

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_2(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_2(x)$$

Solução $\Psi_2(x) = Ae^{+ik_2x} + Be^{-ik_2x}$ com: $k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$\Psi_2(x) = Ae^{+ik_2x} + Be^{-ik_2x}$$

Podemos reescrever como: $\Psi_2(x) = (A+B)\cos kx + i(A-B)\sin kx$

Aplicando as condições de contorno:

Em x=0 $\Psi_2(0) = 0$ $\Rightarrow$ $(A+B) = 0$ $\Rightarrow$ $A = -B$

$$\Psi_2(x) = 2iB\sin kx = \mathrm{C}\sin kx$$

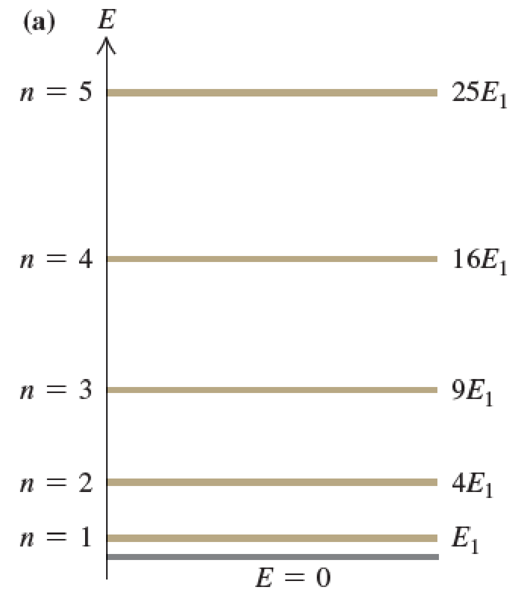
Em x=a $\Psi_2(a) = 0$ $\Rightarrow$ $\Psi_2(x) = \mathrm{C}\sin ka = 0$ $\Rightarrow$ $ka = n\pi$

$(n = 1, 2, 3, \ldots)$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma}n^2$$

- A energia é quantizada e apenas valores discretos são possíveis para n=1,2,3...
- Esses são chamados de estados ligados.
- Podemos ter infinito estados ligados
- Note que não temos n=0.
- A energia mais baixa, também chamado de estado fundamental, tem energia E_1.

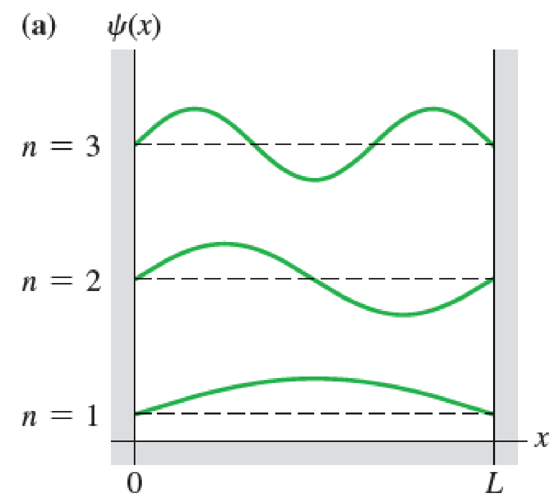
$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma}$$



Função de onda: $\Psi_2(x) = \mathrm{C}\sin kx$ $\quad ka = n\pi$

$$\Psi_n(x) = \mathrm{C}\sin\frac{n\pi x}{a} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}}$$



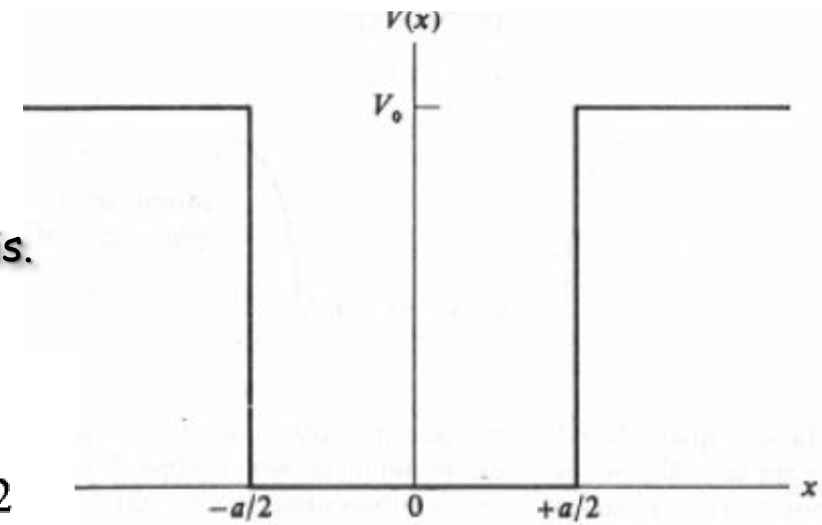
Fora do poço função de onda é nula. Então para garantir a continuidade a função de onda para cada n deve ser nula também em x=0 e x=a

Poço de potencial finito

Poço de potencial finito:

$$V(x) = V_0 \qquad |x| > a/2$$
$$= 0 \qquad |x| < a/2$$

Região 1 Região 2 Região 3



Função de onda nas regiões 1 e 3 devem ser iguais.

Solução

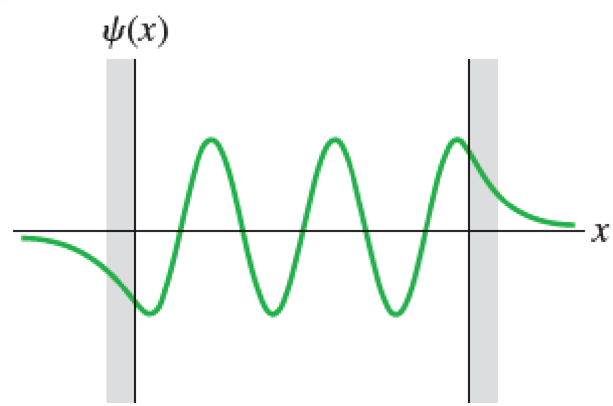
$$\psi_1 = A e^{k_1 x} + B e^{-k_1 x} \qquad x < -a/2$$

$$\psi_2 = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \qquad -a/2 \le x \le a/2$$

$$\psi_3 = F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x} \qquad x > a/2$$

$$k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \text{ and } k_2 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

- Região 1 e 3 a função de onda deve ser uma exponencial decrescente para que seja finita.
- Portanto B=0 e F=0
- Função de onda na região 2 deve ser oscilatória.



Importante: A função de onda não é nula fora do poço e não se anula na fronteira.

