



Mecânica Quântica - MNPEF Lista de Problemas 1.4

Departamento de Física de Ji-Paraná
Universidade Federal de Rondônia
Prof. Marco Polo



Questão 01: Estados estacionários do átomo de hidrogênio

Usando a solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o átomo de hidrogênio,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} e^{-r/(na_0)} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) Y_\ell^m(\theta, \phi),$$

escreva explicitamente as funções de onda dos seguintes níveis, com $m = 0$:

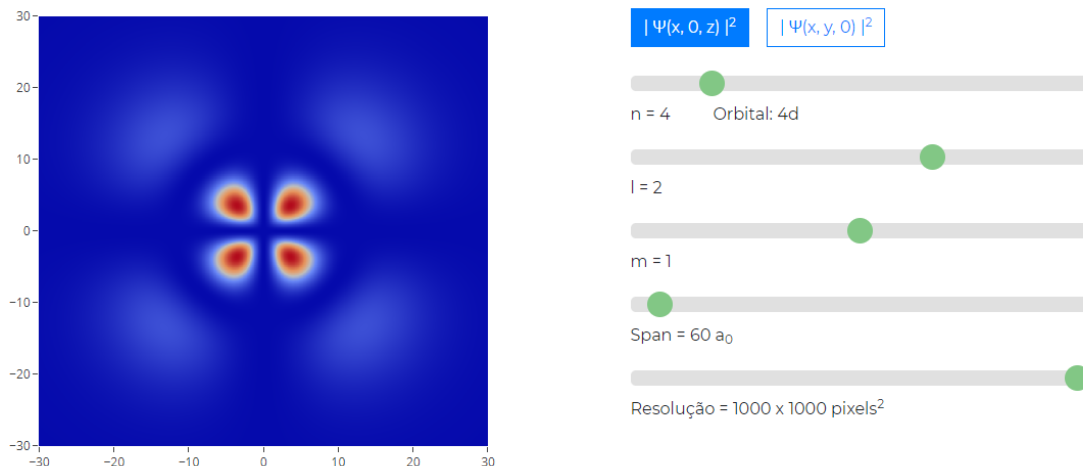
- (a) 3s
- (b) 3p
- (c) 4d
- (d) 4f
- (e) 5g

Questão 02: Matéria de Rydberg

A matéria de Rydberg é um tipo de estado da matéria (tal como sólido, líquido ou gás) exótico formado por átomos nos chamados “estados circulares de Rydberg”. Nesses estados, os átomos exibem características de “átomos clássicos”: a órbita do elétron é aproximadamente circular, e o tempo de vida pode chegar a várias horas.

- (a) Considere um átomo de hidrogênio em um estado circular de Rydberg. Que números quânticos você esperaria para o elétron nesse estado e porquê? Cite um exemplo de números quânticos (n, ℓ, m) para o elétron em um estado circular de Rydberg.

- (b) Acesse o aplicativo *Orbitais do hidrogênio* da plataforma *SimuFísica* (<http://www.simufisica.unir.br/simulacoes/orbitais-hidrogenio>) para plotar o orbital que mais se aproxima de um estado circular de Rydberg.



Questão 03: Gráfico dos orbitais atômicos do hidrogênio

Usando um sistema algébrico computacional, escolha um dos orbitais da Questão 01 para representar graficamente a densidade de probabilidade quântica de encontrar o elétron em função da distância ao próton. Escolha um plano do espaço 3D para plotar a densidade de probabilidade, que pode ser o xz , por exemplo.

Dica: Passe das coordenadas esféricas para as coordenadas cartesianas. Confira na plataforma SimuFísica seu resultado gráfico.

Questão 04:

Mostre que a função

$$\psi = A \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

é uma solução da equação de Schrodinger independente do tempo, onde A é uma constante e a_0 é o raio de Bohr.

Questão 05:

Para o átomo de hidrogênio no estado fundamental, determine a probabilidade de encontrar o elétron a uma distância de $\pm 0,03a_0$ em torno do raio de Bohr.

Questão 06:

Mostre que a distância mais provável entre o elétron e o núcleo no estado $n = 2$, $\ell = 1$ do hidrogênio é $r = 4a_0$.

Questão 07:

Para o átomo de hidrogênio, determine o total de estados

- (a) na camada $n = 2$;
- (b) na camada $n = 4$.
- (c) Determine as energias dos estados dos itens (a) e (b).

Lembre-se dos estados de spin ($+1/2$, $-1/2$), sendo dois para cada conjunto de números quânticos.

Questão 08:

Usando a notação espectroscópica, faça uma lista de todos os estados do átomo de hidrogênio com $n = 2$ e $n = 4$.

Questão 09:

Calcule $\langle r \rangle$ e $\langle r^2 \rangle$ para o elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio.

Questão 10:

Um átomo de hidrogênio em um estado que é uma superposição linear dos estados $1s$ e $3p$:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{5}} [2\psi_{1s} + \psi_{3p}]$$

Calcule o valor esperado da energia do elétron.

Questão 11:

- (a) Monte a função de onda para o hidrogênio no estado $n = 4$, $\ell = 3$, $m = 3$.
Expresse sua resposta como função de coordenadas esféricas r, θ, ϕ .
- (b) Calcule o valor esperado de r nesse estado. Use um sistema algébrico computacional para resolver a integral.
-

Questão 12: Linhas espectrais coincidentes

Como visto em aula, o comprimento de onda de uma linha no espectro do hidrogênio é determinado pelos números quânticos principais dos estados inicial e final envolvidos na transição. Calcule dois pares distintos (n_i, n_f) que produzam o mesmo comprimento de onda. Ex: (6851, 6409) e (15283, 11687).

Respostas**Questão 05**

3,2%

Questão 07

- (a) 8
(b) 32
(c) $E_2 = -3,4 \text{ eV}$, $E_4 = -0,85 \text{ eV}$

Questão 08

$n = 2$: 2s, 2p ($m = 1$), 2p ($m = 0$), 2p ($m = -1$)
 $n = 4$: 4s, 4p ($m = 1$), 4p ($m = 0$), 4p ($m = -1$), 4d ($m = 2$), 4d ($m = 1$), 4d ($m = 0$), 4d ($m = -1$), 4d ($m = -2$), 4f ($m = 3$), 4f ($m = 2$), 4f ($m = 1$), 4f ($m = 0$), 4f ($m = -1$), 4f ($m = -2$), 4f ($m = -3$)

Questão 09

$$\langle r \rangle = \frac{3a_0}{2}, \langle r^2 \rangle = 3a_0^2$$

Questão 10

-11,2 eV

Questão 11

(a)
$$\psi(r, \theta, \phi) = -\frac{1}{6144\sqrt{\pi}a_0^{9/2}}r^3e^{-r/4a_0}\sin^3(\theta)e^{3i\phi}$$

(b) $18a_0$

Questão 12

Exemplos: (32, 28) e (224, 56); (221, 119) e (119, 91);