Questão 01 — Gabarito — 20/02/2017

A simetria é esférica (devido às condições de contorno) e o pontencial pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\varphi(r,\theta) &= \sum_{n=0}^{\infty}\left[A_n r^n + B_n r^{-(n+1)}\right] P_n(\cos\theta) = \\ &= A_0 + A_1 r\cos\theta + \sum_{n=2}^{\infty} A_n r^n P_n(\cos\theta) + \\ &\quad + \frac{B_1}{r} + \frac{B_2}{r^2}\cos\theta + \sum_{n=2}^{\infty}\frac{B_n}{r^{n+1}} P_n(\cos\theta)\,.\end{aligned}$$

A condição de contorno no infinito diz que $\varphi(\infty,\theta) = -E_0 r\cos\theta$, de modo que devemos anular todos os termos do tipo r^k com $k \geq 2$. Além disso, $A_1 = -E_0$. Ficamos então com

$$\varphi(r,\theta) = A_0 - E_0 r\cos\theta + \frac{B_1}{r} + \frac{B_2}{r^2}\cos\theta + \sum_{n=2}^{\infty}\frac{B_n}{r^{n+1}} P_n(\cos\theta)\,.$$

0,5

Note agora que a esfera está carregada, de modo que o termo B_1/r não pode se anular e, ainda por cima, deve dar o resultado $B_1 = Q/4\pi\varepsilon_0$, já que sobre a superfície da esfera devemos ter um potencial

$$\varphi(a,\theta) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 a}.$$

0.5

Assim, a condição de contorno sobre a superfície da esfera fica ($A_0 = 0$)

$$\varphi(a,\theta) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 a} + \left(\frac{B_2}{a^2} - E_0 a\right)\cos\theta + \sum_{n=2}^{\infty}\frac{B_n}{a^{n+1}} P_n(\cos\theta) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 a},$$

ou seja

0.5

$$\left(\frac{B_2}{a^2} - E_0 a\right)\cos\theta + \sum_{n=2}^{\infty}\frac{B_n}{a^{n+1}} P_n(\cos\theta) = 0,$$

para *qualquer* θ. Como os polinômios de Legendre são linearmente independentes, devemos ter que cada coeficiente de $P_n(\cos\theta)$ acima (incluindo o $\cos\theta = P_1(\cos\theta)$) deve anular-se. Assim, ficamos com

$$B_2 = E_0 a^3 \text{ e } B_n = 0 \text{ se } n \geq 2.$$

O potencial fica, portanto,

$$\varphi(a,\theta) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r} + \left(\frac{E_0 a^3}{r^2} - E_0 r\right)\cos\theta$$

1.0

PROVA N^{O} 1

Seja uma esfera condutora, aterrada, de raio *a*, circundada por um anel fino concêntrico, com densidade linear de carga λ e raio *d* > *a*.

Tomando λ constante calcule o potencial sobre o eixo de simetria desse sistema.

Resposta: Usando o método das imagens para cada elemento de carga do anel, teremos

$$d\Phi = \frac{\lambda d(d\vartheta)}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{(z^2 + d^2 - 2zd\cos\theta)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{(a^2 + \frac{z^2 d^2}{a^2} - 2zd\cos\theta)^{\frac{1}{2}}}\right]$$

No eixo de simetria (z) o ângulo θ entre *z* e *d*, é $\frac{\pi}{2}$. Integrando em ϑ teremos

$$\Phi(z) = \frac{\lambda d}{2\varepsilon_0}\left[\frac{1}{\left(z^2 + d^2\right)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\left(a^2 + \frac{z^2 d^2}{a^2}\right)^{\frac{1}{2}}}\right].$$

Programa de Pós-Graduação em Física

GABARITO

Questão 3 (2,5 pontos)

a) (0,5 ponto) Um átomo de hidrogênio irradia e seu elétron faz uma transição do orbital 3p para o 1s. Encontre a energia irradiada em unidades de elétron-volt (eV).

b) (0,8 ponto) Considere que a seguinte hamiltoniana é usada para descrever um átomo de hidrogênio:

$$H = -\frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\,, \tag{1}$$

em que μ é a massa reduzida do sistema e a constante e é o módulo da carga do elétron. Sejam os estados associados aos orbitais 3p e 1s respectivamente descritos por $|\psi_{3p}\rangle$ e $|\psi_{1s}\rangle$.

Expresse a probabilidade de transição espontânea do estado $|\psi_{3p}\rangle$, num instante t_0, para o estado $|\psi_{1s}\rangle$ num instante t_1, e em seguida encontre seu valor. Justifique sua resposta e interprete seu resultado.

c) (1,2 pontos) A partir da equação de Schroedinger, mostre que os autoestados da Hamiltoniana da eq. (1) podem ser escritos em coordenadas esféricas na seguinte forma:

$$\psi_{k,l,m}(\vec{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)\,. \tag{2}$$

Mostre ainda que a energia do sistema para a hamiltoniana dada não pode depender do número quântico m.