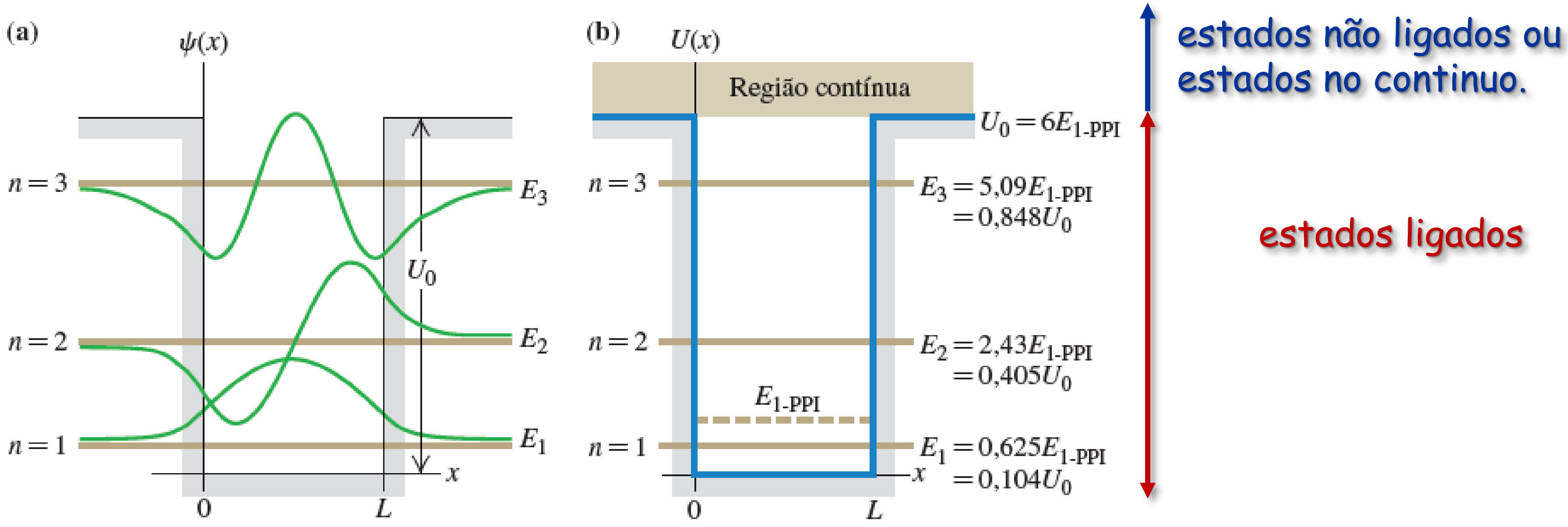
As energias dos estados ligados de um poço infinito é dada por:

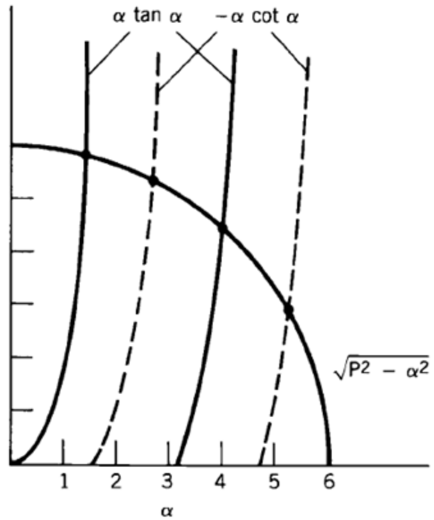
$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

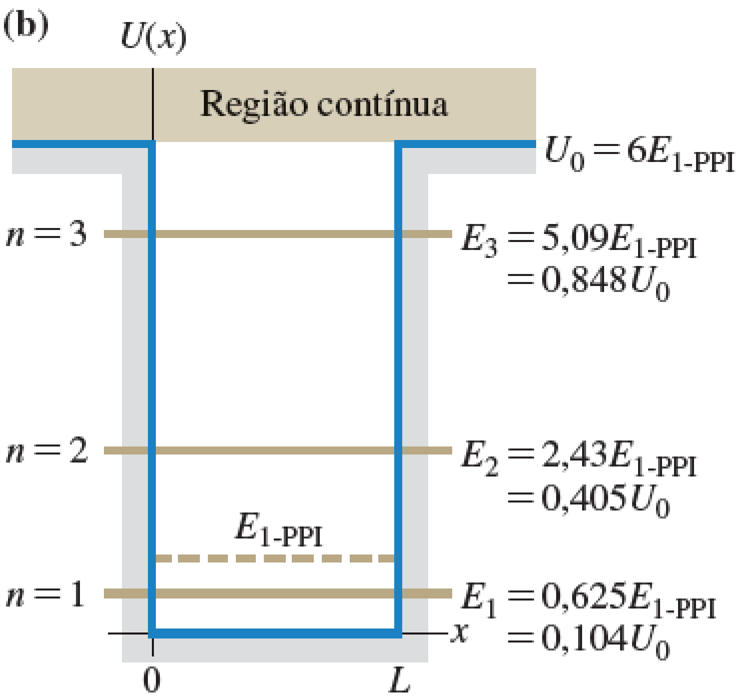
Podemos ter infinitos estados ligados para n=1, 2, 3, ...∞

A energia mais baixa é dada para n=1 $$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Quando o poço não é muito profundo podemos ter alguns estados ligados e para energia muito grande os estados não são mais ligados.

