

Exercícios

AULA 16

Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico estudado nas Aulas 11 a 15 deste módulo à resolução de um conjunto de exercícios.

objetivo

- Esperamos que, após o término desta aula, você tenha consolidado os conteúdos das Aulas 11 a 15, do Módulo 2.

Pré-requisitos

Os conteúdos das Aulas 11 a 15 desta disciplina.

1. BARREIRA DE POTENCIAL (AULAS 11 E 12)

1.1. Um feixe de elétrons de 2 eV incide sobre uma barreira de potencial retangular de 4 eV de altura e 1 nm de espessura.

- (a) Qual é a probabilidade de transmissão T ?
- (b) Qual seria o valor de T para elétrons de 6eV?

RESPOSTA COMENTADA

(a) Trata-se do caso em que a energia é menor que a altura da barreira. Podemos usar a Equação (11.8) deduzida na Aula 11:

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka)}{4k^2 K^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(Ka)}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1},$$

em que $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = 7,2 \text{ nm}^{-1}$. Substituindo os valores na fórmula, obtemos $T = 2,2 \times 10^{-6}$.

(b) Agora temos a energia maior que a altura da barreira, então usamos a Equação (11.10) da Aula 11:

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)}{4k^2 k'^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k'a)}{4E(E - V_0)} \right]^{-1},$$

em que $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar = 7,2 \text{ nm}^{-1}$. Substituindo os valores na fórmula, obtemos $T = 0,83$.

1.2. Supondo que podemos ajustar a espessura da barreira do exercício 1.1.a, qual o valor da mesma para que 1 elétron, de cada 1000 incidentes, tunelasse através dela?

RESPOSTA COMENTADA

Podemos usar a Equação (11.8) da Aula 11 para obter uma expressão para a espessura a :

$$a = \frac{1}{K} \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{4E(V_0 - E)(T^{-1} - 1)}{V_0^2}} \right]$$

Usando $T = 1/1000$, $E = 2$ eV, $V_0 = 4$ eV e $K = 7,2$ nm⁻¹, obtemos $a = 0,576$ nm.

1.3. Um próton e um dêuteron (que possui duas vezes a massa do próton), ambos com uma energia cinética de 3MeV, incidem sobre uma barreira de 10fm de espessura e altura igual a 10MeV. Calcule a probabilidade de transmissão para cada uma destas partículas.

RESPOSTA COMENTADA

Usamos novamente a expressão $T = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(Ka)}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1}$.

No caso do próton, usamos $m = 1,67 \times 10^{-27}$ kg e obtemos $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = 5,8 \times 10^{14}$ m⁻¹. Substituindo na fórmula, obtemos $T = 3,1 \times 10^{-5}$. Já no caso do dêuteron, temos $K = 8,2 \times 10^{14}$ m⁻¹ e $T = 2,5 \times 10^{-7}$. Veja que, se aumentarmos a massa apenas por um fator 2, a probabilidade de tunelamento diminui por duas ordens de magnitude!

O POÇO DE POTENCIAL FINITO (AULA 13)

2.1. Um elétron está no interior de um poço quadrado de 10 eV de profundidade.

a. Se a energia do estado fundamental do elétron no poço é de 8 eV, calcule a largura do poço.

b. Repita o item anterior para o caso em que 8 eV seja a energia do primeiro estado excitado.

RESPOSTA COMENTADA

a. Usando a Equação (13.27), temos $k \tan(ka/2) = K'$, que relaciona a energia e a largura de um poço quadrado no caso de uma solução par (como a do estado fundamental). Usando as definições de k e K' , temos:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad K' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \Rightarrow \frac{K'}{k} = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} = \frac{1}{2}$$

Deste modo,

$$\tan(ka/2) = 1/2 \Rightarrow \frac{ka}{2} = 0,46 + n\pi \quad (\text{em radianos})$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$. Assim, há vários valores possíveis da largura a que satisfazem os dados do problema. No entanto, note que ainda não impusemos a condição de que este é o estado fundamental (o estado par com menor energia). Os diferentes valores possíveis de a correspondem a diferentes estados pares, todos com energia de 8 eV, mas apenas um deles deve ser o estado fundamental para o poço correspondente. Note que, quanto mais largo o poço, maior o número de estados ligados. Ou seja, se aumentarmos muito a largura do poço, certamente introduziremos estados pares com energia menor que 8 eV. Assim, o valor de n para o qual o estado em questão é o estado fundamental deve corresponder à menor largura de poço possível, ou seja, $n = 0$. Obtemos então $a = \frac{0,93}{k}$. Como

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2 \times 9,11 \times 10^{-31} \times 8 \times 1,60 \times 10^{-19}}}{1,05 \times 10^{-34}} \text{ m}^{-1} =$$

$1,45 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$, então obtemos finalmente $a = 6,4 \times 10^{-2} \text{ nm}$.

b. No caso do primeiro estado excitado, temos de usar a Equação (13.25), $k \cot(ka/2) = -K'$, que se refere a funções de onda ímpares. Repetindo o procedimento do item anterior, obtemos:

$$\cot(ka/2) = -1/2 \Rightarrow \frac{ka}{2} = 2,03 + n\pi \quad (\text{em radianos})$$

onde, novamente, $n = 0, 1, 2, \dots$. Pela mesma argumentação anterior, escolhemos $n = 0$ (estamos em busca do estado ímpar de menor energia).

