BKC 0103-15 – Física Quântica – Segunda Avaliação – 2019.3 – prova B

Professor: Luciano Cruz Turma: ______

Nome: Gabarito R.A. ________________

Regras:

A avaliação tem duração de 1 hora e 40 minutos.

É proibido o uso de calculadoras, celulares e outros eletrônicos similares.

É proibida qualquer consulta a materiais auxiliares ou colegas, a avaliação será anulada caso isto ocorra.

Todas as respostas devem ser justificadas e os cálculos devem ser apresentados explicitamente.

Boa sorte!

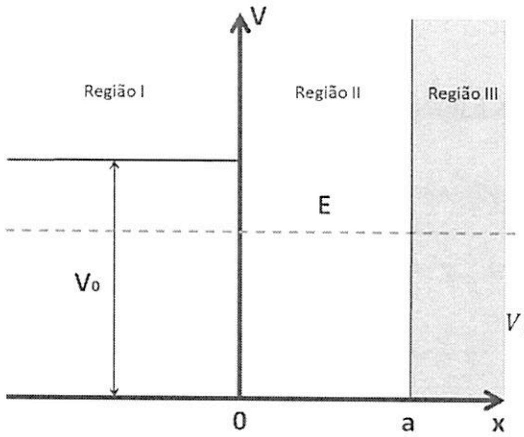
Questões:

1 – (3 pts) Uma partícula de massa m está submetida a um potencial harmônico valido para qualquer valor de x. A função de onda do estado fundamental é $\psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2L^2}}$ e a energia $E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$ Responda:

(a) (1,0pt) Determine a posição mais provável de encontrar esta partícula.

(b) (2,0pt) Calcule os valores de $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$ e mostre que $\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$, o que condiz com o principio de incerteza de Heisenberg.

2 -(4 pts) Considere uma partícula com energia E que pode se mover em uma dimensão e está confinada na região $0 < x < a$. Para $x < 0$, o potencial é V_0, , com $V_0 > E$ e para $x > a$, o potencial é infinito, como indicado na figura. Responda:



$$V(x) = \begin{cases} V_0, x \leq 0 \\ 0, 0 < x < a \\ \infty, x \geq a \end{cases}$$

(a) (1,5pt) Determine qual a forma da função de onda para cada uma das três regiões: I, II e III, levando em conta o critério de convergência da função em seus extremos.

(b) (1,5pt) Aplicando as condições de contorno do problema, mostre que os valores de energia dos estados neste poço podem ser determinadas por meio da solução de uma equação na forma: $\boldsymbol{tg(R) = S}$ e obtenha os valores de **R** e **S** em termos dos parâmetros do problema (E, V_0 e a) e constantes universais.

(c) (1,0pt) Faça os esboços da função de onda e da densidade de probabilidade do primeiro estado excitado deste poço.

3 – (3,0 pontos) Considere um átomo de Hidrogênio (Z=1) de massa reduzida μ, o elétron deste átomo encontra-se no estado com a função de onda radial $R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0{}^3}} e^{-r/a_0}$, com n =1 e l =0 e a_0 é o raio de Bohr. O potencial de interação entre o núcleo e o elétron é dado por $V(r) = \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \frac{1}{r}$. Responda:

(a) (1pt) Por substituição direta na equação de Schrodinger radial, mostre que a função acima é solução da equação e determine o valor da energia correspondente a este estado.

(b) (2pt) Calcule a probabilidade de encontrar o elétron entre os raios $a_0/2$ e infinito.