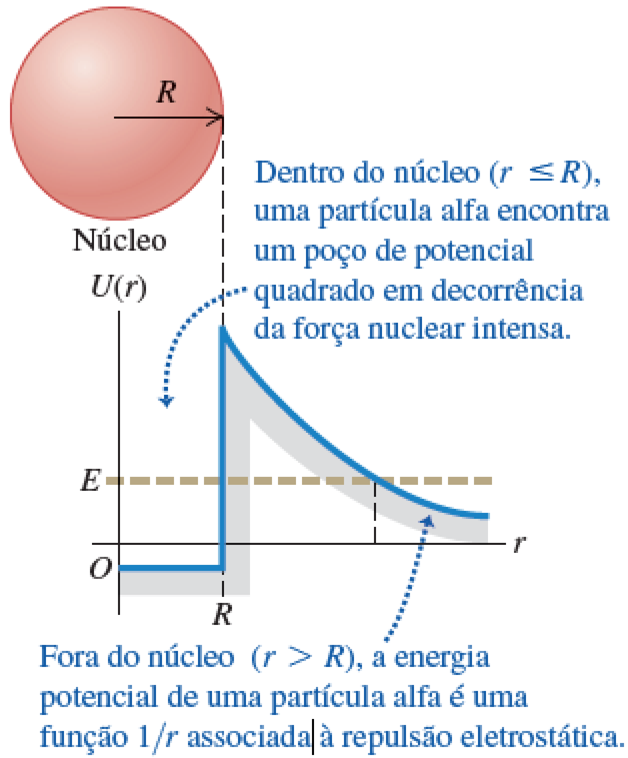






Isso gera a quantização da energia

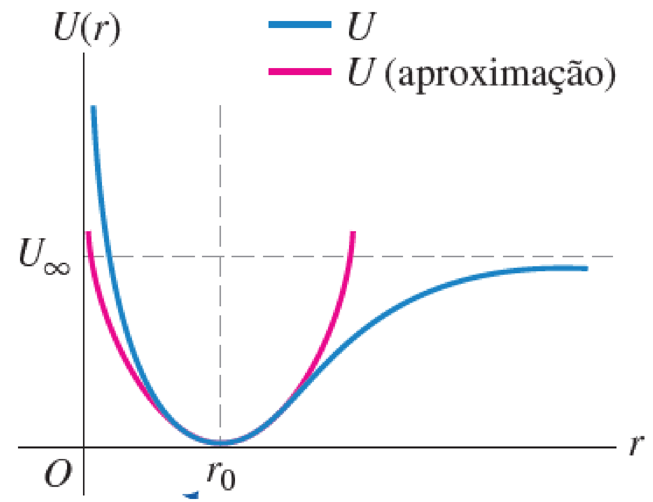
um poço finito com profundidade possui um número finito de estados ligados em comparação com o número infinito existente no caso de um poço com profundidade infinita.


R
Núcleo
Dentro do núcleo ($r \leq R$), uma partícula alfa encontra um poço de potencial quadrado em decorrência da força nuclear intensa.
$U(r)$
E
O
R
r
Fora do núcleo ($r > R$), a energia potencial de uma partícula alfa é uma função $1/r$ associada à repulsão eletrostática.

Poço de oscilador harmônico

Poço de potencial oscilador harmônico:

$$V(x) = \tfrac{1}{2}kx^2$$



Potencial bem comportado com um mínimo em x=a pode ser expandido em série de Taylor.

$$V(x) = V(a) + (x-a)\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=a} + \frac{1}{2}(x-a)^2\left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x=a} + \cdots$$

- primeiro termo é constante
- segundo termo nulo em x=a (se for um mínimo)
- terceiro termo quadrático é o importante.
- Esse é o termo de oscilador harmônico

$$V(x) = \tfrac{1}{2}kx^2$$

Precisamos então resolver a equação de Schrodinger em uma dimensão

$$E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\varphi(x)$$

Sendo que:

$$\lambda = 2E/\hbar\omega$$

$$\omega = \sqrt{k/m}$$

Usando uma nova variável $\xi = \left(\sqrt{m\omega/\hbar}\right)x$ ficamos com:

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\varphi(\xi) = 0$$

para x→∞ a solução não deve divergir uma possível solução seria do tipo: $\varphi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}h(\xi)$

usando essa função teremos: $$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\lambda - 1)h(\xi) = 0$$

No. inteiro

Que é parecida com a equação diferencial de Hermite $y'' - 2xy' + 2py = 0$

A quantização vem de: $(\lambda - 1) = 2p$ ⇒ $\lambda = 2p + 1, \quad p = 0, 1, 2, 3...$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \Rightarrow E_n = \hbar w\left(p + \frac{1}{2}\right), p = 0, 1, 2, 3..$$

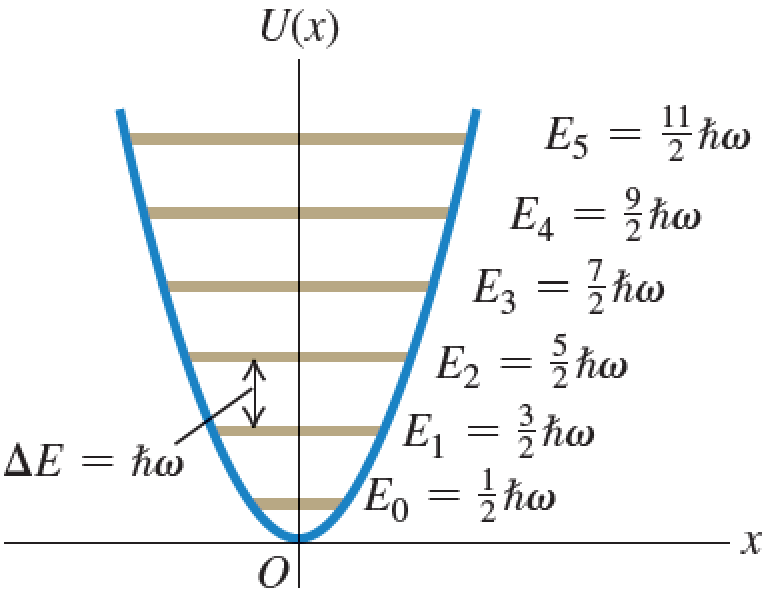
$$E_n = \hbar w \left(p + \frac{1}{2}\right), p = 0, 1, 2, 3..$$

Os níveis são igualmente espaçados :

$$E_{p+1} - E_p = \left[(p+1) + \frac{1}{2} - \left(p + \frac{1}{2}\right)\right] \hbar\omega = \hbar\omega$$

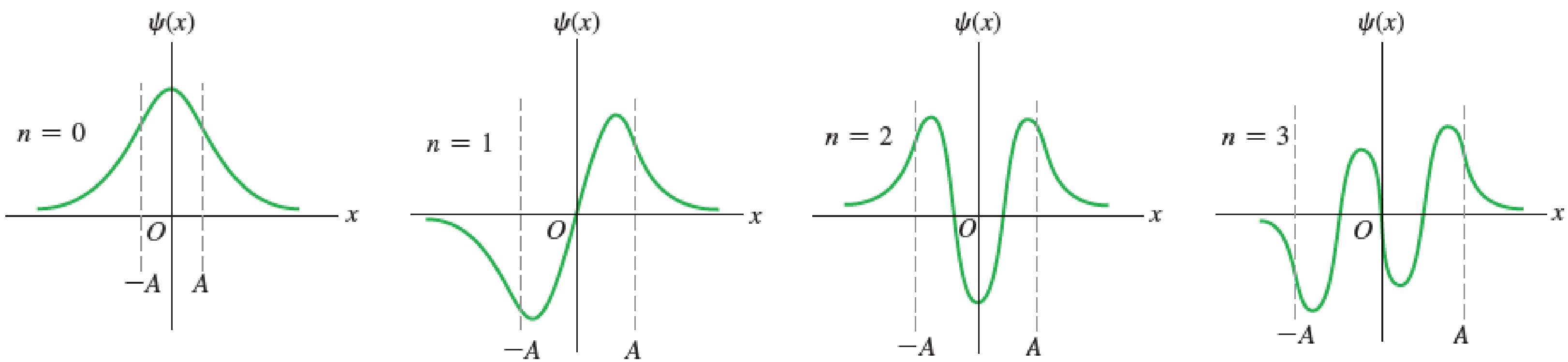
e o estado fundamental para p=0 tem energia:

