S T Q Q S S D

Exercícios

(1) (40.11) Um elétron encontra-se em uma "caixa" (ou poço de potencial infinito) unidimensional, de largura $L = 3\times 10^{-10}$ m. (a) Qual é o comprimento de onda de de Broglie associado ao elétron? (b) Qual o MÓDULO do momento linear do elétron quando no nível de energia n? (c) Qual a incerteza na medida da sua posição?

(a) e (b)

$$\lambda^{n}_{\text{de Broglie}} = \frac{h}{p_n}$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} \Rightarrow \boxed{p_n = \sqrt{2mE_n}}$$

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)\cdot n^2$$

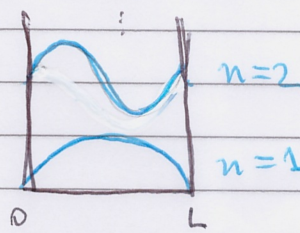
$$\lambda^{n}_{\text{de Broglie}} = \frac{h}{\sqrt{\frac{2m h^2}{8 m L^2}}}\cdot\frac{1}{n} = 2L/n$$

$$\boxed{\lambda^{n}_{\text{de Broglie}} = \frac{2L}{n}}$$

$n=1 \rightarrow \lambda_1 = 6\times 10^{-10}$ m

$n=2 \rightarrow \lambda_2 = 3\times 10^{-10}$ m

$\vdots$



Note (1) Mecânica Quântica:

$k_n L = n\pi$ C.C. ... confinamento

$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} \Rightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$

$\psi(x) = A\sin kx$

$\psi(L) = A\sin kL = 0$

$kL = n\pi$

$k_n = \frac{n\pi}{L}$

Ou seja: M.Q. mostra coerência com a teoria de de Broglie

S T Q Q S S D

Aula 25/2/

Note (2) Módulo de p_n:
$$\boxed{p_n = \frac{h}{\lambda^n_{\text{de Broglie}}} = \frac{h}{\frac{2L}{n}} = \frac{nh}{2L}}$$

A função de onda "completa":

$$\Psi_n(x,t) = A e^{-iEt/\hbar} \cdot \psi_n(x)$$

$$\psi_n = A \sin k_n x = \underbrace{\left(e^{+ik_n x} - e^{-ik_n x}\right)}_{2i \sin k_n x} \cdot \bar{A}$$

$$\vec{p}_n = \begin{cases} p_n \hat{i} \\ -p_n \hat{i} = p_n(-\hat{i}) \end{cases}$$

$$p_n = \frac{h}{\lambda^n} = \frac{h}{2\pi/k_n} = \frac{h}{2\pi} \cdot k_n$$

de Broglie

$k_n \hat{i}$

$k_n(-\hat{i})$

vetor de onda

(c)

$\Delta x \sim L$ incerteza na medida da posição.

(2) Uma partícula de massa m tem velocidade de aproximadamente 300 m/s. Deseja-se medir, simultaneamente, a posição e a velocidade dessa partícula. Suponha que a velocidade será medida dentro de uma precisão de 0,01%. Nessas condições, qual seria a máxima precisão possível de ser obtida na medida da posição, no caso em que a) $m = 50\,g$; b) $m = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg (massa do elétron)

$v_x \simeq 300$ m/s $\Rightarrow \Delta v_x \simeq \frac{0{,}01}{100} \cdot 300$ m/s $= 3\times10^{-2}$ m/s

$\boxed{\Delta v_x = 3\times10^{-2}\ \text{m/s}}$ (incerteza na medida velocidade)

p. Incerteza Heisenberg:

$$\Delta x\, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \hbar \simeq 10^{-34}\ \text{J.s}$$

$\boxed{\text{Máxima precisão} \Leftrightarrow \Delta x \text{ mínimo}}$

$$(\Delta x)_{min} \sim \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar}{2.m.\Delta v_x}$$ = incerteza da medida em x obtida com a máxima precisão

(a) para $m = 50\,g = 5\times10^{-2}$ kg

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{2\times5\times10^{-2}\times3\times10^{-2}} \sim \frac{10^{-31}}{3}\ \text{m}$$ super precisão!

