QFL 1242 – FÍSICO-QUÍMICA II
3ª Lista de Exercícios

1. Normalize as funções de onda do estado fundamental e do estado excitado do átomo de hidrogênio dadas a baixo.

$$\psi_1 = N_1 e^{-r/a_0} \text{ e } \psi_2 = N_2\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$$

2. Escreva a equação de Schrödinger completa independente do tempo para o átomo de Li e indique que termo(s) no operador que faz(em) com que a equação não tenha solução analítica.

3. Qual é a degenerescência dos orbitais dos níveis num átomo de hidrogênio cujas energias são (a) $-hcR_H$ (b) $-\frac{1}{9}hcR_H$ e (c) $-\frac{1}{25}hcR_H$, em que R_H é a constante de Rydberg, em cm^{-1}.

4. Mostre que os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ do átomo de hidrogênio são ortogonais.

5. Calcule a distância mais provável de um elétron ao núcleo do átomo de hidrogênio para o orbital 2s.

6. Suponha que um átomo tenha 2, 3, 4 ou 5 elétrons em orbitais diferentes. Quais os valores possíveis do número quântico do spin total S? Qual a multiplicidade em cada caso?

7. Escreva a configuração eletrônica do íon Ni^{2+}. Quais os valores possíveis dos números quânticos do spin total S e M_S desse íon?

8. Dê os possíveis símbolos dos termos para (a) Sc $[Ar]3d^14s^2$, (b) Br $[Ar]3d^{10}4s^24p^5$.

9. Que valores de J podem ocorrer nos termos ^3D, ^4D, ^2G? Quantos estados (diferenciados pelo número quântico M_J) pertencem a cada nível?

10. Qual(is) da(s) seguintes transições são permitidas no espectro normal de emissão eletrônica de um átomo?

(a) $2s \rightarrow 1s$
(b) $2p \rightarrow 1s$
(c) $3d \rightarrow 2p$
(d) $5d \rightarrow 2s$
(e) $5p \rightarrow 3s$
(f) $6p \rightarrow 4f$

11. Identifique $\hat{H}^{(0)}$, $\hat{H}^{(1)}$, $\psi^{(0)}$ e $E^{(0)}$ para os seguintes casos:

(a) Um oscilador governado pelo potencial:

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2 + \frac{\gamma}{6}x^3 + \frac{b}{24}x^4$$

(b) Uma partícula restrita a se mover entre $0 \leq x \leq a$ com o potencial:

$$V(x) = 0 \qquad 0 < x < \frac{a}{2}$$

$$V(x) = b \qquad \frac{a}{2} < x < a$$

(c) Átomo de hélio

12. Utilizando o oscilador harmônico como o problema não perturbado, calcule a correção de primeira ordem na energia do nível v=0 para o sistema descrito no exercício 11.a.

13. Utilizando o modelo da partícula na caixa como o problema não perturbado, calcule a correção de primeira ordem na energia do estado fundamental para o sistema descrito no exercício 11.b.

14. Use a Teoria de Perturbação para calcular a correção de primeira ordem na energia do estado fundamental de um oscilador em que a energia potencial é dada por:

$$V(x) = cx^4$$

Dica: Neste caso use o oscilador harmônico como sistema não perturbado. Qual seria então $\hat{H}^{(1)}$?

Sugestões

http://demonstrations.wolfram.com/ElectronProbabilityDistributionForTheHydrogenAtom/

http://demonstrations.wolfram.com/HydrogenAtomRadialFunctions/

http://demonstrations.wolfram.com/LinearCombinationsOfPOrbitals/

http://demonstrations.wolfram.com/LinearCombinationsOfDOrbitals/

http://demonstrations.wolfram.com/LinearCombinationsOfFOrbitals/

http://demonstrations.wolfram.com/AdditionOfAngularMomentaInQuantumMechanics/

http://demonstrations.wolfram.com/FreeElectronModelForLinearPolyenes/

http://demonstrations.wolfram.com/PerturbationTheoryAppliedToTheQuantumHarmonicOscillator/