Física Quântica 2019.3 – P2 – INFORMAÇÕES QUE VOCÊ PODE (OU NÃO) PRECISAR

Relações, equações e fórmulas principais

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta x = \sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad E = hf = \hbar\omega \qquad E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_T - V\right] \qquad T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \qquad R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \qquad T \approx 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2\alpha a} \quad \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\langle f(x)\rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, f(x)\, \psi(x)\, dx \qquad \hat{p}_x\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x) \qquad p_x^2\psi(x) = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R(r)\right) - \left[V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R(r) = ER(r) \qquad \langle f(r)\rangle = \int_0^\infty R_{nl}^*(r)f(r)R_{nl}(r)r^2\,dr$$

$$n = 1,2,3\ldots \qquad l = 0,1,2,\ldots,n-1 \qquad m = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$$

$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2\, r^2\sin\theta\, dr\,d\theta\,d\varphi = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2\, r^2\,dr = 1$$

Tabela de Derivadas e Integrais

$$y = u^n \Rightarrow y' = n.u^{n-1}.u' \qquad \int u^n\,du = \frac{u^{n+1}}{n+1} + c, \quad n \neq -1 \qquad \int u \cdot dv = uv - \int v\,du$$

$$y = e^u \Rightarrow y' = e^u.u' \qquad \int e^{at}\,dt = \frac{1}{a}e^{at} + C \qquad \int t^n \cdot e^{at}\,dt = \frac{1}{a}t^n e^{at} - \frac{n}{a}\int t^{n-1}e^{at}\,dt$$

$$y = \text{sen}(u) \Rightarrow y' = \cos(u).u' \qquad \int \text{sen}(at)\,dt = \frac{-1}{a}\cos(at) + C$$

$$y = \cos(u) \Rightarrow y' = -\text{sen}(u).u' \qquad \int \cos(at)\,dt = \frac{1}{a}\text{sen}(at) + C$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2m}\,e^{-\beta x^2}dx = (-1)^m\pi^{1/2}\,\frac{d^m}{d\beta^m}\left[\beta^{-1/2}\right], \text{m} = 1,2,3\ldots \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2m+1}\,e^{-\beta x^2}dx = 0, \text{m} = 0,1,2,3\ldots \qquad \int_0^{+\infty} r^m\,e^{-\frac{r}{\alpha}}dr = m!\;\alpha^{m+1}, \text{m} = 1,2,3\ldots$$

Relação Trigonométricas

α	0° (0 рад)	30° (π/6)	45° (π/4)	60° (π/3)	90° (π/2)	180° (π)	270° (3π/2)	360° (2π)
$\sin\alpha$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	0	-1	0
$\cos\alpha$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	-1	0	1

$$\text{sen}^2(\theta) = \frac{1-\cos(2\theta)}{2} \qquad \cos^2(\theta) = \frac{1+\cos(2\theta)}{2} \qquad \text{sen}^2(\theta) + \cos^2(\theta) = 1$$

$$sen(a \pm b) = sen(a)\cos(b) \pm \cos(a)\,\text{sen}(b)$$

$$\cos(a \pm b) = \cos(a)\cos(b) \mp sen(a)sen(b)$$

$$e^{\pm ix} = \cos(x) \pm i\,sen(x) \qquad \cos(x) = \frac{e^{ix}+e^{-ix}}{2} \qquad \text{sen}(x) = \frac{e^{ix}-e^{-ix}}{2i}$$

$\sqrt{2} \approx 1{,}4$; $\sqrt{3} \approx 1{,}7$; $\sqrt{5} \approx 2{,}2$; $\sqrt{7} \approx 2{,}6$; $\sqrt{11} \approx 3{,}3$; $\sqrt{13} \approx 3{,}6$

$e^{-3} \approx 0{,}050$; $e^{-2} \approx 0{,}1350$; $e^{-1} \approx 0{,}368$; $e^0 = 1$; $e^1 \approx 2{,}72$; $e^2 \approx 7{,}39$; $e^3 \approx 20{,}1$

Prova B.

