

Mecânica Quântica II (4302404)

Lista de Exercícios Unidade 1 2º Semestre de 2023

- Quais são os possíveis multipletos (todos os possíveis estados com S, L e J, na aproximação de Russell-Saunders) associados com as configurações eletrônicas dadas abaixo? Obs: Notação espectroscópica: $^{2S+1}L_J$.
 - Átomo de Nitrogênio no estado fundamental $N = 1s^2 2s^2 2p^3$. Use as regras de Hund e determine qual deles corresponde ao multipletto de menor energia (estado fundamental);
 - Estado excitado do átomo de carbono $C_{\text{exc}} = 1s^2 2s^2 2p^3 d$;
 - Estado ionizado do átomo de carbono $C_{\text{ion}} = 1s^2 2s^2 2p$. Use as regras de Hund e determine qual deles é o estado fundamental.
- Qual é o estado espectroscópico associado ao estado fundamental dos átomos de Al, Cl e Ca ?
- Use a forma direta para determinar multipletto que corresponde ao estado fundamental do
 - Átomo de manganês ($Z_{Mn} = 25$).
 - Átomo de Európio ($Eu = \dots 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^7 5s^2 5p^6 6s^2$).
- Considere duas partículas com momento angular $J_1 = 1$ e $J_2 = \frac{1}{2}$ (em unidade de $\hbar$). Sendo $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$, o momento angular total, obtenha:
 - Os possíveis valores de J ;
 - Os autoestados simultâneos de J^2 , J_z , J_1^2 e J_2^2 , $|J_1 J_2 J m\rangle$ em termos dos autoestados simultâneos de J_1^2 , J_{1z} , J_2^2 e J_{2z} , $|J_1 m_1 J_2 m_2\rangle$.
- Considere três partículas de spin $\frac{1}{2}$.
 - Quais são os possíveis estados de spin total S?
 - Obtenha as autofunções para o caso principal ($M = M_{\text{max}}$) de todos os possíveis estados de spin;
 - Há dois possíveis dubletos ($S = 1/2$), escolha um deles e obtenha as autofunções $|S = \frac{1}{2}, M = \frac{1}{2}\rangle$ e $|S = \frac{1}{2}, M = -\frac{1}{2}\rangle$;
 - Verifique o autovalor de spin, para os estados obtidos no item “b” **aplicando explicitamente** o operador S^2 .
- Utilize o método variacional para calcular uma aproximação para a energia do estado fundamental para o poço de potencial tipo delta:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \lambda \delta(x),$$

onde λ é uma constante positiva, usando como função tentativa a *função gaussiana*:

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$$

sendo A uma constante para normalização e α o parâmetro variacional.

7. Usando novamente a função gaussiana, calcule uma aproximação para a energia do estado fundamental para o potencial linear $V(x) = \lambda|x|$, onde λ é uma constante positiva.
8. Use a função tentativa

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(\pi x/a) & \text{se } -a/2 < x < a/2, \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

sendo A uma constante para normalização e a o parâmetro variacional (!!), para obter uma aproximação para a energia do estado fundamental do oscilador harmônico unidimensional. Compare o resultado obtido com a energia exata.

9. Usando a função tentativa $\phi_\alpha = xe^{-\alpha x^2}$, mostre que se obtém o resultado exato para a energia e função de onda do primeiro estado excitado do oscilador harmônico unidimensional.
10. Considere uma partícula numa caixa infinita unidimensional, confinada no intervalo $(0, a)$, ou seja $V(x) = 0$ se $x \leq 0$ ou $x \geq a$. Considere agora uma função de prova do tipo $\Phi(x) = c_1 x(a-x) + c_2 x^2(a-x)^2$, onde c_1 e c_2 são os parâmetros variacionais. Calcule o valor da energia variacional e compare com a energia exata do estado fundamental.
11. Considere o átomo de hidrogênio no estado fundamental e tome como função de prova para o método variacional uma função do tipo gaussiana, ou seja $\Phi(r) = A \exp(-\alpha r^2)$, onde A é uma constante de normalização e α é o parâmetro variacional. Determine o valor da energia variacional e compare com a energia exata. Faça um gráfico de $\Phi(r)$ e compare com a função exata $\phi_{1s}(r)$. Em que região as duas funções mais diferem?
12. Considere os exercícios apontados nas Notas de Aula.