

1ª Lista de Exercícios
Introdução à Física Atômica e Molecular
1º semestre de 2021

1. Calcule o raio da esfera para que a probabilidade de encontrar o elétron no estado $1s$ do átomo de hidrogênio seja de 50%.
2. Um átomo positrônio consiste de um pósitron (e^+) e um elétron (e^-). Obtenha os estados ligados de energia e compare a energia do estado fundamental com o caso do átomo de hidrogênio. Compare o comprimento de onda da radiação emitida pela transição de $n = 2$ para $n = 1$, nos dois casos.
3. Considere o átomo de hidrogênio no primeiro estado excitado ($n=2$) e verifique que suas quatro autofunções são ortogonais entre si e que todas elas são ortogonais à função de onda do estado fundamental.
4. A energia experimental para ionizar um elétron no átomo de He é aproximadamente 24,6 eV. Qual a energia necessária para ionizar o segundo elétron?
5. Considere o modelo simplificado de rotor rígido onde o espectro rotacional de uma molécula diatômica consiste de linhas igualmente espaçadas. A molécula CH exhibe um espectro de emissão com linhas (em cm^{-1}): 28.91, 57.83, 86.74 e 115.66
 - i) Obtenha a constante rotacional;
 - ii) Obtenha a distância interatômica.
6. Moléculas diatômicas homonucleares não exibem espectro rotacional. Você consegue dar uma explicação para isso?
7. Utilize o método variacional para obter a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio com uma função de prova $\Phi(r) = e^{-ar^2}$. Compare com a solução exata e obtenha o erro.
8. Considere o oscilador harmônico unidimensional colocado na presença de um campo elétrico, que dá origem a uma perturbação $V = -\lambda x$. Obtenha a correção de energia em primeira ordem.
9. Considere um oscilador harmônico bidimensional isotrópico e obtenha os níveis de energia e discuta a degenerescência do primeiro estado excitado. Escreva as autofunções para esse estado em coordenadas cartesianas.

10. Considere um oscilador harmônico bidimensional isotrópico e resolva a eq. de Schrödinger em coordenadas polares. Escreva as autofunções para o primeiro estado excitado e compare as correspondentes autofunções obtidas em coordenadas cartesianas no quesito acima.
11. Quais os possíveis valores de j (sendo $j = l + s$) para $l = 3$ e $s = 1/2$? (Nesse exercício e nos próximos dois temos unidades de $\hbar/2\pi$).
12. Obtenha os valores do momento angular orbital total L sendo $l_1 = 3$ e $l_2 = 1$?
13. Considere uma partícula (ex. átomo de hidrogênio) com $l=2$ e $s=1/2$. Quais são os possíveis valores do momento angular total j ? Obtenha o desdobramento spin-órbita desses estados j .
14. Mostre que o momento angular satisfaz a relação de comutação $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar\vec{L}$. Definindo $L_+ = L_x + iL_y$ e $L_- = L_x - iL_y$, mostre que:
- $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$
 - $[L_+, L_z] = -\hbar L_+$
 - $L^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z$
 - $L^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$
15. Considere uma partícula de spin $1/2$ ($s=1/2$, $m_s=1/2, -1/2$) e os possíveis estados $|s, m\rangle$, ou seja, $|1/2, 1/2\rangle$ e $|1/2, -1/2\rangle$. A representação matricial do operador de spin nessa base é $S_z = (\hbar/2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Obtenha a representação matricial de S_x e S_y .
16. O estado fundamental do átomo de He pode ser representado aproximadamente pelo produto de funções hidrogênicas $\varphi_{1s}(1) \varphi_{1s}(2)$. Nesta aproximação, qual a energia necessária para ionizar um elétron? Considere agora que há uma blindagem $\sigma = 5/16$ e obtenha essa energia. Esse produto, como se pode ver não é antissimétrico com respeito à troca de coordenadas das partículas. Como v. concilia isso com o princípio de Pauli?
17. Verifique que as funções de spin $[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$ e $[\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$ são autofunções de S^2 com autovalores 0 e 2, respectivamente (em unidades de $\hbar/2\pi$).

18. Considere três partículas de spin $1/2$. Quais são os possíveis estados de spin total S . Obtenha as autofunções para o caso principal ($M=M_{\max}$) de todos os possíveis estados de spin. Há dois possíveis estados dubleto ($S=1/2$), escolha um deles e obtenha as autofunções $|S = 1/2, M = 1/2\rangle$ e $|S = 1/2, M = -1/2\rangle$.