Mecânica Quântica — 7600022

Nona Lista — teste no dia 28/11/2017

1. Considere o problema do poço de potencial infinito, definido pela equação

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < a) \\ \infty & (|x| > a) \end{cases}.$$

Em classe, empregamos uma parábola como função tentativa para estimar a energia do estado fundamental, com base no método variacional. A energia do primeiro estado excitado também pode ser encontrada com base no mesmo método, porque o primeiro estado excitado é o estado com energia mais baixa entre os autoestados ímpares. Isso sabido, encontre a energia do primeiro estado excitado a partir da função de onda tentativa

$$\psi(x) = \alpha x(x^2 - a^2),$$

onde α é uma constante que você deverá determinar. Compare com o valor exato da energia.

2. Empregue a função de onda tentativa

$$\psi_\lambda(x) = \alpha e^{-\lambda x^2}$$

para encontrar a energia do estado fundamental do oscilador harmônico. Compare com o valor exato.

3. Empregue a função de onda tentativa

$$\psi_\lambda(x) = \alpha x e^{-\lambda x^2}$$

para encontrar a energia do primeiro estado excitado do oscilador harmônico. Compare com o valor exato.

4. É dada a matriz

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Empregue o método variacional para mostrar que o seu menor autovalor é menor do que -1. *Dica.: Considere como tentativa o vetor*

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

5. Ainda considerando a matriz do problema anterior, empregue uma demonstração análoga à do método variacional para mostrar que o maior autovalor é maior do que 2.

6. O Hamiltoniano de um sistema unidimensional é definido pelo potencial

$$V(x) = \begin{cases} \dfrac{m\omega^2}{2} & (x > 0) \\ \infty & (x < 0). \end{cases}$$

7. Encontre uma aproximação para a energia do estado fundamental do Hamiltoniano $H = p^2/2m + V(x)$ a partir da função de onda tentativa

$$\psi_\lambda(x) = \begin{cases} \alpha x e^{-\lambda x} & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0), \end{cases}$$

onde α é a constante de normalização, que você deverá determinar, e λ é o parâmetro variacional. Compare o resultado com a energia exata $[(3/2)\hbar\omega]$.

8. Encontre a energia do autoestado de energia mais baixa do Hamiltoniano do átomo de H para $\ell = 1$ e $m = 0$, a partir do método variacional. Para isso, use a função de onda tentativa

$$\psi(\beta, \lambda)(\rho, \theta, \phi) = \alpha \rho^{\beta} e^{-\lambda \rho} Y_{l,0}(\theta, \phi),$$

   que tem dois parâmetros variacionais (β e λ). Como de costume, α é a constante de normalização. Compare com o resultado exato.

9. Encontre a energia do estado fundamental do hidrogênio negativamente ionizado (núcleo de hidrogênio com dois prótons), usando o método variacional. Como no átomo de He, tome como função tentativa

$$\psi_Z = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-\frac{Z}{a}(r_1 + r_2)}.$$

   Compare o resultado com a energia do estado fundamental do átomo de H (neutro). Qual dos dois é mais estável?

10. Estime a energia que um átomo de flúor ganha quando se adiciona a ele um elétron. *Dica: encontre o nível de energia a que será adicionado o elétron. Esse elétron verá o núcleo blindado pelos dois elétrons 1s e pelos dois elétrons 2s, isto é, com carga efetiva $Z = 5$.*