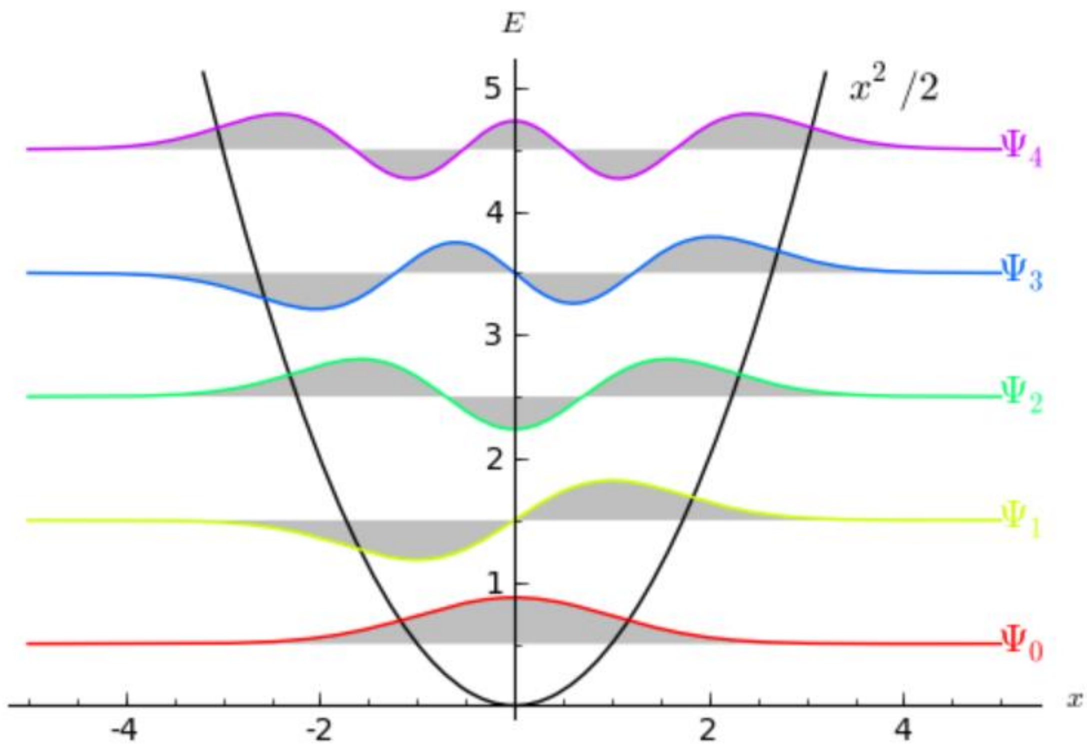
$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$



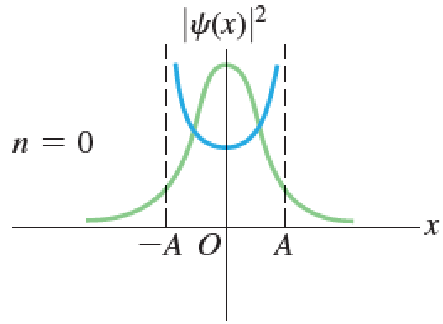
- Na mecânica clássica a menor energia seria a situação de repouso na origem das coordenadas, ou seja, energia igual a zero.

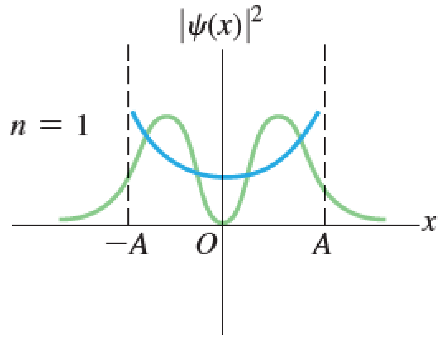
- Na mecânica quântica o principio de incerteza não permite essa situação pois isso corresponderia a uma posição e momento bem definidos.

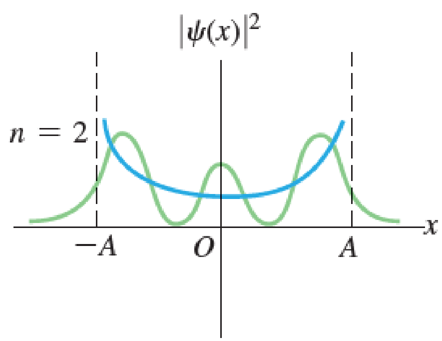

ψ(x)
n = 0
n = 1
n = 2
n = 3
x
O
−A
A


E
x² /2
Ψ4
Ψ3
Ψ2
Ψ1
Ψ0
5
4
3
2
1
-4
-2
2
4
x

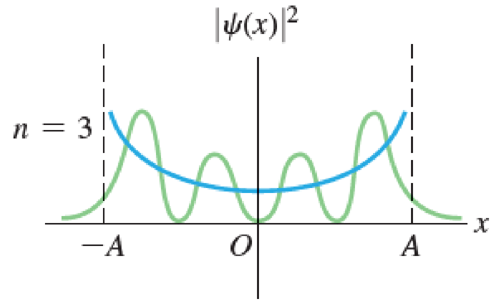
Comparação oscilador clássico e oscilador quântico

