CCNH
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E HUMANAS
Universidade Federal do ABC

Lista de exercícios

Estados quânticos e função de onda.

1- No começo do século XX, os cientistas desenvolveram uma teoria capaz de descrever a dinâmica de sistemas na escala atômica. Essa teoria, conhecida como mecânicaquântica, obteve grande sucesso na descrição dos átomos e das ligações entre átomos que formam moléculas e sólidos. Julgue os itens a seguir, relacionados à mecânicaquântica e a alguns de seus resultados, e assinale com V (verdadeiro) ou F (falso) as afirmações abaixo:

( ) De acordo com o modelo mecânico-ondulatório, as posições que os elétrons em um átomo podem assumir são descritas por uma funçãodistribuição (ou densidade) de probabilidade;

( ) Segundo a mecânicaquântica, uma partícula em um poço de potencial infinito não pode ter energia total nula;

( ) O espectro discreto de energias do átomo de hidrogênio possui uma quantidade definida de níveis de energia, cuja energia depende inversamente do númeroquântico principal n;

( ) Em uma mesma camada, e na ausência de campos elétricos ou magnéticos externos, os níveis de energia do átomo de hidrogêniosão sempre degenerados.

2- Analise as afirmações acerca da teoria quântica:

I. A teoria quântica coloca em xeque a precisão rigorosa e o determinismo característicos da físicaclássica de Newton;

II. A teoria quântica é limitada ao mundo do infinitamente pequeno, segundo Erwin Schrödinger;

III. O Princípio da Incerteza, formulado em 1927 por Werner Heisenberg, afirma ser impossível medir com precisão, no mesmo instante, a posição e a velocidade de uma partícula.

Dentre elas, quais são corretas?

3- Na Mecânica Quântica os observáveis (medidas experimentais) de um sistema não são diretamente descritos pelo estado quântico.
   a. O que são operadores quânticos?
   b. Como eles são usados e qual a sua importância na Mecânica Quântica?
   c. Descreva os principais operadores usados em MecânicaQuântica, e para que eles são utilizados.

4- Na mecânica quântica o estado de um sistema determina tudo o que podemos conhecer sobre o sistema quântico.
   a. Explique o significado físico da função de onda e da função densidade de probabilidade.

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

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

   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: $-L/2 \leq x \leq 0$, $0 \leq x \leq L/2$, $-L/4 \leq x \leq +L/4$?

6- Uma partícula que vive em uma dimensão espacial tem a função de onda

$$\psi(x) = Ax \exp\left(ikx - b\frac{|x|}{2}\right)$$

onde A, k e b são parâmetros reais (b < 0). (a) Normalizar a função de onda dessa partícula, assim achar A como função de outros parâmetros. (b) Achar o valor esperado da coordenada x dessa partícula (como função de k e b).

Oscilador Harmônico

7- 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
   b. O comprimento de onda necessário para excitar a molécula para a vibração.

8- 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 uma partícula que possui a energia do estado fundamental do oscilador harmônico quântico.

   a. 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.

9- A energia do oscilador harmônico linear é dada por

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

em que m é a massa da partícula em movimento harmônico simples e ω é a freqüência da oscilação. (a) Deduza e mostre a expressão para a energia média $\langle E \rangle$. (Dica: para o oscilador harmônico $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$). (b) mostre que a energia mínima do oscilador é $\frac{1}{2}\hbar\omega$, chamada energia do ponto zero. (Dica: encontre os mínimos da energia em relação a $\langle x^2 \rangle$)

Átomo de Hidrogênio

10- Explique, a partir dos números quânticos do átomo de Hidrogênio, por que a subcamada *s* pode possuir no máximo 2 elétrons, a subcamada *p* no máximo 6, e a subcamada *d* no máximo 10.

11- Explique o que é um orbital atômico, dizendo como este conceito surge na mecânica quântica desenvolvida por Schrödinger.

12- Considere o átomo de hidrogênio no estado excitado, com um elétron no orbital 5p. Liste todos os conjuntos possíveis de números quânticos (n, l, m, m_s) para esse elétron;
Os conjuntos de números quânticos possíveis para um elétron em um orbital 5p são tais que:

13- A Para o átomo de hidrogênio, quantos estados quânticos possíveis correspondem ao número quântico principal n = 3? Qual é o valor das energias associadas a estes estados?

14- Escreva a função onda espacial do átomo de Hidrogênio correspondem ao estado energético com n=2, l=1 e m=0

15- A Determine o número total de estados em que podemos colocar um elétron para a camada n = 3.

16- Qual o significado físico da quantidade conhecida como densidade de probabilidade radial P(r)

17- Quantos valores pode ter a componente z do momento angular por causa do elétron girando ao redor do núcleo atômico.

18- A função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio é dada por

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

A partir desta equação, qual é o diâmetro do átomo de hidrogênio?

19- As soluções do átomo de hidrogênio são caracterizadas por três números quânticos inteiros, cujos símbolos e denominações são, n – número quântico principal; l – número quântico azimutal; m – número quântico magnético. Escreva o significado físico destes 3 números quânticos.

20- Sendo a região espacia l$x \in [-2,2]$, quantos nodos têm a função de onda unidimensional dada por

$$\Psi(x) = \frac{\sin(2\pi x)}{x}$$

21- Para o estado excitado para n=2, l=0 e m=0:

$$\psi_{200} = C_{200}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

(a) Mostre que a constante de normalização e dada por:

$$C_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$$

(b) Calcule a densidade de probabilidade $P(r)$ no ponto r=a_0.

22- Qual é o momento angular orbital (na forma de múltiplos de $\hbar$) dos orbitais (a) $1s$; (b) $3s$; (c) $3d$; (d) $2p$; (e) $3p$? Dê os números de nós angulares e radiais em cada caso. (f) Qual é o elemento químico que possui a configuração (g) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$e (h) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$.

23- *Escreva os valores possíveis da componente zdo momento angular orbital (a) de um elétron d; (b) de um elétron f.*

24- Escreva a configuração eletrônica para o estado fundamental do elemento Ti.

25- Explique porquê a energia de um elétron do orbital 4*s* (n=4) é menor que a energia de um elétron no orbital 3*d* (n=3), sendo que no primeiro caso o valor do número quanto n é maior.

26- Os elétrons no hidrogênio são descritos por quatro números, n, l, m e m_s. Quais restrições (se houver) existem nesses quatro números?

27- Mostre qual é a distância, *r*, mais provável entre o elétron e o núcleo no átomo de hidrogênio no estado n = 3, l = 2 e m = 0. Nota: nesse estado a função de onda para o átomo de H é

$$\psi_{320} = C_{320} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/3a_0} \left(3\cos^2\theta \ - 1 \right)$$

com

$$C_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$$

28- Para o estado fundamental do átomo de hidrogênio, a função de onda é

$$\psi_{100} = C_{100} e^{-Zr/a_0}$$

com

$$C_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2},$$

onde a_0 é o raio atômico de Bohr.Determine a probabilidade de encontrar o elétron em um intervalo $\Delta r = 0.03a_0$ com centro em$r = a_0$.