Universidade de São Paulo em São Carlos — Lista 4, resolver até 25.9.2015

SPI5814 Física atômica e molecular

Nome:

Harmônicos esféricos

Demonstre que os harmônicos esféricos são funções com paridade bem definida, isto é, $Y_{\ell m}(\pi-\theta,\pi+\phi)=(-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta,\phi)$.

Partícula numa caixa esférica

Encontre os níveis de energia e as funções de onda de uma partícula confinada em uma caixa esférica descrita pela energia potencial, $V(r)=0$ para $r<a$ e $V(r)=\infty$ para $r\geq a$. Considere arbitrários momentos angulares ℓ.

Partícula num potencial harmônico

Uma partícula quântica de massa m está sujeita a um potencial

$$V=\tfrac{1}{2}m\omega^2\left(x^2+y^2+z^2\right) \ .$$

a. Obtenha os níveis de energia dessa partícula. Isto é, determine os autovalores de

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=E\psi \ .$$

b. Considere o nível fundamental e os dois primeiros níveis excitados. Monte uma tabela mostrando para cada um desses três níveis, o valor da energia, a degenerescência e os respectivos estados em termos dos números quânticos.

c. Utilizando

$$\nabla^2\psi=\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{L^2}{\hbar^2r^2}\right]\psi$$

e lembrando que $L^2Y_{\ell m}(\theta,\phi)=\hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}$, escreva a equação diferencial do item (a) para a parte radial da função de onda (não é preciso resolvé-la). Identifique nessa equação o potencial efetivo $V_{ef}(r)$.

d. Resolva a equação diferencial do item anterior para o caso em que $\ell=0$ e determine o autovalor correspondente. Para isso, admita uma solução do tipo $e^{-\alpha r^2}$ e determine α.

Funções de Laguerre

FuncoesLaguerre Utilizando a relação de ortogonalidade dos polinômios associados de Laguerre,

$$\int_0^\infty \rho^\alpha e^{-\rho} L_n^{(\alpha)}(\rho) L_m^{(\alpha)}(\rho) d\rho = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}\delta_{n,m}$$
$$\int_0^\infty \rho^{\alpha+1} e^{-\rho} L_n^{(\alpha)}(\rho)^2 d\rho = \frac{(n+\alpha)!}{n!}(2n+\alpha+1) \ ,$$

e as formula de recursão,

$$nL_n^{(\alpha+1)}(\rho) = (n-\rho)L_{n-1}^{(\alpha+1)}(\rho) + (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(\rho)$$
$$\rho L_n^{(\alpha+1)}(\rho) = (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(\rho) - (n-\rho)L_n^{(\alpha)}(\rho) \ ,$$

a. calcule a constante de normalização $D_{n,l}$ para um átomo hidrogenoide com número atômico Z;
b. o valor médio

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{n^2 a_B}{Z}\left[1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2}\right)\right] \ ;$$

c. o valor médio

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n\ell m} = \frac{Z}{n^2 a_B} \ .$$

Modelo de Bohr

A partir dos resultados acima, obtenha o valor esperado $\langle r \rangle$ para os estados Ψ_{100}, Ψ_{210} e Ψ_{320} do átomo de hidrogênio. Compare os resultados com aqueles do modelo de Bohr.

Modelo de Bohr

Calcule, para o estado Ψ_{320} do átomo de hidrogênio, os valores esperados $\langle \frac{1}{r} \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$.
A partir dos resultados, obtenha os valores esperados das energias cinética e potencial, $\langle T \rangle$ e $\langle V \rangle$, e mostre que, de acordo com o teorema virial, $\langle T \rangle = -(1/2)\langle V \rangle$. Compare os resultados com o modelo de Bohr.

Estado não estacionário

Constrói uma função de onda de hidrogênio não-estacionária com contribuições iguais de $(n=1, \ell=0, m=0)$, $(n=2, \ell=1, m=1)$. Calcule a posição média $\langle \mathbf{r} \rangle$ e o valor médio de $\langle z^2 \rangle$ como função do tempo.