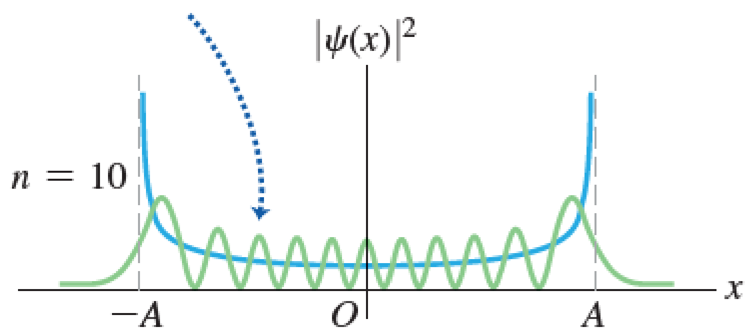




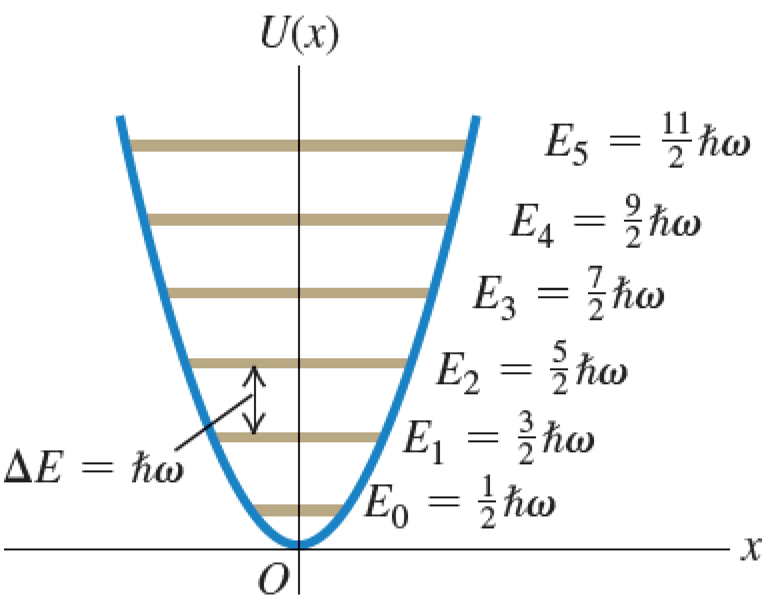


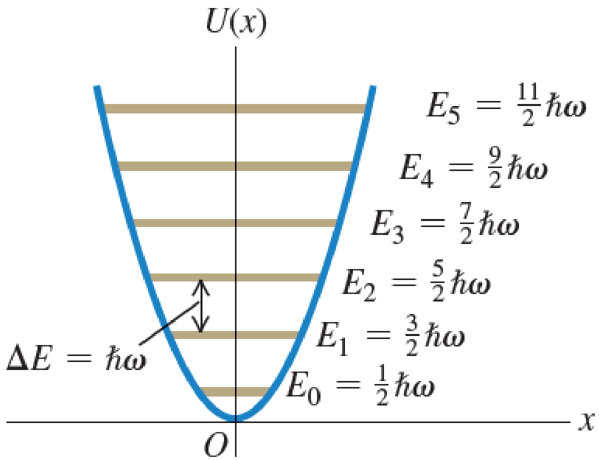
Funções de onda para n = 0, 1, 2, 3 ....

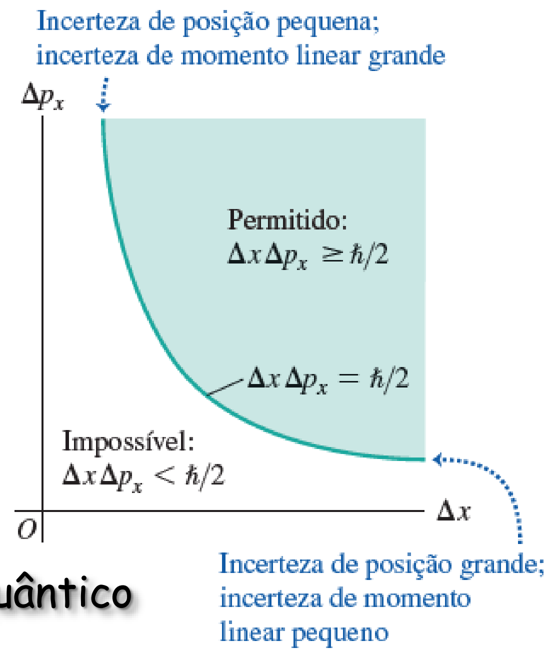




- De acordo com a análise do oscilador harmônico da mecânica newtoniana, a energia mínima igual a zero corresponde ao repouso da partícula na posição de equilíbrio x=0.
- Isso não é possível na mecânica quântica — não existe nenhuma solução da equação de Schrödinger que tenha E=0 e satisfaça a condição de contorno.
- Além disso, caso tal estado existisse, ele violaria o princípio da incerteza de Heinsenberg, porque não haveria incerteza nem na posição, nem no momento linear.







Aplicação do principio de incerteza para o oscilador harmônico quântico

Quando K=0 -> a partícula está na extremidade. $E = U = \frac{1}{2}k'A^2$

Quando U=0 a partícula está no centro com velocidade máxima -> $E = K = \frac{1}{2}m{v_{max}}^2$

Considerando a energia mais baixa do oscilador $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ temos:

$$E = \frac{1}{2}k'A^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\left(\frac{k'}{m}\right)^{1/2} \quad \text{então} \quad A = \frac{\hbar^{1/2}}{k'^{1/4}m^{1/4}}$$

$$E = \frac{1}{2}m{v_{\text{máx}}}^2 = \frac{1}{2}k'A^2 \quad \text{então} \quad v_{\text{máx}} = A\left(\frac{k'}{m}\right)^{1/2} = \frac{\hbar^{1/2}k'^{1/4}}{m^{3/4}} \qquad p_{\text{máx}} = mv_{\text{máx}} = \hbar^{1/2}k'^{1/4}m^{1/4}$$

Considerando desvios padrão temos:

$$\Delta x = A/\sqrt{2} = A/2^{1/2} \text{ e } \Delta p_x = p_{\text{máx}}/\sqrt{2} = p_{\text{máx}}/2^{1/2}.$$

O principio de incerteza de Heisenberg fornece então:

$$\Delta x \, \Delta p_x = \left(\frac{\hbar^{1/2}}{2^{1/2}\, k'^{\,1/4}\, m^{1/4}}\right)\left(\frac{\hbar^{1/2}\, k'^{\,1/4}\, m^{1/4}}{2^{1/2}}\right) = \frac{\hbar}{2}$$

Esse cálculo foi feito para uma energia $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ para uma energia menor que essa o principio de incerteza teria seria violado

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\,\Psi(x,t)$$

$$= i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \qquad (40.20)$$

(equação de Schrödinger unidimensional geral)

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\,e^{-iEt/\hbar} \qquad (40.21)$$

(função de onda dependente do tempo para um estado de energia definido)

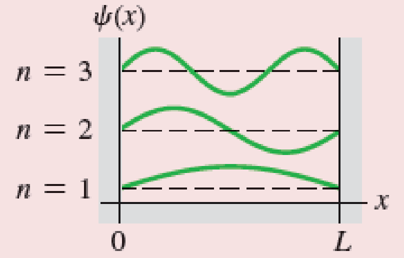
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

(equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo) (40.23)

Partícula em uma caixa: os níveis de energia para uma partícula com massa m em uma caixa (poço de potencial quadrado com profundidade infinita) com largura L são dados pela Equação 40.31. As funções de onda normalizadas correspondentes de uma partícula são dadas pela Equação 40.35. (Veja os exemplos 40.3 e 40.4.)

$$E_n = \frac{p_n{}^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8mL^2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad (40.31)$$

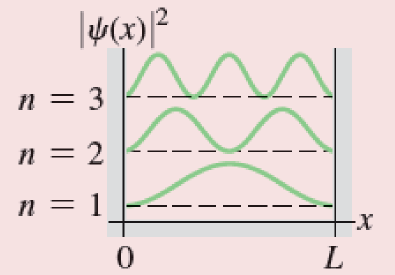
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\mathrm{sen}\,\frac{n\pi x}{L} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad (40.35)$$