Obtemos então $a = \frac{4,06}{k} = 0,28 \text{ nm}$.



A atividade a seguir é opcional, pois requer do aluno um conhecimento básico de programação.

2.2. Crie um pequeno programa de computador que calcule as energias dos estados ligados de um elétron em um poço quadrado finito.

RESPOSTA COMENTADA

Seu programa deve ter aproximadamente a seguinte estrutura:

1. Defina a massa do elétron, constante de Planck, a altura e a largura do poço.
2. Varie a energia E em passos muito pequenos desde 0 até V_0 , e calcule k e K' .
3. Em cada passo, verifique se as Equações (13.25) (para estados ímpares) ou (13.27) (para estados pares) são satisfeitas, dentro de uma certa tolerância.

O POÇO DE POTENCIAL INFINITO (AULA 14)

3.1. Faça uma estimativa da energia de ponto zero de um nêutron em um núcleo, tratando-o como se estivesse em um poço quadrado infinito de largura igual a um diâmetro nuclear de 10^{-14} m (Eisberg-Resnick, Problema 20, Capítulo 6).

RESPOSTA COMENTADA

A energia de ponto zero é a energia do estado fundamental ($n = 1$) do poço infinito: $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. Usando $a = 10^{-14}$ m e

$m = 1,67 \times 10^{-27}$ kg, obtemos $E_1 = 2,0$ MeV.

3.2. a. Para uma partícula em uma caixa, mostre que a diferença fracional de energia entre autovalores adjacentes é $\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}$.

b. Use essa fórmula para discutir o limite clássico do sistema (Eisberg-Resnick, Problema 22, Capítulo 6).

RESPOSTA COMENTADA

a. Usando a fórmula (14.12) para as auto-energias do poço infinito,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \text{ temos:}$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2}$$

b. O limite clássico é obtido para grandes números quânticos. Nesse limite, deve haver uma correspondência entre os resultados quânticos e os clássicos. Pela fórmula obtida no item anterior, no limite de grandes números quânticos ($n \rightarrow \infty$), a diferença fracional tende a zero. Ou seja, torna-se imperceptível a quantização da energia, o que está de acordo com a Mecânica Clássica, já que, para uma partícula clássica dentro de um poço, qualquer valor positivo da energia é possível.

3.3. Calcule os valores esperados $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ para o estado com $n = 3$ do poço infinito e comente sobre cada resultado.

RESPOSTA COMENTADA

A função de onda normalizada para $n = 3$ é dada pela Equação (14.10)

da Aula 14: $\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{3\pi}{a}x\right)$. Calculando os valores esperados:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^*(x) x \psi_3(x) dx = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x \cos^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) dx = 0.$$

Para qualquer autofunção do poço infinito, $|\psi(x)|^2$ é sempre uma função par, de modo que a densidade de probabilidade de encontrarmos a partícula em x é sempre igual que em $-x$. Sendo assim, o valor mais provável para a posição da partícula tem de ser em $x = 0$.

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_3(x) dx = \frac{2i\hbar}{a} \frac{3\pi}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right) dx = 0$$

A partícula tem probabilidade igual de se mover para a direita ou para a esquerda. Portanto, o momento linear médio deve ser nulo.

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^*(x) x^2 \psi_3(x) dx = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) dx = 0 = a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{18\pi^2}\right) \approx 0,077a^2$$

Com esse resultado, podemos obter a incerteza na medida da posição:

$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \approx 0,28a$, um pouco menor que a largura do poço, como deveria ser.

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi_3(x) dx = \frac{2}{a} \frac{9\pi^2 \hbar^2}{a^2} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) dx = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{a^2},$$

O valor esperado de p^2 poderia também ser obtido a partir do autovalor da energia e usando $E = p^2/2m$. A partir do valor obtido, podemos calcular a incerteza no momento: $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{3\pi\hbar}{a}$. Podemos, então, verificar o princípio da incerteza para esse estado quântico: $\Delta x \Delta p \approx 2,6\hbar > \frac{\hbar}{2}$.

O OSCILADOR HARMÔNICO (AULA 15)

4.1. A constante de força restauradora (constante de mola) k para vibrações interatômicas de uma molécula diatômica típica é de aproximadamente 10^3 J/m^2 . Use esse valor para fazer uma estimativa da energia de ponto zero das vibrações moleculares (Eisberg-Resnick, Problema 29, Capítulo 6).

