

Mecânica Quântica — 7600022

Oitava Lista — Para praticar para a prova do dia 14/11.

Em classe, escrevemos a função de onda do átomo de hidrogênio na forma

$$\varphi_{\ell m}(\vec{r}) = \frac{f(\rho)^\ell}{\rho} e^{-\kappa\rho} Y_{\ell m}(\theta, \phi),$$

onde $\rho = r/a$ (a é o raio de Bohr), $\kappa = \sqrt{-2E/1\text{Ha}}$ e os $Y_{\ell m}$ são os harmônicos esféricos. A partir dessa definição da função $f(\rho)$, resolva as questões a seguir.

1. Resolva a equação diferencial que $f(\rho)$ obedece supondo que $f_\rho = \alpha + \beta\rho$. Qual deve ser κ para que essa forma seja solução da equação diferencial? Qual é a energia correspondente? Compare essa energia com a encontrada em classe para $f(\rho) = c$.
2. Esboce o gráfico da parte radial da função de onda em função da distância ρ para
 - (a) $\ell = 0$
 - (b) $\ell = 1$
3. Resolva a equação diferencial que $f(\rho)$ obedece supondo que $f_\rho = \alpha + \beta\rho + \gamma\rho^2$. Qual deve ser κ para que essa forma seja solução da equação diferencial? Qual é a energia correspondente? Compare essa energia com a encontrada em classe para $f(\rho) = c$.

4. Esboce o gráfico da parte radial da função de onda em função da distância ρ para
 - (a) $\ell = 0$
 - (b) $\ell = 1$

5. Para dado ℓ , a função $f(\rho)$ encontrada na questão 3 é ortogonal à função encontrada na questão 1? Explique por quê, em termos gerais. Para confirmar, calcule a integral $\int_0^\infty f_1(\rho)f_3(\rho)r^2 d\rho$, onde f_1 e f_3 são as funções das questões 1 e 3, respectivamente.

6. A autofunção do Hamiltoniano do átomo de hidrogênio com energia mais baixa é da forma

$$\varphi_{100}(\vec{r}) = \alpha_0 e^{-\rho} Y_{00}(\theta, \phi).$$

Para encontrar a constante de normalização α_0 , imponha que $\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$.

7. No integrando da questão 6, aparece o produto $\rho^2 e^{-\rho}$. Qual é o valor de ρ que maximiza esse produto? Qual é o valor de r correspondente?

8. A autofunção do Hamiltoniano do átomo de hidrogênio com $\ell = 1$ e energia mais baixa é da forma

$$\varphi_{11m}(\vec{r}) = \alpha_1 e^{-\rho/2} Y_{1m}(\theta, \phi).$$

Encontre a constante de normalização α_1 .

9. Mostre explicitamente que $\langle \varphi_{100} | \varphi_{11m} \rangle = 0$ ($m = -1, 0, 1$). As funções de onda pertinentes são as das questões 6 e 8.

10. Escreva a expressão (a menos de uma constante de normalização) para a função $f(\rho)$ de energia mais baixa para $\ell = 10$. Encontre o valor de ρ que maximiza $f(\rho)\rho^2$. Esboce o gráfico de $f(\rho)$ em função de ρ e discuta o gráfico; em particular, explique fisicamente por que o máximo ocorre relativamente longe da origem.