

## Questões

1. Explique com suas palavras o que é o acoplamento spin-órbita  $\mathbf{J}$ , que leva ao número quântico  $j$  e às projeções  $m_j$ . Como é calculado  $\mathbf{J}$  em termos de  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{S}$ ?
2. Se for aplicado um campo magnético  $\mathbf{B}$  a esse átomo de hidrogênio, o que acontecerá aos níveis de energia? Para cada valor de  $j$ , quantos serão os níveis observados?
3. Como a interação spin-órbita ela leva ao desdobramento de estrutura fina observado nas linhas espectrais do átomo de H?
4. Quando se considera a interação spin-órbita, diz-se que  $m_l$  e  $m_s$  não são mais “bons números quânticos”. Explique por que tal terminologia é apropriada. Quais são os bons números quânticos quando a interação spin-órbita é levada em conta?
5. Quais são os bons números quânticos para um átomo de um só elétron num campo magnético externo que, comparado ao campo interno, é muito fraco? E muito forte?
6. Por que a interação spin-órbita é particularmente sensível à forma do potencial  $V(r)$  para pequenos valores de  $r$ ? Como pode isto ser utilizado para o estudo experimental dos potenciais dos átomos multieletrônicos?
7. Estime a energia de interação spin-órbita no estado  $n = 2$  e  $l = 1$  de um átomo muônico. (Dica: Consulte o exemplo 8.3 do Eisberg e Resnick.)
8. Porque temos dificuldade em distinguir os dois elétrons de um átomo de He, mas não os dois elétrons pertencentes a dois átomos de H separados? E quanto a uma molécula de  $H_2$ ?
9. Enuncie o princípio da exclusão de Pauli. Utilizando esse princípio, faça um diagrama com as possíveis configurações de spin para um átomo de 2 elétrons.
10. O que são forças de troca? Elas são forças no sentido Newtoniano? Se sim, discuta como. Se não, porque é adequado chamá-las de forças?
11. Como se relaciona a distância média entre elétrons em um sistema de dois elétrons, o princípio da exclusão de Pauli, as forças de troca e a simetria da função de onda eletrônica?
12. Descreva sucintamente as aproximações feitas na Teoria de Hartree para resolver sistemas de átomos multieletrônicos.

## Problemas

1. Calcule a razão entre o momento de dipolo magnético orbital e o momento angular orbital  $\mu_l/L$ , para um elétron se movendo em uma órbita elíptica do átomo de Bohr-Sommerfeld. Compare este resultado com o de uma órbita circular.
2. Um feixe de átomos de hidrogênio em seu estado fundamental passa por um imã de Stern-Gerlach, que o divide em duas componentes de acordo com a orientação de seus spins. Uma das componentes é retido por um diafragma ao fim do imã, e o outro continua através de um segundo imã de Stern-Gerlach cujo eixo coincide com o primeiro, mas que está rotacionado por um ângulo  $\alpha$  em relação ao eixo do primeiro imã. Há, também, um segundo diafragma ao final do segundo imã que também permite que passe apenas uma componente. Descreva, qualitativamente como a intensidade do feixe passando pelo segundo diafragma depende de  $\alpha$ .
3. a) Determine a separação dos níveis de energia de um átomo de hidrogênio na presença de um campo externo  $\mathbf{B}$  em termos dos números quânticos  $m_l$  e  $m_s$ .  
b) Desenhe um diagrama de energia para o nível  $n = 2$ , para um átomo de hidrogênio na ausência de campos externos e sob o efeito de um campo magnético  $\mathbf{B}$ .  
c) Calcule a força do campo magnético externo que produziria uma diferença de energia entre os níveis mais separados de  $n = 2$  que seria igual à diferença do entre as energias dos níveis  $n = 1$  e  $n = 2$  na ausência do campo.
4. Determine os possíveis valores de  $j$  para  $n = 1, 2, 3, 4$ .
5. A notação espectroscópica é muito conveniente para expressar os níveis quânticos. A notação consiste em escrever o nível de número quântico principal  $n$ , número quântico  $l$  correspondendo a notação  $L$ , número quântico de spin total  $S$  e número quântico de soma de momento angular  $j$  como:

$$n^{2S+1}L_j$$

Determine a notação espectroscópica dos dois primeiros estados excitados para um átomo de hidrogênio e um átomo de hélio

6. Quais são as regras de seleção para transições entre níveis quânticos? Verifique se as seguintes transições em um átomo de hidrogênio são possíveis. Caso não sejam, indique qual regra está sendo violada.
  - a)  $2^2P_{3/2} \rightarrow 1^2P_{3/2}$
  - b)  $3^2D_{5/2} \rightarrow 1^2P_{1/2}$
  - c)  $1^2S_{1/2} \rightarrow 2^2P_{1/2}$
  - d)  $3^2D_{3/2} \rightarrow 4^2S_{1/2}$
7. Sabe-se que a energia de cada nível é deslocada do nível original devido ao efeito spin-órbita e correções relativísticas. A expressão de Dirac calcula os valores da energia  $E$ , levando em conta essas correções:

$$E = \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Observe que a energia só depende dos números quânticos  $n$  e  $j$ . Determine as energias possíveis para  $n = 1, 2, 3, 4$ .

8. Para um sistema de 2 elétrons temos duas autofunções correspondentes ao mesmo autovalor  $E$  dadas por:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) + \Psi_\beta(1)\Psi_\alpha(2)]$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) - \Psi_\beta(1)\Psi_\alpha(2)]$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  representam estados espaciais, (1) e (2) denotam respectivamente as partículas 1 e 2 e os índices  $S$  (simétrica) e  $A$  (anti-simétrica) são relativos à simetria das autofunções.

- a) Mostre a simetria das autofunções.
  - b) Mostre que, para ambas as funções, que a densidade de probabilidade não se altera com a permutação das partículas.
9. Considere um sistema de dois elétrons com autofunções de mesmo autovalor  $E$  dadas conforme o problema anterior.
    - a) Determine as autofunções de spin para este sistema.
    - b) Escreva as autofunções totais (espaciais e de spin) do sistema.