(b) para $m = 9\times10^{-31}$ kg

$$\Delta x \sim \frac{1}{6}\times10^{-2}\ \text{m}$$ muito imprecisa!!

muito maior (10x maior!) do que o tamanho partícula

spiral

Funções de onda : átomo de H

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\, Y_{l m_l}(\theta,\varphi)$$

tais que $|\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)|^2\, dV = |\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)|^2\, r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$

= probabilidade de encontrar a partícula entre V e $V+dV$

$\Rightarrow |\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)|^2$ = densidade (volumétrica) de probabilidade p/ encontrar a partícula em r, θ, φ.

- Normalização: $\iiint |\psi|^2 dV = 1$

- (Função) probabilidade radial: $P_{rob}(r)\, dr$

$$P_{rob}(r)\, dr = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, |\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)|^2\, r^2\, dr$$

- (Função) densidade de probabilidade radial : $P_{rob}(r)$

Exemplo : $|\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)|^2 \to |\psi_{n,l,m_l}(r)|^2$

(para o qual Ψ só depende de r)

$$\Rightarrow P_{rob}\, dr = \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta}_{4\pi}\, |\psi_{n,l,m_l}(r)|\, r^2\, dr$$

$$\Rightarrow \boxed{P_{rob}(r) = 4\pi r^2\, |\psi_{n,l,m_l}(r)|^2}$$

densidade de probabilidade

Exercício (3) A função de onda do estado 2p do átomo de Hidrogênio é:

$$\psi_{21m_\ell}(\vec{r}) = R_{21}(r)\, Y_{1m_\ell}(\theta,\varphi),$$

onde

$$R_{21}(r) = \frac{1}{a_0^{3/2}\cdot\sqrt{24}}\,\frac{r}{a_0}\,e^{-r/2a_0}$$

$$a_0 = 0{,}529\ \mathring{A}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \qquad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\operatorname{sen}\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

a) Para esse estado, ~~calcule~~ mostre que a função de onda ψ_{21,m_ℓ} é normalizada

$$I \equiv \int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=0}^{\infty} |\psi_{21m_\ell}|^2\, r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi =$$

$$= \int_0^\infty r^2\,|R_{21}(r)|^2\,dr \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \int_{\theta=0}^{\pi} |Y_{1,m}|^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta$$

* Propriedades dos $Y_{\ell m}$: são normalizados na esfera unitária

$$\Rightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta\, |Y_{\ell,m}|^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta = 1 \qquad \forall\ \ell, m$$

spiral®

Com isso:

$$I \to I_r = \int_0^{\infty} \frac{1}{a_0^3} \cdot \frac{1}{24} \cdot \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/a_0} \underbrace{r^2 dr}$$

$\boxed{x \equiv r/a_0}$ $\longrightarrow$ $dr = a_0 \, dx$

$r^4 = a_0^4 x^4$

$$I_r = \frac{1}{a_0^5} \frac{1}{24} \int_0^{\infty} \cancel{a_0^4} x^4 e^{-x} \cdot \cancel{a_0} \, dx = \frac{1}{24} \int_0^{\infty} x^4 e^{-x} dx$$

$\boxed{\underline{\text{Dado:}} \quad \int_0^{\infty} x^n e^{-x} = n! \qquad n \text{ inteiro}}$

$$I_r = \frac{1}{24} \cdot 4! = \frac{4 \times 3 \times 2 \times 1}{24} = 1 \quad ✓$$

(b) Calcule o raio médio $\langle r \rangle$ (média da posição do elétron) do átomo nesse estado.

$$\langle r \rangle = \int dV \left| \psi_{21,m_\ell}(r, \theta, \varphi) \right|^2 r \qquad dV = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$$

o que muda em relação ao cálculo do ítem (a) é a última integral

$$\langle r \rangle = I_r = \frac{a_0}{24} \int x^5 \cdot e^{-x} dx = \frac{a_0}{24} \cdot 5! = \underline{\underline{5a_0}}$$

spiral®

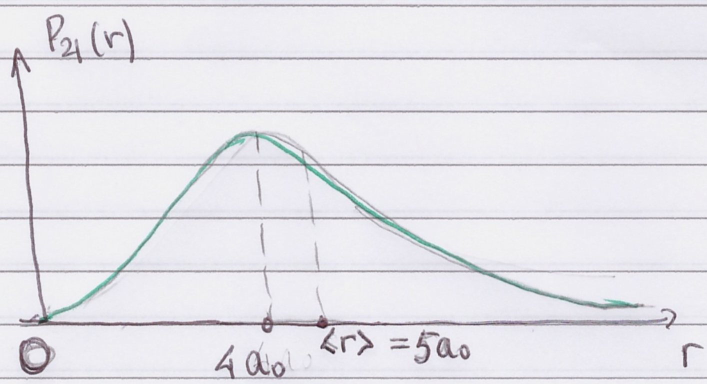
(c) Calcule o "raio mais provável" r_{max} = valor de r para o qual a densidade de probabilidade radial possui um máximo.