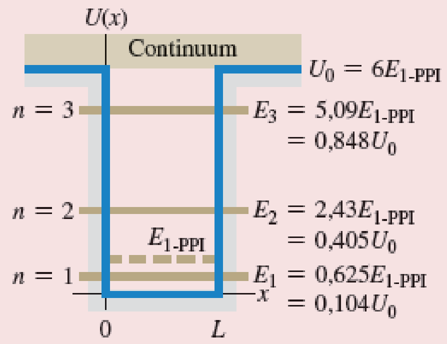
Funções de onda e normalização: para ser uma solução da equação de Schrödinger, a função de onda $\psi(x)$ e sua derivada $d\psi(x)/dx$ devem ser contínuas em todos os pontos, exceto quando a função energia potencial $U(x)$ apresenta uma descontinuidade infinita. Uma função de onda geralmente é normalizada, de modo que a probabilidade de encontrar a partícula em algum local do universo é 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1 \qquad (40.33)$$

(condição de normalização)



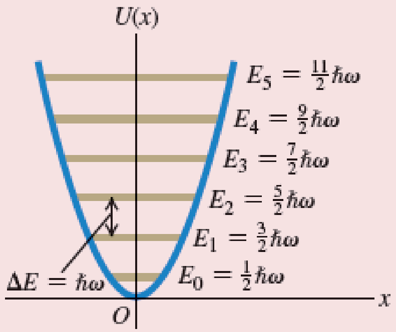
Poço de potencial finito: em um poço de potencial com profundidade finita U_0, os níveis de energia são mais baixos que os de um poço com profundidade infinita com a mesma largura, e é finito o número de níveis de energia correspondentes a estados ligados. Os níveis de energia são obtidos igualando as funções de onda nas paredes do poço de modo a satisfazer a continuidade de $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$. (Veja os exemplos 40.5 e 40.6.)



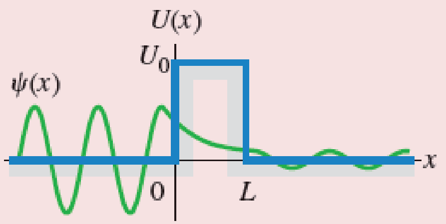
Oscilador harmônico quântico: os níveis de energia de um oscilador harmônico, para o qual $U(x) = \frac{1}{2} k'x^2$, são dados pela Equação 40.46. O espaçamento entre quaisquer dois níveis adjacentes é $\hbar\omega$, onde $\omega = \sqrt{k'/m}$ é a frequência angular de oscilação do oscilador harmônico newtoniano correspondente. (Veja o Exemplo 40.8.)

$$E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k'}{m}} = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$(n = 0, 1, 2, 3, \ldots) \qquad (40.46)$$

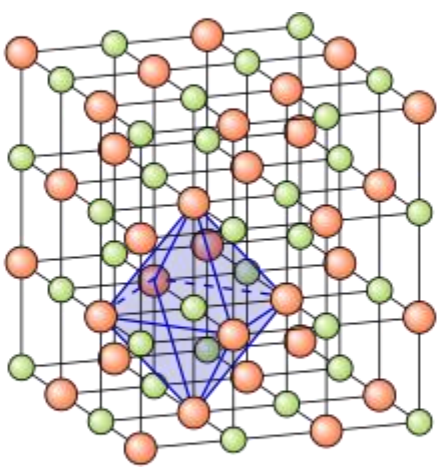


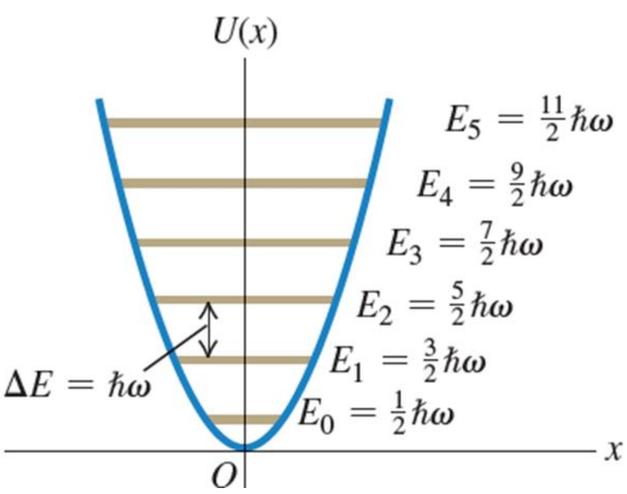
Barreiras de potencial e tunelamento: existe certa probabilidade de uma partícula penetrar uma barreira de energia potencial mesmo que sua energia cinética inicial seja menor que a altura da barreira. Esse processo é chamado de tunelamento. (Veja o Exemplo 40.7.)



Um átomo de sódio com massa igual a $3{,}82 \times 10^{-26}$ kg vibra no interior do cristal. A energia potencial cresce por 0,0075 eV quando o átomo é deslocado 0,014 nm a partir de sua posição de equilíbrio. Trate o átomo como um oscilador harmônico. (a)

- (a) Calcule a frequência angular usando a mecânica newtoniana.
- (b) Determine o espaçamento entre dois níveis de energia adjacentes em elétrons-volt, de acordo com a mecânica quântica.
- (c) Se um átomo emite um fóton durante a transição de um nível vibracional até o nível seguinte mais baixo, qual é o comprimento de onda do fóton emitido? Em que região do espectro eletromagnético esse fóton se situa?





- (a) Calcule a frequência angular usando a mecânica newtoniana.

$$U = \frac{1}{2}k'x^2,$$

U = 0,0075 eV = 1,2 x 10^{-21} J

$$k' = \frac{2U}{x^2} = \frac{2(1{,}2 \times 10^{-21}\ \mathrm{J})}{(0{,}014 \times 10^{-9}\ \mathrm{m})^2} = 12{,}2\ \mathrm{N/m}$$

x = 0,014 10^{-9} m

A frequência angular clássica é então dada por: $\omega = \sqrt{\frac{k'}{m}} = \sqrt{\frac{12{,}2\ \mathrm{N/m}}{3{,}82 \times 10^{-26}\ \mathrm{kg}}} = 1{,}79 \times 10^{13}\ \mathrm{rad/s}$

- (b) O espaçamento entre níveis adjacentes é dado por:

$$E_{p+1} - E_p = \left[(p+1) + \frac{1}{2} - \left(p + \frac{1}{2}\right)\right]\hbar\omega = \hbar\omega$$

$$\hbar\omega = (1{,}055 \times 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s})(1{,}79 \times 10^{13}\ \mathrm{rad/s}^{-1})$$
$$= 1{,}89 \times 10^{-21}\ \mathrm{J}\left(\frac{1\ \mathrm{eV}}{1{,}602 \times 10^{-19}\ \mathrm{J}}\right) = 0{,}0118\ \mathrm{eV}$$

- (c) Se um átomo emite um fóton durante a transição de um nível vibracional até o nível seguinte mais baixo, qual é o comprimento de onda do fóton emitido? Em que região do espectro eletromagnético esse fóton se situa?