Q1- $\Psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2L^2}}$; $E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$

a) $\frac{d}{dx}\cancel{P}(x) = 0$ $\quad P(x) = |\Psi_0(x)|^2 = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/2} e^{-\frac{x^2}{L^2}}$

$$\frac{d}{dx}P(x) = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/2} \left\{\left(-\frac{2x}{L}\right) e^{-x^2/L^2}\right\} = 0$$

$$x e^{-x^2/L^2} = 0 \Rightarrow \underline{\underline{x = 0}} //$$

b)

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x)\, x\, \Psi_0(x)\, dx = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2/L^2} dx = 0$$

$$\langle \cancel{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^*(x)\, x^2\, \Psi_0(x)\, dx = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/L^2} dx = 0$$

Do form. $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = (-1)\sqrt{\pi}\,\frac{d}{d\beta}\,\beta^{-1/2} = +\frac{1}{2}\frac{1}{\beta^{3/2}}$

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(L^2\right)^{3/2} = \frac{L^2}{2}$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) \left[-i\hbar \frac{d}{dx} \Psi_0(x)\right] dx = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/2} (-i\hbar) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\cancel{2}x}{\cancel{2}L^2}\right) e^{-x^2/L^2} dx = 0$$

$$\frac{d}{dx}\Psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/4}\left(-\frac{2x}{2L^2}\right)e^{-\cancel{x}^2/2L^2} = \frac{-x}{L^2}\Psi_0(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/4}\left(-\frac{1}{L^2}\right)\left\{e^{-x^2/2L^2} + x\left(-\frac{2x^2}{2L^2}\right)e^{-x^2/2L^2}\right\}$$

$$= -\frac{1}{L^2}\underbrace{\left(\frac{1}{\pi L^2}\right)e^{-x^2/2L^2}}_{\Psi_0(x)} + \frac{x^2}{L^4}\underbrace{\left(\frac{1}{\pi L^2}\right)^{1/4}e^{-x^2/2L^2}}_{\Psi_0(x)} = -\frac{1}{L^2}\Psi_0(x) + \frac{x^2}{L^4}\Psi_0(x)$$

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0^*(x)\left[-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\Psi_0(x)\right] = +\frac{\hbar^2}{L^2}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0^*(x)\Psi_0(x)\,dx}_{=1} - \frac{\hbar^2}{L^4}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_0^*(x)\,x^2\,\Psi_0(x)\,dx}_{\langle x^2\rangle}$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{\hbar^2}{L^2} - \frac{\hbar^2}{L^4}\cdot\left(\frac{L^2}{2}\right) = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{L^2}$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{L^2}{2}} = \boxed{\frac{L}{\sqrt{2}}}$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p^2\rangle} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2L^2}} = \boxed{\frac{\hbar}{L}\frac{1}{\sqrt{2}}}$$

$$\sigma_x\cdot\sigma_p = \frac{L}{\sqrt{2}}\cdot\frac{\hbar}{2\sqrt{L}} = \boxed{\frac{\hbar}{2}}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle x\rangle &= 0\\ \langle x^2\rangle &= \frac{L^2}{2}\\ \langle p\rangle &= 0\\ \langle p^2\rangle &= \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{L^2}\end{aligned}}$$

Q2.

região I ; $x<0$; $V(x) = V_0 > E$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) + V_0\psi_I(x) = E\psi_I(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) = \alpha^2\psi_I(x) \qquad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)$$

$$\psi_I(x) = Ae^{+\alpha x} + Be^{-\alpha x}, \quad \text{mas } \lim_{x\to-\infty}\psi(x) = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\psi_I(x) = Ae^{\alpha x}$$

- região II ; $0 \leq x \leq a$; $V(x) = 0$.

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) = K^2\psi_{II}(x) \; ; \; K = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi_{II}(x) = C\,\text{sen}\,Kx + D\cos Kx.$$

- região III , $x \geq a$, $V(x) \to \infty$.