$$P_{rob}(r) = P_{21}(r) = (4\pi r^2) \cdot |R_{21}(r)|^2$$

$$\left.\frac{dP_{21}(r)}{dr}\right|_{r_{max}} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dr} r^2 |R_{21}(r)|^2 \Rightarrow \left.\frac{d}{dr}\left(r^4 e^{-r/a_0}\right)\right|_{r_{max}} = 0$$

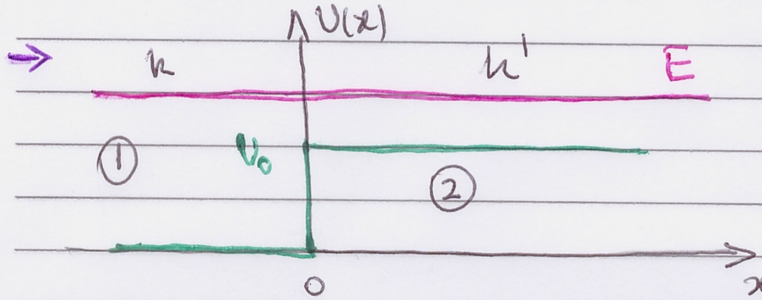
$$\left.\underbrace{\left(4r^3 - \frac{r^4}{a_0}\right)}_{4r_{max}^3 - \frac{r_{max}^4}{a_0} = 0} e^{-r/a_0}\right|_{r_{max}} = 0$$

$$4r_{max}^3 - \frac{r_{max}^4}{a_0} = 0 \Rightarrow \boxed{r_{max} = 4a_0}$$



spiral

Exercício (4) "Potencial degrau" com $E > U_0$



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

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

$$ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \left(E - U(x)\right)\psi(x) $$

$$ \boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\left(E - U(x)\right)\cdot\frac{2m}{\hbar^2}\,\psi(x)} $$

Em (1) : $\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k^2\,\psi(x)$ $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

Em (2) : $\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k'^2\,\psi(x)$ $k' = \sqrt{\dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$

spiral

S T Q Q S S D

Aula 25/9/

Soluções:

$$\psi_{①}(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\to \text{ incidente}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\to \text{ refletida}}$$

$$\psi_{②}(x) = \underbrace{C e^{ik'x}}_{\text{transmitida}} + \cancel{D e^{-ik'x}}$$

não há reflexão na região ② $\Rightarrow \boxed{D = 0}$

Condições de contorno:

$$\begin{cases} \psi_{①}(0) = \psi_{②}(0) \Rightarrow A + B = C \\ \psi'_{①}(0) = \psi'_{②}(0) \Rightarrow ik(A-B) = ik'C \end{cases}$$

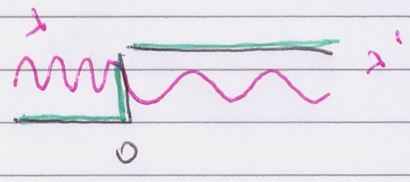
Para $A = 1$ $\Rightarrow 1 + B = C \Rightarrow \cancel{i}k(1-B) = \cancel{i}k'(1+B)$

$$B(k'+k) = k - k'$$

$$\boxed{B = \frac{(k-k')}{k+k'}}$$

$$\boxed{C = \frac{2k}{k+k'}}$$

⊙ $k > k' \Rightarrow \lambda < \lambda'$



⊙ Para $k = k'$ $(V_0 = 0) \Rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ C = 1 \end{cases}$

⊙ de Broglie: $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{mv}$

$\lambda' = \dfrac{h}{p'} = \dfrac{h}{mv'}$

$$\frac{v}{v'} = \frac{\lambda'}{\lambda} > 1 \Rightarrow \boxed{v > v'}$$