Interações Atômicas e Moleculares Pré-Lista: Respostas

Problema 1

a) sim, por ser diferente de zero e finita apenas em uma faixa finita.
b) não, por que $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)\, dx \neq 1$
c) chamando $\psi_{\text{norm}}(x) = A \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$
normalizar: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{\text{norm}}(x)\psi_{\text{norm}}(x)\, dx = 1$
$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{\text{norm}}(x)\psi_{\text{norm}}(x)\, dx = \int_{-L/2}^{L/2} A^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\, dx = A^2 \cdot \langle \frac{L}{2\pi}\left[\frac{\pi x}{L} + \frac{1}{2} \cdot \text{sen}\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right]\rangle_{-L/2}^{L/2}$
$= A^2 \cdot \frac{L}{2} = 1$
$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$
$\Rightarrow \psi_{\text{norm}}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$
d) $P_{(a,\ b)} = \int_a^b \psi^*_{\text{norm}}(x)\psi_{\text{norm}}(x)\, dx = \frac{2}{L} \cdot \langle \frac{L}{2\pi}\left[\frac{\pi x}{L} + \frac{1}{2} \cdot \text{sen}\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right]\rangle_a^b$
$-L/2 \leq x \leq 0$: $P_{(-L/2,\ 0)} = 0.5$
$0 \leq x \leq L/2$: $P_{(0,\ L/2)} = 0.5 = 1 - P_{(-L/2,\ 0)}$
$-L/4 \leq x \leq L/4$: $P_{(-L/4,\ L/4)} = 0.818$

Problema 2

a) $1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x,0)\, dx = \int_1^2 A^2 dx = A^2 \Rightarrow A = 1$
b) Fora do escopo da disciplina. mas vamos lá:
$t = 0 \Rightarrow$ as partes $e^{-iE_n t/\hbar}$ dos termos são 1.
$\Rightarrow$ Resolver $\Psi(x,0) = \Sigma\, C_n \cdot \text{sen}\frac{n\pi x}{2}$, que é justamente uma soma tipo "série de Fourier"
$\Rightarrow$ C_n são os coeficientes da série de Fourier de $\Psi(x,0)$, mas ainda é preciso levar em conta, que as funções de base, $\text{sen}\frac{n\pi x}{2}$ têm período 4 (e não 2; o intervalo (0, 2) é onde se encaixa um múltiplo da *metade* do comprimento de onda)
$\Rightarrow$ Temos que completar a função entre $x = -2$ e $x = 0$.
Chamamos esta nova função de $f(x)$
Para que a série contenha apenas senos (e nenhum cosseno), $f(x)$ tem que ser impar, $f(-x) = -f(x)$
$\Rightarrow f(x) = -A$ se $x \in (-2,-1)$, 0 se $x \in (-1,1)$, A se x $x \in (1,2)$
Agora podemos fazer a transformação de Fourier:
$C_n = \frac{2}{4}\int_{-2}^{2} f(x) \cdot \text{sen}\frac{n\pi x}{2}\, dx = \frac{1}{2}\left[\int_{-2}^{-1}(-A) \cdot \text{sen}\frac{n\pi x}{2}\, dx + \int_{-1}^{1} 0 \cdot \text{sen}\frac{n\pi x}{2}\, dx + \int_1^2 A \cdot \text{sen}\frac{n\pi x}{2}\, dx\right]$
$= \frac{A}{2}\left[-\int_{-2}^{-1}\text{sen}\frac{n\pi x}{2}\, dx + \int_1^2 \text{sen}\frac{n\pi x}{2}\, dx\right] = \frac{A}{2}\left[\langle -\frac{2}{n\pi} \cdot \cos\frac{n\pi x}{2}\rangle_1^2 - \langle -\frac{2}{n\pi} \cdot \cos\frac{n\pi x}{2}\rangle_{-2}^{-1}\right]$
$= -\frac{A}{n\pi}\left[\cos\frac{2n\pi}{2} - \cos\frac{n\pi}{2} - \cos\frac{-n\pi}{2} + \cos\frac{-2n\pi}{2}\right]$
$= -\left[(-1)^n - (-1)^{n/2}\right] \cdot \frac{2A}{n\pi}$ para n par
$-(-1)^n \cdot \frac{2A}{n\pi}$ para n impar
c) A probabilidade, de a partícula estar no estado Ψ_n (correspondendo à energia E_n)

Problema 3
$\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar} = \frac{1}{2}\omega = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$,
onde μ é a massa reduzida $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2} = \frac{1}{2}m_{\mathrm{Br-79}}$ (já que são dois átomos de Br-79)
$\Rightarrow \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{2m_{\mathrm{Br-79}}}} = 3.026 \cdot 10^{13}$ Hz $= 30.26$ THz
ou $\nu_0 = \omega_0/2\pi = 4.82 \cdot 10^{12}$ Hz $= 4.82$ THz
Caso alguém esqueceu de usar a massa reduzida e chegou em $\omega_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{m_{\mathrm{Br-79}}}}$
$\Rightarrow \omega_0 = 2.14 \cdot 10^{13}$ Hz $= 21.4$ THz ou $\nu_0 = 3.4 \cdot 10^{12}$ Hz $= 3.4$ THz também é aceito

