

Física Atômica e Molecular (2009-2010)

dúvidas	qualquer dia	9h00-18h00 (gab D43)
entregar	terça feira 10/11	(gab D43)
discussão	quarta feira 11/11	(sala D6)

14. O movimento orbital do electrão dentro do interior do átomo de hidrogénio causa um momento magnético proporcional ao momento angular orbital $\vec{L}$. Consequentemente, o momento magnético intrínseco do electrão, proporcional ao spin $\vec{S}$ sofre uma força, proporcional com $\vec{L} \cdot \vec{S}$ (*acoplamento spin-orbital*). Portanto, a forma mais completa do Hamiltoniano do átomo de hidrogénio é igual a

$$H' = \frac{p^2}{2\mu_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + W(r)\vec{L} \cdot \vec{S} ,$$

onde $W(r)$ é uma função da distância entre o protão e o electrão.

Utilizando os resultados dos problemas (12) e (13), mostra que $[H' , \vec{S}] \neq 0$, $[H' , \vec{L}] \neq 0$, $[H' , S^2] = 0$ e $[H' , L^2] = 0$ e tira uma conclusão relativamente aos observáveis L_z , S_z , L^2 e S^2 .

15. Devido às conclusões do problema (14) é preciso encontrar um novo observável para rotular os estados próprios do Hamiltoniano H' .

Defina-se o *momento angular total* $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ do átomo de hidrogénio.

Utilizando os resultados dos problemas (12) e (13), mostra que $[H' , \vec{J}] = 0$ e $[H' , J^2] = 0$ e tira uma conclusão relativamente aos observáveis J_z e J^2 .

16. Em virtude de se estar a estudar o espectro rotacional de uma molécula polar diatómica, considere que os dois núcleos atômicos, de massas m_1 e m_2 , giram em volta do seu centro de massa comum.

- a Determine uma relação entre a energia total deste sistema, o momento angular total $\vec{K}$, a massa reduzida e a distância entre os núcleos.
- b Sabendo que K^2 apenas pode ter valores $\hbar^2 K(K+1)$, com $K = 0, 1, 2, \dots$, que o espectro rotacional de $HC\ell$ contém os comprimentos de onda (em μm) 120.3, 96.0, 80.4, 68.9 e 60.4, e ainda que apenas ocorrem transições dipolares com $\Delta K = \pm 1$, determine a distância entre os núcleos de hidrogénio (${}_1H^1$) e cloro (${}_{17}Cl^{35}$) da molécula de $HC\ell$.

17. Oscilações pequenas de um sistema de duas partículas, ligadas por uma mola (constante de mola C), cujos movimentos estão restritos a uma dimensão (coordenada r), são classicamente descritas pela equação dinâmica $\mu\ddot{r} = -C(r - r_0)$, onde r_0 representa a distância de equilíbrio do sistema das duas partículas e μ a sua massa reduzida.

a Mostre que o Hamiltoniano deste sistema é dado por

$$H = p\dot{r} - L = \frac{1}{2} \left\{ \frac{p^2}{\mu} + \mu\omega^2 x^2 \right\} ,$$

com $x = r - r_0$ e $\omega = \sqrt{C/\mu}$.

b A correspondente equação de onda na Mecânica Quântica obtém-se pela substituição $p \rightarrow -i\hbar \partial/\partial x$ e é dada por

$$H = p\dot{x} - L = \frac{1}{2\mu} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\mu\omega x)^2 \right\} . \quad (1)$$

Mostre que a função de onda, dada por

$$\psi_0(x) = \left[\frac{\mu\omega}{\pi\hbar} \right]^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\mu\omega x^2/\hbar} , \quad (2)$$

representa uma solução normalizada da equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$ para $E = E_0 = \omega/2$.

c Os operadores de criação e aniquilação são respectivamente definidos por

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad \text{e} \quad a = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) . \quad (3)$$

Mostre (i) $a\psi_0 = 0$, (ii) $H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$, (iii) $[a, a^\dagger] = 1$, (iv) $[H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger$ e (v) $[H, a] = -\hbar\omega a$.

d Mostre que, se ψ é uma solução própria com valor próprio E da equação $H\psi = E\psi$, então $a^\dagger\psi$ é uma solução própria com valor próprio $E + \hbar\omega$ da mesma equação.