MECÂNICA QUÂNTICA I – 4300403

Primeiro Semestre de 2013

Lista de Exercícios 12

Entrega: 13 de junho de 2013

Entregar exercícios marcados com "●".

1. Para o átomo de hidrogênio, determine as funções radiais R_{30}, R_{31} e R_{32} utilizando a *fórmula de recorrência*:

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \tag{1.1}$$

2. (a) Normalize $R_{20} = \frac{c_0}{2a}(1 - \frac{r}{2a})e^{-r/2a}$ e construa a função ψ_{200}.

   (b) Normalize $R_{21} = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a}$ e construa as funções ψ_{211}, ψ_{210} e ψ_{21-1}.

3. (a) Construa os primeiros *quatro* polinômios de Laguerre utilizando

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q). \tag{3.1}$$

   (b) Encontre $v(\rho)$ para o caso $n = 5$, $l = 2$. Você deve utilizar as equações

$$v(p) = L^{2l+1}_{n-l-1}(x)(2\rho)\ , \quad L^p_{q-p} \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \quad \text{e} \quad L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q) \tag{3.2}$$

   (c) Encontre $v(\rho)$ novamente (agora para o caso $n = 5$, $l = 2$) mas, desta vez, utilize a *fórmula de recorrência* do exercício 1.

4. (a) Encontre $\langle r \rangle$ e $\langle r^2 \rangle$ para um elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio. Expresse suas respostas em termos do raio de Bohr.

   (b) Encontre $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ para um elétron no estado fundamental do hidrogênio. SUGESTÃO: Isso não requer nenhuma nova integração, note que $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ e explore a simetria do estado fundamental.

   (c) Encontre $\langle x^2 \rangle$ no estado $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$.OBS: Este estado *não* é simétrico em x, y e z. Utilize $x = r \sin\theta \cos\phi$.

5. Qual é o *valor mais provável* de r no estado fundamental do hidrogênio? (A resposta não é $r = 0$!).SUGESTÃO: Primeiro você deve considerar a probabilidade de encontrar o elétron entre r e $r + dr$.

6. Um átomo de hidrogênio está em um estado que é a combinação linear dos estados estacionários $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$ e $n = 2$, $l = 1$, $m = -1$, ou seja,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1}). \tag{6.1}$$

   (a) Construa $\psi(\vec{r}, 0)$ o mais simplificado possivel.

   (b) Encontre o valor esperado da energia potencial $\langle V \rangle$. Ela depende do tempo? Dê a fórmula e o valor numérico, em eV.

- 7. Um **átomo hidrogenóide** consiste em um único elétron orbitando em torno de um núcleo com Z prótons ($Z = 1$ seria o próprio hidrogênio, $Z = 2$ é o hélio ionizado, $Z = 3$ é o lítio duplamente ionizado, e assim por diante). Determine as energias de Bohr $E_n(Z)$, a energia de ligação $E_1(Z)$, o raio de Bohr $a(Z)$ e a constante de Rydberg $R(Z)$ para o átomo de hidrogênio. (Expresse suas respostas como múltiplos apropriados dos valores do hidrogênio). Onde cairia o espectro eletromagnético da série de Lyman para $Z = 2$ e $Z = 3$? SUGESTÃO: Não existe nenhum novo cálculo aqui, no potencial de Coulomb, $V(r) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r$, faça a substituição $e^2 \to Ze^2$ em todos os resultados finais obtidos anteriormente.

8. Considere o sistema Terra-Sol como o análogo gravitacional do átomo de hidrogênio.
   (a) Qual é a função energia potencial? Utilize o potencial de Coulomb do exercício anterior, onde m é a massa da Terra e M a massa do Sol.
   (b) Qual é o raio de Bohr, a_g, para este sistema? Encontre seu valor numérico.
   (c) Escreva a "formula de Bohr" gravitacional, e igualando E_n à energia clássica de um planeta em uma órbita circular de raio r_0, mostre que $n = \sqrt{\frac{r_0}{a_g}}$. Com este resultado, estime o número quântico n da Terra.

9. (a) Construa a função de onda espacial ψ para o hidrogênio no estado $n = 3$, $l = 2$, $m = 1$. Expresse sua resposta *somente* como uma função de r, θ, ϕ e a (o raio de Bohr). Nenhuma das outras variáveis (ρ, z, etc.) ou funções (Y, v, etc.) ou constantes (A, c_0, etc.) ou derivadas devem aparecer na sua resposta.
   (b) Cheque que esta função de onda está devidamente normalizada, calculando integrais apropriadas em r, θ, ϕ.

- 10. (a) Construa a função de onda para o hidrogênio no estado $n = 4$, $l = 3$, $m = 3$. Expresse sua resposta como função das coordenadas esféricas r, θ e ϕ.
   (b) Encontre o valor esperado de r nesse estado.

11. Qual é a probabilidade de encontrar um elétron no estado fundamental *dentro do núcleo*?
   (a) Primeiro, calcule a respostas exata, assumindo que a função de onda é correta em torno de $r = 0$. Considere b o raio do núcleo.
   (b) Expanda seu resultado como uma série de potência no número pequeno $\varepsilon \equiv 2b/a$ e mostre que o termo de ordem mais baixa é cubico: $P \approx \frac{4}{3}\left(\frac{b}{a}\right)^3$. Esta seria uma aproximação conveniente, fornecido que $b \ll a$.
   (c) Alternativamente, nós devemos assumir que $\psi(r)$ é essencialmente constante sobre o pequeno volume no núcleo, então $P \approx \frac{4}{3}\pi b^3 |\psi(0)|^2$. Cheque que você obtém a mesma resposta deste modo.
   (d) Use $b \approx 10^{-15} m$ e $a \approx 0,6 \times 10^{-10}$ para obter um valor estimado de P.

12. (a) Utilize a fórmula de recorrência do exercício 1 para confirmar que, quando $l = n - 1$, a função de onda é da forma
   $$R_{n(n-1)} = N_n r^{n-1} e^{r/na}, \tag{12.1}$$
   e determine a constante de integração por integração direta.
   (b) Calcule $\langle r \rangle$ e $\langle r^2 \rangle$ para estados da forma $\psi_{n(n-1)}$,
   (c) Mostre que a "incerteza" em r (σ_r) é $\frac{\langle r \rangle}{\sqrt{2n+1}}$ para tais estados. Note que a fração espalhada em r diminui, com n aumentando (neste senso, sistema "inicia classicamente", com "órbitas" circulares indefinidas, para grandes valores de n). Para ilustrar este ponto, desenhe funções de onda para diversos valores de n.