A energia E do fóton emitido é igual a diferença de energia dos níveis que ocorre a transição.

E=0.118 eV e

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{(4{,}136 \times 10^{-15}\ \text{eV} \cdot \text{s})(3{,}00 \times 10^{8}\ \text{m/s})}{0{,}0118\ \text{eV}}$$

$$= 1{,}05 \times 10^{-4}\,\text{m} = 105\ \mu\text{m}$$

Esse comprimento de onda corresponde ao infra-vermelho.

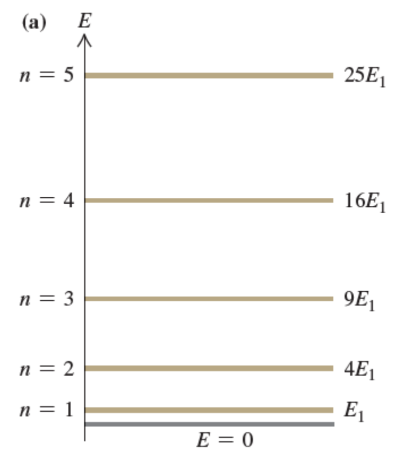
40.10 • Um próton está em uma caixa de largura L. Qual deve ser a largura da caixa para que a energia do nível fundamental seja igual a 5,0 MeV, valor típico para a energia de ligação de partículas no interior de um núcleo? Compare o resultado com o tamanho de um núcleo, que é da ordem de 10^{-14} m.

As energias dos estados ligados de um poço infinito é dada por:

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

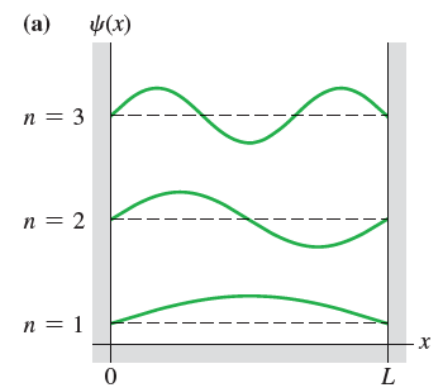
L é a largura do poço (caixa)

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 \qquad E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$$

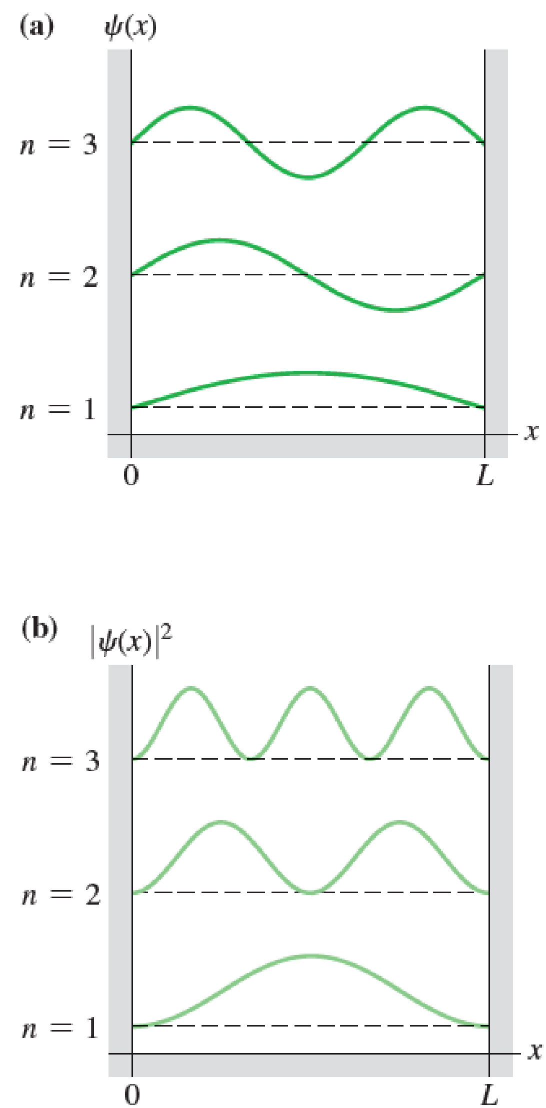


$$L = \frac{h}{\sqrt{8mE_1}}$$

$$L = \frac{(6.626\times10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s})}{\sqrt{8(1.673\times10^{-27}\ \text{kg})(5.0\times10^{6}\ \text{eV})(1.602\times10^{-19}\ \text{J/eV})}} = 6.4\times10^{-15}\ \text{m}.$$



40.16 • Lembre-se de que $|\psi|^2 dx$ é a probabilidade de encontrar uma partícula com uma função de onda normalizada $\psi(x)$ no intervalo entre x e $x + dx$. Considere uma partícula no interior de uma caixa com paredes rígidas em $x = 0$ e $x = L$. Suponha que a partícula esteja no nível fundamental e use ψ_n conforme indicado na Equação 40.35. (a) Para quais valores de x, caso existam, no intervalo de 0 até L, a probabilidade de encontrar a partícula é igual a zero? (b) Para que valores de x a probabilidade atinge seu valor máximo? (c) Suas respostas aos itens (a) e (b) estão de acordo com a Figura 40.12? Explique.



Função de onda normalizada do poço infinito é dada por:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

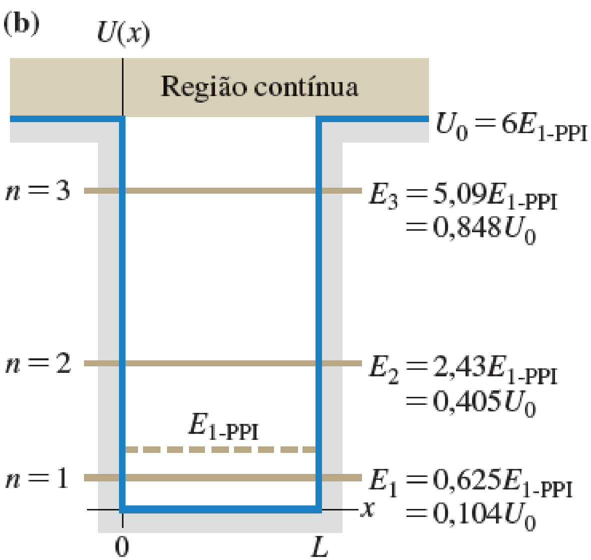
Função probabilidade para o nível fundamental (n=1):

$$\Psi_1{}^2(x) = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

a) A função probabilidade se anula para x=0 ou x=a (L)
b) A função é máxima no meio da caixa (x=L/2)
c) Consistente com a figura.