Problema 4
a) $\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar} = \frac{1}{2}\omega = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{m_{\mathrm{H}}}} = 2.17 \cdot 10^{14}$ Hz ou $\nu_0 = 3.45 \cdot 10^{13}$ Hz
b) $\lambda = \frac{ch}{\Delta E} = \frac{ch}{2E_0} = 4.35\ \mu$m

Problema 5
a) $x = \pm A$, onde $A = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}} = \hbar^{1/2}(mk)^{-1/4}$,
dependo de quais duas das grandezas m, k e ω são dadas.
b) integrando o quadrado da função de onda de $-\infty$ a $-A$ e de A a ∞.

Problema 6
$U'(r) = 1 \cdot e^{-r/a} - \frac{r}{a} \cdot e^{-r/a} = (1 - \frac{r}{a}) \cdot e^{-r/a}$
$$U''(r) = -\frac{1}{a} \cdot e^{-r/a} + (1 - \frac{r}{a}) \cdot (-\frac{1}{a}) \cdot e^{-r/a} = (-\frac{2}{a} + \frac{r}{a^2}) \cdot e^{-r/a} = (-\frac{2}{ar} + \frac{1}{a^2}) \cdot re^{-r/a}$$
$$= (-\frac{2}{ar} + \frac{1}{a^2}) \cdot U(r)$$
$$\Rightarrow E = \frac{ae^2}{8\pi\varepsilon_0 U(r)} \cdot \left[(-\frac{2}{ar} + \frac{1}{a^2}) \cdot U(r) + \frac{2U(r)}{ar}\right] = \frac{ae^2}{8\pi\varepsilon_0 U(r)} \cdot \frac{U(r)}{a^2}$$
$$= \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a}$$

Problema 7
a) $$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi|^2 r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\phi\, d\theta\, dr = \int_0^\infty \int_0^\pi \left(|\Psi|^2 r^2 \operatorname{sen}\theta \int_0^{2\pi} d\phi\right) d\theta\, dr$$
$$= \int_0^\infty \int_0^\pi \left(|\Psi|^2 r^2 \operatorname{sen}\theta \cdot 2\pi\right) d\theta\, dr = \int_0^\infty \left(\int_0^\pi 2\pi|\Psi|^2 r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta\right) dr$$
$$= \int_0^\infty \left(2\pi|\Psi|^2 r^2 \int_0^\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta\right) dr = \int_0^\infty \left(2\pi|\Psi|^2 r^2 \langle -\cos\theta\rangle_0^\pi\right) dr$$
$$= \int_0^\infty \left(2\pi|\Psi|^2 r^2 \cdot 2\right) dr = 4\pi \cdot \int_0^\infty |\Psi|^2 r^2\, dr = 4\pi \cdot \int_0^\infty |Ce^{-r/a}|^2 r^2\, dr$$
$$= 4\pi C^2 \cdot \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a}\, dr = 4\pi C^2 \cdot \frac{2}{(2/a)^3} = \pi C^2 a^3 = 1, \text{ onde usamos } \lambda = \frac{2}{a}$$
$\Rightarrow C = \pi^{-1/2} a^{-3/2}$
b) $$\langle V(r)\rangle = \int_0^\infty P(r)V(r)\, dr = \int_0^\infty 4\pi C^2 r^2 e^{-2r/a} V(r)\, dr = \int_0^\infty 4\pi C^2 r^2 e^{-2r/a} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\, dr$$
$$= 4\pi C^2 \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty re^{-2r/a}\, dr = \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 a^3} \int_0^\infty re^{-2r/a}\, dr = \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 a^3} \cdot \frac{a^2}{4}$$
$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}, \qquad \text{onde usamos de novo } \lambda = \frac{2}{a}$$

Problema 8
a) $\langle L_x^2 + L_y^2\rangle_{\min} = L^2 - |L_z^2|_{\max} = l(l+1)\hbar^2 - l^2\hbar^2 = l\hbar^2 = 2\hbar^2$
b) $\langle L_x^2 + L_y^2\rangle_{\max} = L^2 - |L_z^2|_{\min} = l(l+1)\hbar^2 - 0 = l(l+1)\hbar^2 = 6\hbar^2$
c) $\langle L_x^2 + L_y^2\rangle = L^2 - L_z^2 = l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 = (l(l+1) - m^2)\hbar^2 = 5\hbar^2$
Não é possível determinar L_x ou L_y
$n_{\min} = l + 1 = 3$

Problema 9
$E = E_0 \Rightarrow n = 1$
$\Rightarrow l = 0$, $m_l = 0$
$\Rightarrow$ Há apenas um estado orbital n, l, m_l,
mas dois estados de spin $m_s = \pm\frac{1}{2}$
$\Rightarrow$ Degenerescência 2