RESPOSTA:

a) Sabemos que,

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}.$$

A energia do orbital 3p é E_3 e a do orbital 1s é E_1, logo a energia irradiada E_γ é

$$E_\gamma = |E_3 - E_1| = 13,6 \text{ eV} - \frac{13,6 \text{ eV}}{9} = 12,1 \text{ eV}\,.$$

b) Os estados $|\psi_{3p}\rangle$ e $|\psi_{1s}\rangle$ são autoestados da hamiltoniana dada e estão associados a diferentes valores de energia, portanto transições espontâneas entre esses estados não podem ocorrer. A probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\psi_{1s}\rangle$ dado que antes ele estava em $|\psi_{3d}\rangle$ é

$$P_{3d\to 1s} = |\langle\psi_{3d}|\psi_{1s}\rangle|^2 = 0\,.$$

A última passagem foi obtida usando que esses estados estão associados a autovalores diferentes da hamiltoniana e portanto são ortogonais.

Sabemos que a emissão espontânea de radiação de um átomo de hidrogênio real pode ocorrer, a hamiltoniana da eq. (1) é uma aproximação que não permite essa transição espontânea.

c) A equação de Schroedinger independente do tempo para este sistema é

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

Seja $\psi(\vec{r}) = R(r)f(\theta,\phi)$, e considere a seguinte notação para separar a parte angular da parte radial do Laplaciano: $\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2}\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\phi}^2$, em que nenhuma dependência radial encontra-se em $\nabla_{\theta,\phi}^2$. Portanto,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\nabla_r^2 R}{R} - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\nabla_{\theta,\phi}^2 f}{f} - \frac{e^2}{r} = E$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\nabla_r^2 R}{R} - e^2 r - Er^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\nabla_{\theta,\phi}^2 f}{f}.$$

O lado esquerdo da equação acima só depende da parte radial, e o lado direito só da parte angular. Consequentemente, existe constante c tal que,

$$\nabla_{\theta,\phi}^2 f = c\frac{2\mu}{\hbar^2}f.$$

Ou seja, trata-se de um problema de autovetor e autovalor para a parte angular do Laplaciano, cuja solução é $\nabla_{\theta,\phi}^2 Y_l^m = l(l+1)Y_l^m$. Logo $f \propto Y_l^m$ e

$$c\frac{2\mu}{\hbar^2} = l(l+1).$$

Substituindo os resultados acima na equação para a parte radial, vem

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\nabla_r^2 R}{R} - e^2 r - Er^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}l(l+1).$$

Da equação acima, vê-se que $R(r)$ e E são independentes de m e podemos escrever

$$\psi_{k,l,m}(\vec{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\phi).$$

Processo Seletivo PPGFIS - 2017/01

Questão 4 - Mecânica Quântica

(a) Solução: Densidade de Probabilidade Radial $\rightarrow \mathrm{P}_{21}(r) = r^2|R_{21}(r)|^2$

Logo, $P_{21}(r) = \dfrac{r^4}{24a_0^5}e^{\frac{-r}{a_0}}$

Condição de máxima $P_{21}(r)$:

$$\left.\frac{dP_{21}(r)}{dr}\right|_{r_{max}} = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{24a_0^5}\right)\left.\left(4r^3e^{\frac{-r}{a_0}} + r^4\left(\frac{-1}{a_0}\right)e^{\frac{-r}{a_0}}\right)\right|_{r_{max}} = 0$$

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

Logo, ou $r_{max} = 0$, descartado $\rightarrow$ mínimo;
ou $r_{max} = 4a_0$

Resposta:
$\boxed{r_{max} = 4a_0}$, $\rightarrow$ Valor mais provável de r.

(b) Solução:
Valor esperado de r para o estado:
$\langle r\rangle_{21} = \int_0^\infty rP_{21}(r)dr$

$$\Rightarrow \frac{1}{24a_0^5}\int_0^\infty r^5e^{\frac{-r}{a_0}dr}$$

Fazendo a mudança de variáveis $u = \dfrac{r}{a_0}$
e, usando $\int_0^\infty x^ne^{-x}dx = n!$, obtem-se:
$\langle r\rangle_{21} = 5a_0$

Resposta:
$\boxed{\langle r\rangle_{21} = 5a_0}$, $\rightarrow$ Valor médio das medidas de r.
Comparando o resultado dos ítens a) e b), concluímos que são diferentes porque, nesse caso, a densidade de probabilidade é assimétrica em torno de seu máximo