

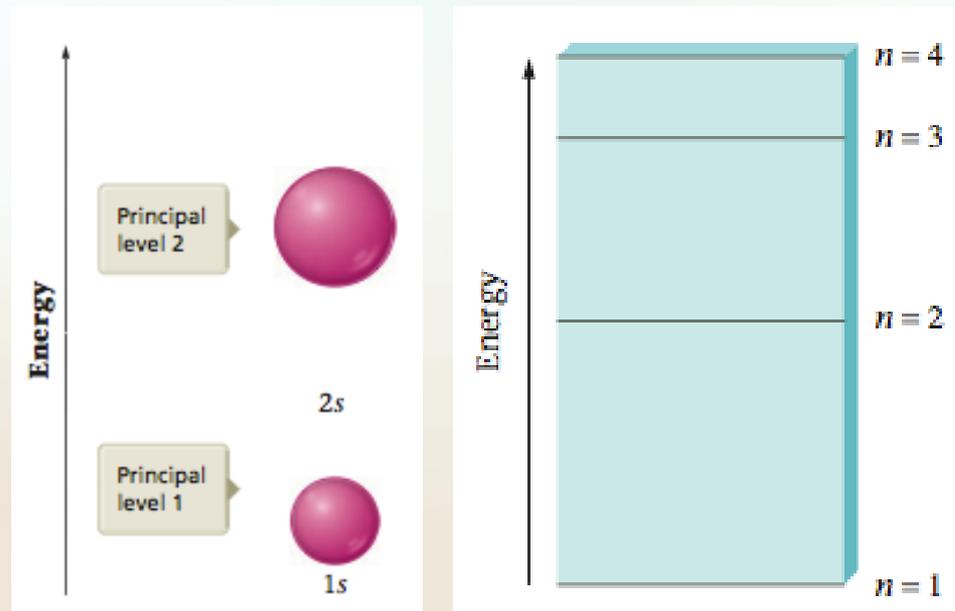
Aproximação WKB

Exercício 2

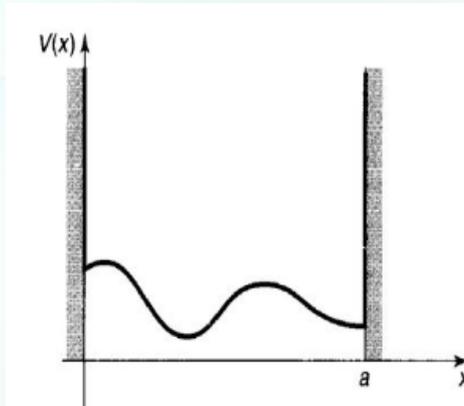
Aluno: Elsa B Pimenta RA: 261868

Prof. Dr Marco Aurélio Pinheiro Lima

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,

$$\Psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{p(x)}} [C_1 \text{sen}\phi(x) + C_2 \text{cos}\phi(x)] \quad \text{onde}$$

$$\phi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_0^x p(x) dx$$

Impondo as condições de contorno

$$\Psi(0) = 0 \rightarrow \phi(0) = 0 \rightarrow C_2 = 0$$

$$\Psi(a) = 0 \rightarrow \phi(a) = n\pi \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

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

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

momento

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

Calculado no slide anterior

Colocando E em evidencia

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

Mudando de variável $x = \frac{a}{r}$

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

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

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

Isolando E

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

Isolando E

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

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

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

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

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad \text{ou} \quad E_n = -\frac{Z^2e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}$$

onde $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ é o raio de Bohr.

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

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

ou

$$E_n = -\frac{Z^2e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}$$