

Estrutura da Matéria II

Lista de exercícios - 05

(11 de novembro de 2020)

1. Mostre que a equação de Schrödinger para duas partículas de massas m_1 e m_2 , em interação coulombiana,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_T \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

onde os índices 1 e 2 se referem às coordenadas das partículas de massas m_1 e m_2 , pode ser escrita como

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) + \frac{1}{\chi(\vec{R})} \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 \right] \chi(\vec{R}) = E_T$$

sendo $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$, $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M}$ e $M = m_1 + m_2$.

2. O estado de um elétron em um átomo de hidrogênio pode ser caracterizado pelos números quânticos $n = 2$, $l = 1$ e $m = 1$, ou pela correspondente função de onda em coordenadas esféricas,

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{21}(r) P_1^1(\theta) e^{i\phi}$$

onde $R_{21}(r) = r e^{-r/(2a_B)}$, $P_1^1(\theta) = \sin \theta$, e $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ é o raio de Bohr.

- a) Esboce o gráfico da distribuição radial de probabilidades, indicando o valor de r que determina o máximo da distribuição; $(4a_B)$
 b) Esboce o gráfico polar da parte angular em θ da função de onda.

3. O elétron em um átomo de hidrogênio encontra-se em seu estado fundamental,

$$\psi(r) = A e^{-r/a_B} \quad \text{onde } a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \text{ é o raio de Bohr}$$

- a) Determine os valores médios $\langle r \rangle$ e $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$, associados a distância do elétron ao próton.
 $(1,5a_B) \quad (1/a_B)$
 b) Calcule a probabilidade de presença do elétron entre $r = 0$ e $r = 10^{-14} a_B$. (10^{-12})
 c) Mostre que os valores médios da energia potencial e da energia cinética são dados por

$$\langle V \rangle = -\frac{e^2}{a_B} \quad \text{e} \quad \langle T \rangle = \frac{e^2}{2a_B}$$

4. O elétron em um átomo de hidrogênio encontra-se em um estado descrito pela superposição de autoestados de energia (E) e dos momenta angulares L^2 e L_z :

$$\frac{1}{4} \left[\sqrt{3} \psi_{100} - 2 \psi_{211} + \psi_{210} - 2\sqrt{2} \psi_{21-1} \right]$$

Determine:

- a) os valores médios de L^2 , de L_z ; $(\langle L^2 \rangle = (13/8)\hbar^2) \quad (\langle L_z \rangle = -(1/4)\hbar)$
 b) a incerteza relativa na energia $(\Delta E / \langle E \rangle)$. $(0,75)$

5. Determine os comutadores:

- a) $[L_x, x], [L_y, y], [L_z, z];$
- b) $[L_x, y], [L_x, z], [L_y, x], [L_y, z], [L_z, x], [L_z, y].$

6. O estado normalizado de um elétron no átomo de hidrogênio é dado pela superposição

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{100} + A \psi_{210} + \frac{1}{\sqrt{8}} \psi_{310}$$

Determine:

- a) a constante $A;$ $(\sqrt{3/8})$
- b) o valor médio da energia; $(0,61E_1 \simeq -8,3 \text{ eV})$
- c) os valores médios de L^2 e $L_z.$ $(\langle L^2 \rangle = \hbar^2) \quad (\langle L_z \rangle = 0)$

7. O estado normalizado de um elétron no átomo de hidrogênio pode ser expresso pela superposição

$$\psi = R_{32} \left(\sqrt{\frac{1}{6}} Y_2^1 + \sqrt{\frac{1}{2}} Y_2^0 + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_2^{-1} \right)$$

Determine:

- a) a energia média do elétron e a incerteza associada; $(-1,51 \text{ eV})$
- b) os valores que podem ser encontrados para a medida de L^2 , seu valor médio e incerteza; $(6\hbar^2, 6\hbar^2, 0)$
- c) as probabilidades associadas aos valores que podem ser encontrados para a medida de L_z , seu valor médio e incerteza. $(1/6, 1/2 \text{ e } 1/3) \quad (\langle L_z \rangle = -\hbar/6) \quad (\Delta L_z = \frac{\sqrt{17}}{6} \hbar)$

8. O estado normalizado de um elétron no átomo de hidrogênio é dado por

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{8}} (R_{10} + R_{30})Y_0^0 + \frac{\sqrt{3}}{2} R_{21}Y_1^0$$

Determine:

- a) a energia média do elétron; $(-4,44 \text{ eV})$
- b) os valores que podem ser encontrados para a medida de L^2 , seu valor médio e incerteza ; $(0 \text{ e } 2\hbar^2) \quad (3/2 \hbar^2) \quad (\sqrt{3/2}\hbar^2)$
- c) as probabilidades associadas aos valores que podem ser encontrados para a medida de L_z , seu valor médio e incerteza. $(P(m=0) = 1) \quad (\langle L_z \rangle = 0) \quad (\Delta L_z = 0)$