40.25 •• Um próton está confinado em um poço quadrado de largura de 4,0 fm = $4{,}0 \times 10^{-15}$ m. A profundidade do poço é igual a seis vezes o valor da energia do nível fundamental $E_{1\text{-PPI}}$ do poço infinito correspondente. Se o próton faz uma transição do nível com energia E_1 para o nível com energia E_3, absorvendo um fóton, qual o comprimento de onda do fóton?

Para $U_0 = 6E_\infty$ ⇒ $E_1 = 0.625E_\infty$ and $E_3 = 5.09E_\infty$



Com a energia do estado fundamental para o poço infinito: $E_\infty = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

$$E_\infty = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{\pi^2(1.055\times10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s})^2}{2(1.673\times10^{-27}\ \text{kg})(4.0\times10^{-15}\ \text{m})^2} = 2.052\times10^{-12}\ \text{J}$$

Energia da transição de 1->3:

$$\Delta E = E_3 - E_1 = (5.09 - 0.625)E_\infty = 4.465E_\infty$$

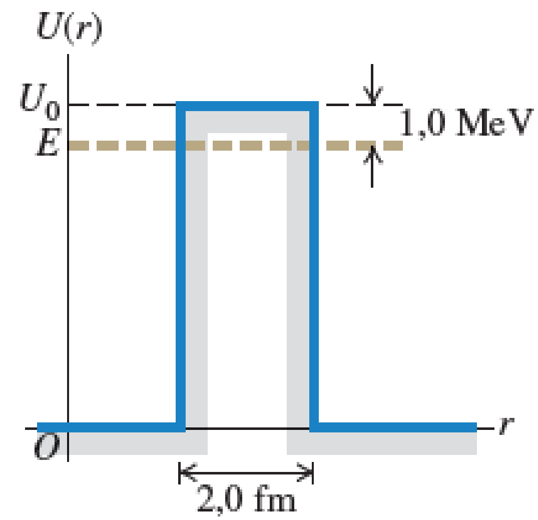
$$\Delta E = 4.465(2.052\times10^{-12}\ \text{J}) = 9.162\times10^{-12}\ \text{J}$$

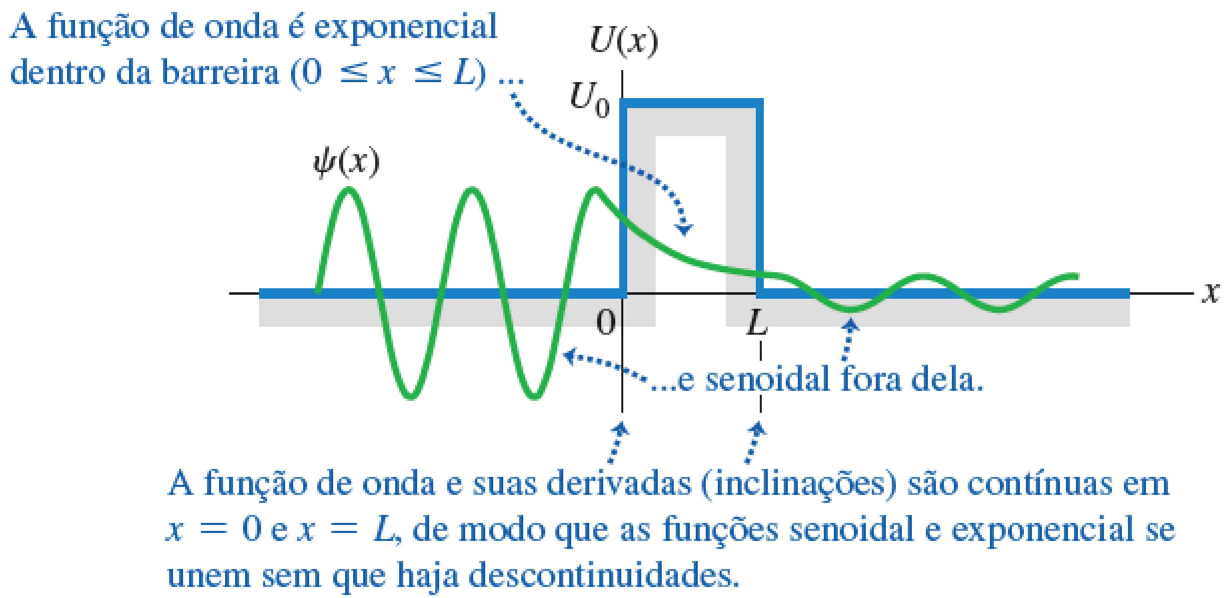
Comprimento de onda:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6.626\times10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s})(2.998\times10^{8}\ \text{m/s})}{9.162\times10^{-12}\ \text{J}} = 2.2\times10^{-14}\ \text{m} = 22\ \text{fm}.$$

40.28 •• Decaimento alfa. Em um modelo simples de núcleo radioativo, uma partícula alfa ($m = 6{,}64 \times 10^{-27}$ kg) está presa em uma barreira quadrada com altura igual a 30,0 MeV e largura de 2,0 fm. (a) Qual é a probabilidade de tunelamento se a partícula alfa colide com a barreira com uma energia cinética 1,0 MeV abaixo do topo da barreira (**Figura E40.28**)? (b) Qual é a probabilidade de tunelamento se a energia cinética da partícula alfa está 10,0 MeV abaixo do topo da barreira?

Figura E40.28





Coeficiente de transmissão

$$T = |F|^2/|A|^2$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}\sinh^2 k_2 a}$$

Quando T<<1 podemos aproximar para:

$$T = Ge^{-2\kappa L} \quad \text{onde} \quad G = 16\frac{E}{U_0}\left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \quad \text{e} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

$$T = Ge^{-2\kappa L} \text{ onde } G = 16\frac{E}{U_0}\left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \text{ e } \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

$$T = 16\frac{E}{U_0}\left(1 - \frac{E}{U_0}\right)e^{\frac{-2\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}L}$$

$$U_0 = 30.0\times10^6 \text{ eV}, L = 2.0\times10^{-15} \text{ m}, m = 6.64\times10^{-27} \text{ kg}$$

a) Qual a probabilidade de tunelamento para uma partícula com energia cinética 1.0 MeV abaixo da Barreira ?

$$U_0 - E = 1.0\times10^6 \text{ eV } (E = 29.0\times10^6 \text{ eV}), T = 0.090.$$

b) Qual a probabilidade de tunelamento para uma partícula com energia cinética 10.0 MeV abaixo da Barreira ?

$$U_0 - E = 10.0\times10^6 \text{ eV } (E = 20.0\times10^6 \text{ eV}), \ T = 0.014$$