Eletromagnetismo

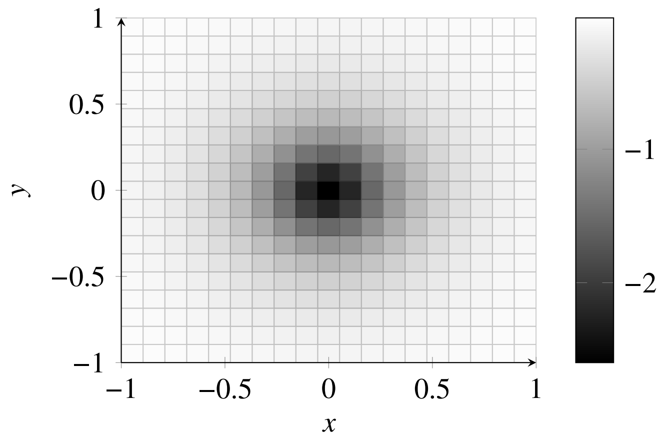
André Del Bianco Giuffrida

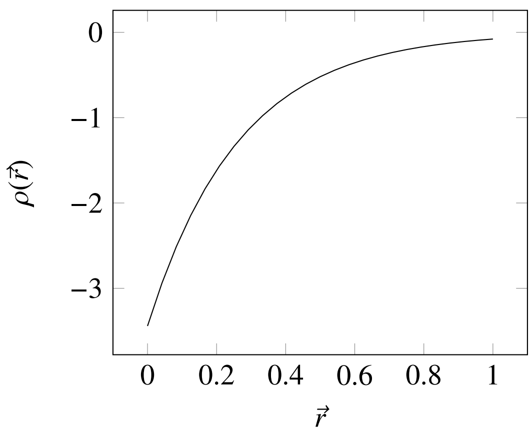
Lista 1
Ex 5

Segundo a mecânica quântica, um modelo para um átomo de hidrogênio com o elétron no estado fundamental (orbital 1s) consiste de um próton fixo na origem (considerado como uma carga $+e_p$ pontual) e o elétron distribuído como uma nuvem de carga negativa $-e_e$, esfericamente simétrica em volta do próton. Em coordenadas esféricas, a densidade de carga da nuvem eletrônica é dada por

$$\rho(\vec{r}) = -A\, e^{-(2r/a_0)}$$

Onde $a_0 = 0.529\text{Å}$ é o raio de Bohr.
(a) Calcule a constante A em função de e_e e a_0.
(b) Determine o campo elétrico e o potencial elétrico em todo o espaço.
(c) Confira a consistência do potencial obtido, calculando a densidade de carga através da equação de Poisson.
(d) Calcule a energia eletrostática do sistema, que corresponderia à energia de ligação do elétron ao átomo. Compare com o valor obtido com métodos de mecânica quântica ($-13.6eV$, sendo $1eV = 1.6010 - 19J$).





(a)
Pela definição de densidade,

$$\int_v \rho(\vec{r})\, dv = Q_v \quad \text{e com isso} \quad \int_v -A\, e^{-(2r/a_0)}\, dv = -e_e$$

Onde o volume v é a esfera de raio infinito centrada no próton, portanto em esféricas:

$$\int d\Omega \int_0^\infty A\, r^2 e^{-(2r/a_0)}\, dr = e_e \quad \rightarrow \quad \int_0^\infty A\, r^2 e^{-(2r/a_0)}\, dr = \frac{e_e}{4\pi}$$

Para resolver essa integral podemos analisar a seguinte propriedade das exponenciais:

$$I = \int Ae^{-\alpha r}\, dr \quad \frac{\partial I}{\partial \alpha} = \int -Are^{-\alpha r}\, dr \quad \frac{\partial^2 I}{\partial \alpha^2} = \int Ar^2 e^{-\alpha r}\, dr$$

$$I = -\frac{Ae^{-\alpha r}}{\alpha} \quad , \quad \frac{\partial I}{\partial \alpha} = \frac{Ae^{-\alpha r}(\alpha r + 1)}{\alpha^2} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2 I}{\partial \alpha^2} = -\frac{Ae^{-\alpha r}(\alpha^2 r^2 + 2\alpha r + 2)}{\alpha^3}$$