$P(x) = 0$ (intrasponivel) $\Rightarrow \psi_{III}(x) = 0$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & x \leq 0 \text{ (região I)} \\ C\,\text{sen}\,Kx + D\cos Kx, & 0 \leq x \leq a \text{ (região II)} \\ 0, & x \geq a \text{ região III} \end{cases}$$

b) Condições de contorno

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$Ae^{\alpha 0} = C\,\text{sen}\,K.0 + D\cos K.0$$

$$A = D$$

$$\frac{d}{dx}\psi_I\Big|_{x=0} = \frac{d}{dx}\psi_{II}\Big|_{x=0}$$

$$\alpha Ae^{\alpha 0} = KC\cos K0 - KD\,\text{sen}\,K0$$

$$\alpha A = KC.$$

$$C = \frac{\alpha}{K}A$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$$

$$\frac{\alpha}{K} A \operatorname{sen} K.a + A \cos Ka = 0$$

$$\frac{\alpha}{K} A \operatorname{sen} Ka = - A \cos Ka$$

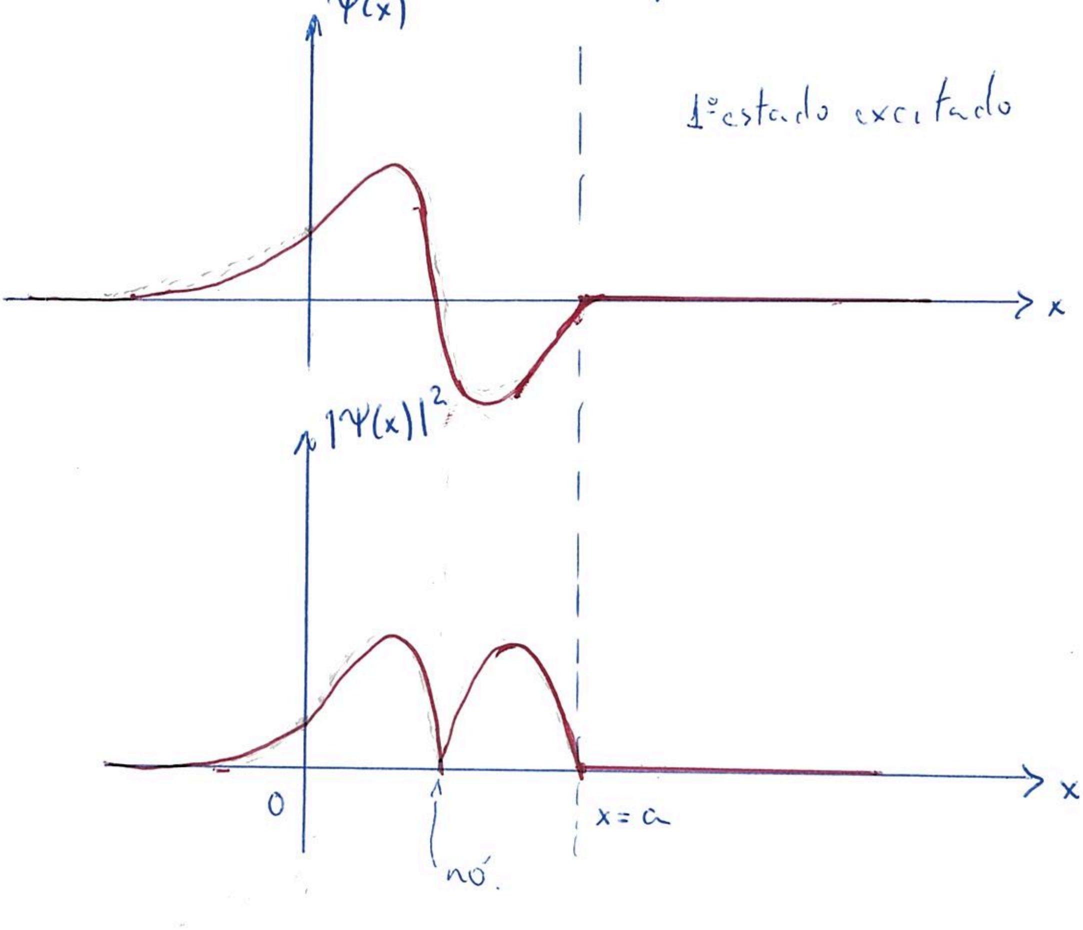
$$\frac{\operatorname{sen} Ka}{\cos Ka} = \frac{-A}{\frac{\alpha}{K} A}$$

