Lista de problemas 1
Interações Atômicas e Moleculares 2018.1

Problema 1 Considere que a função de onda de um elétron confinado em uma caixa unidimensional de comprimento L seja dada por:

$$\psi(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right); \ -L/2 \leq x \leq +L/2$$
$$\psi(x) = 0, \qquad |x| \ > \ L/2$$

a) Essa função de onda é de quadrado integrável?

b) Essa função de onda é normalizada?

c) Em caso negativo, normalize-a.

d) Qual a probabilidade de encontrar o elétron nos seguintes intervalos: $-L/2 \leq x \leq 0$, $0 \leq x \leq L/2$, $-L/4 \ \leq x \leq +L/4$?

Problema 2 Dada a seguinte função de onda $\Psi(x,t)$ para uma partícula quântica confinada no intervalo $x \in (0,2)$

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\big(\frac{n\pi x}{2}\big)e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Usando a condição inicial (em $t = 0$)

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \in (0,1) \\ A, & \text{se } x \in (1,2) \end{cases}$$

a) Determine o valor da constante $A > 0$. Dica: use a condição de normalização $\int_0^2 |\Psi(x,0)|^2 dx = 1$. **b)** Determine o valor da constante C_n. **c)** Qual é a interpretação física da quantidade $|C_n|^2$.

Problema 3 A constante de força do $^{79}Br^{79}Br$ é 240 $N.m^{-1}$. Calcule a frequência vibracional fundamental para a energia de ponto zero do $^{79}Br^{79}Br$, considerando um OHS.

Problema 4 Considere uma molécula de HI vibrando como um átomo de I imóvel e um átomo de H que oscila aproximando-se e afastando-se do átomo de I. Sendo a constante de força de ligação do HI igual a 314 $N.m^{-1}$, calcule (a) a frequência de vibração da molécula e (b) o comprimento de onda necessário para excitar a molécula para a vibração.

Problema 5

a) Em um oscilador harmônico clássico, a partícula não pode ir além dos pontos em que a energia total é igual à energia potencial. Classicamente, esses pontos são conhecidos como pontos de retorno. Considere agora uma partícula que possui a energia do estado fundamental do oscilador harmônico quântico. Determine os pontos de retorno clássico para essa partícula.

b) No caso quântico, indique como poderia ser obtida a probabilidade de encontrar a partícula na região proibida classicamente.

Problema 6 A energia E dos orbitais s ($l = 0$) do átomo de hidrogênio pode ser obtida usando a seguinte equação diferencial para a parte radial $U(r)$:

$$E = -\frac{a\,e^2}{8\pi\varepsilon_0\,U(r)}\Big[U''(r) + \frac{2\,U(r)}{a\,r}\Big].$$

Usando a função radial dada por

$$U(r) = r\,e^{-r/a}, \tag{1}$$

determine o valor da energia E. Dica: substitua a função radial dada $U(r) = r\,e^{-r/a}$ na equação diferencial acima. Você precisará calcular a derivada de segunda ordem $U''(r)$.

Problema 7 Dada a função de onda $\Psi(r)$ do estado fundamental do átomo de hidrogênio:

$\Psi(r) = C\, e^{-r/a}$, onde a é o raio de Bohr e C é uma constante real positiva.

a) Usando a condição de normalização da função de onda

$$\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, |\Psi|^2 r^2 \sin\theta = 1,$$

determine a constante C. Dica: $\int_0^\infty dr\, r^2\, e^{-\lambda r} = 2/\lambda^3$.

b) Usando essa função de onda $\Psi(r)$ determine o valor médio $\langle V(r) \rangle$, do potencial eletrostático: $V(r) = e^2/(4\pi\varepsilon_0\, r)$. Dica: $\int_0^\infty dr\, r\, e^{-\lambda r} = 1/\lambda^2$.

Problema 8 Para $l = 2$, (a) qual é o menor valor possível de $< L_x^2 + L_y^2 >$? (b) Qual é o maior valor de $< L_x^2 + L_y^2 >$? (c) Qual é o valor de $< L_x^2 + L_y^2 >$ para $m = 1$? É possível determinar o valor de L_x ou L_y a partir destes dados? Qual é o **menor** valor possível para n?

Problema 9 Dê a degenerescência dos níveis no átomo de hidrogênio que tem a energia $-hcR_H$, onde R_H é a constante de Rydberg.