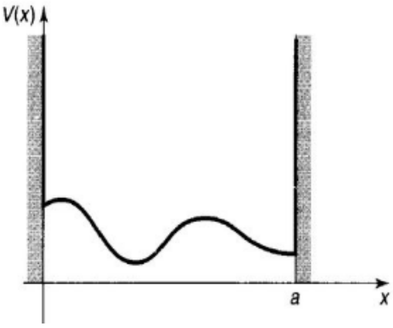
Aproximação WKB

Exercício 2 - Utilizar a **aproximação WKB** para calcular os níveis de energia dos **estados s** de um **elétron preso a um núcleo** de carga Z|e|.

Considerando que o elétron está em um poço de potencial infinito com duas paredes rígidas:



Dentro do poço, supondo E>V(x), a solução geral da equação de Schrödinger:

$$\Psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{P(x)}} e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p dx}$$

De outra forma,

$\Psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\ [\ C1sen\phi(x) + C2cos\phi(x)]$ onde $\phi(x) = \frac{1}{\hbar}\int_0^a p(x)dx$

Impondo as condições de contorno

$\Psi(0)$ = 0 → ϕ (0)=0 → C2 = 0

$\Psi(a)$ = 0 → ϕ (a)=nπ (n=1, 2, 3,...)

Portanto, a regra de quantização para poços potenciais com duas paredes rígidas é dada por:

$$\int_0^a p(x)dx = n\pi\hbar$$

O campo coulombiano do núcleo Ze:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Como o elétron está ligado ao núcleo, ele pode ser visto como se movendo entre duas paredes rígidas com energia E= V(a) onde

$$a = -\frac{Ze^2}{E}$$

Os níveis de energia dos estados s podem ser obtidos

$$\int_0^a \sqrt{2m\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)}\, dr = n\pi\hbar$$

Colocando E em evidencia

$$\int_0^a \sqrt{2m\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)}\, dr = \int_0^a \sqrt{2mE\left(1 - \frac{a}{r}\right)}\, dr = \int_0^a \sqrt{-2mE\left(\frac{a}{r} - 1\right)}\, dr = \sqrt{-2mE}\int_0^a \sqrt{\frac{a}{r} - 1}\ dr$$

Mudando de variável $x = \frac{a}{r}$

$$= a\sqrt{-2mE}\int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1}\ dx$$

Como

$$\int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1}\ dx = \frac{\pi}{2}$$

Então,

$$a\sqrt{-2mE}\int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1}\ dx = \frac{\pi}{2} a\sqrt{-2mE}$$

Como $E = \frac{Ze^2}{a}$

$$\frac{\pi}{2} a\sqrt{-2mE} = -\pi Z e^2 \sqrt{-\frac{m}{2E}}$$

Isolando E

$$-\pi Z e^2 \sqrt{-\frac{m}{2E}} = n\pi\hbar$$

$$\sqrt{-\frac{m}{2E}} = \frac{-n\hbar}{Ze^2}$$

$$\left(\sqrt{-\frac{m}{2E}}\right)^2 = \left(\frac{-n\hbar}{Ze^2}\right)^2$$

$$-\frac{m}{2E} = \frac{n^2\hbar^2}{Z^2e^4}$$

$$En = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

De outra forma,

$$En = -\frac{Z^2 e^2}{2a0}\frac{1}{n^2}$$

onde $a0 = \frac{ħ^2}{m_{e^2}}$é o raio de Bohr.

Esta é a expressão para os níveis de energia dos estados s do elétron submetido a um poço potencial com duas paredes rígidas.