RESPOSTA COMENTADA

A energia de ponto zero de um oscilador harmônico simples é dada por $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Para obtermos a frequência, precisamos estimar a massa da molécula (de forma mais rigorosa, a massa reduzida para o movimento relativo de vibração). Obviamente, essa massa varia de acordo com a molécula, mas podemos tomar cerca 10 vezes a massa do próton como uma ordem de grandeza para uma molécula formada por átomos leves. Sendo assim, a frequência é $\omega = 2,4 \times 10^{14} \text{ rad/s}$, e a energia é $\frac{1}{2}\hbar\omega = 0,08 \text{ eV}$.

4.2. a. Faça uma estimativa da diferença em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado de vibração da molécula do exercício anterior.

b. A partir dessa estimativa, determine a energia do fóton emitido quando a molécula faz uma transição entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental.

c. Determine também a frequência do fóton e compare-a com a frequência de oscilação clássica do sistema.

d. Em qual região do espectro eletromagnético está a radiação emitida?

RESPOSTA COMENTADA

a. As auto-energias do oscilador harmônico quântico são dadas pela Equação (15.20): $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Assim, a diferença de energia entre dois níveis consecutivos quaisquer, inclusive entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, é igual a $\hbar\omega$. Portanto, no caso da molécula considerada na atividade anterior, temos $\hbar\omega = 0,16$ eV.

b. A energia do fóton emitido quando a molécula faz a transição entre dois estados quânticos é precisamente a diferença de energias entre os dois estados, que calculamos no item anterior.

c. Pela relação de Einstein, a frequência do fóton é $\nu = E/h$, onde E é a sua energia, calculada no item anterior. Sendo assim, a frequência do fóton é idêntica à frequência de vibração da molécula. Podemos entender este resultado a partir do eletromagnetismo clássico. Uma molécula é composta por elétrons e núcleos, que contêm carga elétrica. Quando a molécula oscila, as oscilações de carga dão origem a ondas eletromagnéticas (fótons) de mesma frequência, de forma semelhante ao que ocorre em uma antena.

d. Usando a relação de Einstein com $E = 0,16$ eV, temos $\nu = E/h = 3,8 \times 10^{13}$ Hz ou comprimento de onda de $\lambda = c/\nu = 7,7$ μm . Esta radiação está na faixa do infravermelho. É por este motivo que a espectroscopia na região do infravermelho é uma das técnicas mais poderosas no estudo de moléculas.

4.3. Um pêndulo, constituído por uma massa de 1 kg no extremo de uma barra leve de 1 m, oscila com uma amplitude de 0,1 m. Calcule as seguintes grandezas:

- frequência de oscilação;
- energia de oscilação;
- valor aproximado do número quântico para a oscilação;
- separação entre energias possíveis adjacentes;
- separação em distância entre os máximos adjacentes na função densidade de probabilidade em torno do ponto de equilíbrio (Eisberg-Resnick, Problema 31, Capítulo 6).

RESPOSTA COMENTADA

a. A frequência do pêndulo é dada por $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{l}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{9,8 \text{ m/s}^2}{1 \text{ m}}} = 0,50 \text{ Hz}$.

b. Pela Mecânica Clássica, a energia de oscilação é dada por $E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2$ onde A é a amplitude do movimento. Usando os dados do problema, temos $E = \frac{1}{2} \times 1 \times (2\pi \times 0,50)^2 \times (0,1)^2 = 4,9 \times 10^{-2} \text{ J}$.

c. Usando a relação $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \nu$, temos $n = \frac{E_n}{h \nu} - \frac{1}{2} = \frac{4,9 \times 10^{-2}}{6,63 \times 10^{-34} \times 0,5} - \frac{1}{2} \approx 1,4 \times 10^{32}$.

Note que um sistema clássico corresponde, dentro de uma descrição quântica, a números quânticos absurdamente altos.

d. A separação entre níveis adjacentes é $\hbar \omega = 3,3 \times 10^{-34} \text{ J} = 2,5 \times 10^{-15} \text{ eV}$. Esta diferença de energias é tão pequena que é impossível de ser medida. Ou seja, é impossível afirmar, para valores tão altos do número quântico n , se o oscilador está realmente no nível n ou no nível $n + 1$.

e. O número de máximos da densidade de probabilidade para um estado do oscilador harmônico com número quântico n é igual a $n + 1$. Assim, o número de máximos é também aproximadamente igual a $1,4 \times 10^{32}$. Supondo que os máximos adjacentes estão igualmente espaçados entre si ao longo da trajetória do pêndulo, a distância entre dois máximos adjacentes é igual a $\frac{2 \times 0,1}{1,4 \times 10^{32}} \approx 1,4 \times 10^{-33} \text{ m}$. Esta é também uma distância impossível de ser medida.

INFORMAÇÃO SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, iniciaremos o Módulo 3 de nossa disciplina, que trata de sistemas quânticos em três dimensões.