

**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  $\text{cm}^{-1}$ ): 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  $|S = 1/2, M = -1/2\rangle$ .