

Exercício 1 Uma partícula sem spin propaga-se livremente pelo espaço tridimensional. Determine suas autofunções. Examine o comportamento da função de onda $\psi_l(r)$ no limite $r \rightarrow \infty$.

Exercício 2 A determinação exata das propriedades físicas de átomos e moléculas envolve o conhecimento igualmente preciso de todas as interações presentes no sistema e posterior cálculo de autovalores/autovetores. Em geral, isso não é possível. Nessas situações, o subterfúgio consiste em modelar as interações microscópicas por meio de potenciais efetivos. Aqui, iremos estudar o caso das moléculas diatômicas, ilustradas na figura abaixo.

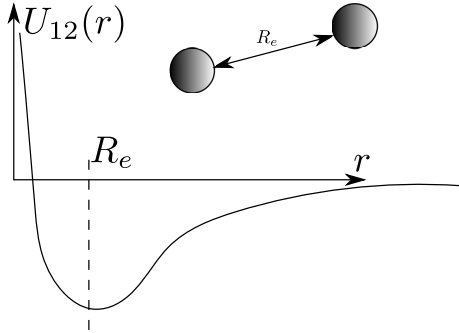


Figura 1. Modelo para molécula diatômica. Potencial efetivo entre os átomos possui um mínimo de energia para distância R_e .

Neste modelo, as interações elétron núcleo são da ordem de 13.6 eV enquanto as interações eletrônicas interatômicas são da ordem de 1 eV. Essa observação permite separar os modos normais da molécula dos modos atômicos. Quando essas condições são satisfeitas, é possível definir um potencial efetivo central $U_{12}(r)$, o qual é repulsivo para curtas distâncias ($r < r_e$) e atrativo caso contrário.

a) O potencial central efetivo $U_{12}(r)$ possui um mínimo em R_e . Execute a expansão deste potencial em função da distância interatômica r . Mostre

que o potencial resultante pode ser aproximado para o potencial harmônico para pequenas oscilações.

b) Utilizando o resultado do item anterior, determine o operador hamiltoniano da molécula.

c) Mostre que a energia molecular é

$$E_{n,l} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mR_e^2} + U_{12}(R_e). \quad (1)$$

d) Estime as ordens de grandeza de cada termo da equação acima. Para comparação: O_2 possui $\hbar\omega \sim 0.2$ eV, $\hbar^2/mR_e^2 \sim 0.18$ meV

e) Baseado nesse explique o funcionamento do forno de microondas (o mecanismo de funcionamento é o mesmo para H_2O , apenas muito mais complicado)

Exercício 3 Um cientista quer determinar o potencial elétrico produzido pelo elétron de um certo átomo hidrogenóide em seu estado fundamental. Para isso, ele assume que a densidade espacial de carga é

$$\rho(\vec{r}) = -e|\psi(r, \theta, \varphi)|^2, \quad (2)$$

onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ é a função de onda eletrônica.

Determine o potencial elétrico $\phi(\vec{r})$ assumindo que o processo de medida interage fracamente com o elétron. (Por que essa condição é necessária?). Verifique o comportamento de $\phi(\vec{r})$ nos limites $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$, ou seja, $\phi(r) \sim 1/r$ e $\phi(r) \sim \exp(-r/a_0)$, respectivamente.