$$\int_0^\infty A\, r^2 e^{-(2r/a_0)}\, dr = \frac{e_e}{4\pi} \quad \text{substituindo temos} \quad -\left.\left.\frac{Ae^{-\alpha r}(\alpha^2 r^2 + 2\alpha r + 2)}{\alpha^3}\right|_{\alpha=2/a_0}\right|_{r=0}^{\infty} = \frac{e_e}{4\pi}$$

$$\left(2\frac{A}{\alpha^3}\right) = \frac{e_e}{4\pi} \quad \text{substituindo } \alpha = \frac{2}{a_0}$$

$$A = \frac{e_e}{\pi a_0^3}$$

(b)

Partindo de gauss e utilizando o resultado do item (a), obtemos o campo elétrico como:

$$\text{Gauss:} \quad \oint \vec{E}\cdot d\vec{a} = \int_v \frac{\rho}{\epsilon_0} dv \quad ; \quad \rho(\vec{r}) = -\frac{e_e}{\pi a_0^3}\, e^{-(2r/a_0)}$$

$$\oint \vec{E}\cdot d\vec{a} = \int_v -\frac{e_e}{\pi a_0^3}\, e^{-(2r/a_0)} dv$$

Essa integral sai como na anterior

$$\oint \vec{E}\cdot d\vec{a} = -\frac{e_e}{\pi}\left.\frac{(\frac{4}{a_0^2}r^2 + \frac{4}{a_0}r + 2)e^{\frac{-2r}{a_0}}}{8}\right|_{r=0}^{r} \quad , \quad \oint \vec{E}\cdot d\vec{a} = \frac{e_e}{\pi}\left(\frac{2 - (\frac{4}{a_0^2}r^2 + \frac{4}{a_0}r + 2)e^{\frac{-2r}{a_0}}}{8}\right)$$

$$\vec{E}4\pi r^2 = \frac{e_e}{\pi}\left(\frac{2 - (\frac{4}{a_0^2}r^2 + \frac{4}{a_0}r + 2)e^{\frac{-2r}{a_0}}}{8}\right)\hat{r} \quad , \quad \vec{E} = \frac{e_e}{32\pi^2 r^2}\left(2 - \left(\frac{4}{a_0^2}r^2 + \frac{4}{a_0}r + 2\right)e^{\frac{-2r}{a_0}}\right)\hat{r}$$

Calculando o Potencial:
Usando o referencial no infinito pois a densidade de carga vai a zero

$$\vec{E} = -\nabla V \quad , \quad V(r) - V(\infty) = \int_r^\infty \vec{E}\cdot d\vec{l}$$

$$V(\infty) = 0 \quad , \quad V(r) = \int_r^\infty \frac{e_e}{32\pi^2 r^2}\left(2 - \left(\frac{4}{a_0^2}r^2 + \frac{4}{a_0}r + 2\right)e^{\frac{-2r}{a_0}}\right)\hat{r}\cdot d\vec{l}$$

$$V(r) = \int_r^\infty \frac{e_e}{32\pi^2 r^2}\left(2 - \left(\frac{4}{a_0^2}r^2 + \frac{4}{a_0}r + 2\right)e^{\frac{-2r}{a_0}}\right)dr$$

$$\frac{V(r)32\pi^2}{e_e} = \int_r^\infty 2\frac{1}{r^2}dr - \int_r^\infty \frac{4}{a_0^2}\, e^{\frac{-2r}{a_0}}\, dr - \int_r^\infty \frac{1}{r}\frac{4}{a_0}\, e^{\frac{-2r}{a_0}}\, dr - \int_r^\infty \frac{1}{r^2}2\, e^{\frac{-2r}{a_0}}\, dr$$

$$\frac{V(r)32\pi^2}{e_e} = -2\frac{1}{r} + \frac{2}{a_0}\, e^{\frac{-2r}{a_0}} - \int_r^\infty \left(\frac{1}{r}\frac{4}{a_0} + \frac{1}{r^2}2\right)e^{\frac{-2r}{a_0}}\, dr$$