$$tg\, Ka = -\frac{K}{\alpha}$$

$$tg \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = - \sqrt{\frac{\frac{2m}{\hbar^2} E}{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}}$$

$$\boxed{tg \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mE} = - \sqrt{\frac{E}{(V_0 - E)}}}$$

$$R = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mE} \qquad S = - \sqrt{\frac{E}{(V_0 - E)}}$$



Q3 - $R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$

a) $-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) - \left[V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R(r) = E\,R(r)$

$\frac{d}{dr}R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}}\left(-\frac{1}{a_0}\right)e^{-r/a_0}$

$r^2\frac{d}{dr}R = -\frac{2}{a_0\sqrt{a_0^3}} r^2 e^{-r/a_0}$

$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) = -\frac{2}{a_0\sqrt{a_0^3}}\left\{2re^{-r/a_0} + r^2\left(-\frac{1}{a_0}\right)e^{-r/a_0}\right\}$

$= -\frac{2r}{a_0}\left(\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-r/a_0}\right) + \frac{r^2}{a_0^2}\left(\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-r/a_0}\right)$

$= -\frac{2r}{a_0}R_{10} + \frac{r^2}{a_0^2}R_{10}$

Substituindo:

$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left\{-\frac{2r}{a_0}R_{10} + \frac{r^2}{a_0^2}R_{10}\right\} - \left[\frac{\hbar^2}{\mu a_0}\frac{1}{r} - \cancel{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}}\right]R_{10} = E R_{10}$

$l=0$, $= 0$

$+\cancel{\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r}}R_{10} - \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}R_{10} - \cancel{\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r}}R_{10} = E R_{10}$

$$\boxed{E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}}$$

b) $p_{10}(r) = R_{10}^2(r)\,r^2 = \frac{4}{a_0^3}r^2e^{-2r/a_0}$

$\int_{a_0/2}^{+\infty}\frac{4}{a_0^3}r^2e^{-2r/a_0}dr = \frac{4}{a_0^3}\int_{a_0/2}^{+\infty}r^2e^{-2r/a_0}dr$

$u = r^2 \quad du = 2r\,dr$

$dv = e^{-2r/a_0}dr \quad v = \left(-\frac{a_0}{2}\right)e^{-2r/a_0}$

$$= \frac{4}{a_0^3}\left\{\left(-\frac{a_0}{2}\right) r^2 e^{-2r/a_0}\Big|_{a_0/2}^{\infty} - \int_{a_0/2}^{\infty} 2r\left(-\frac{a_0}{2}\right) e^{-2r/a_0} dr\right\}$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\left\{+\frac{a_0^3}{8} e^{-1} + a_0 \int_{a_0/2}^{\infty} r e^{-2r/a_0} dr\right\}$$

$$u = r \qquad du = dr$$

$$dv = e^{-2r/a_0} dr \qquad v = \left(-\frac{a_0}{2}\right) e^{-2r/a_0}$$

$$= +\frac{e^{-1}}{2} + \frac{4}{a_0^2}\left\{-\frac{a_0}{2} r e^{-2r/a_0}\Big|_{a_0/2}^{\infty} + \frac{a_0}{2}\int_{a_0/2}^{\infty} e^{-2r/a_0} dr\right\}$$

$$= \frac{e^{-1}}{2} + \frac{4}{a_0^2}\left\{+\frac{a_0^2}{4} e^{-1} - \frac{a_0^2}{4}\left[0 - e^{-1}\right]\right\} =$$

$$= \frac{e^{-1}}{2} + e^{-1} + e^{-1} = \frac{5}{2} e^{-1}$$

$$\int_{a_0/2}^{+\infty} p_{10}(r)\, dr = \boxed{\frac{5}{2e}}$$