



Universidade Federal do Paraná
Dep. Química – Curso de Licenciatura e Bacharelado em Química
Sexta Lista de Exercícios de Química-Quântica C (CQ115)
Professor Eduardo Lemos de Sá

1ª Questão: Uma partícula em uma caixa esférica tem $V = 0$ se $r \leq b$ e $V = \infty$ se $r > b$. Para este sistema, $\psi = R_{(r)} \cdot f_{(\theta, \varphi)}$ e $R_{(r)}$ satisfaz a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \left(R'' + \frac{2}{r} R' \right) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot m \cdot r^2} R + V_{(r)} \cdot R = E \cdot R. \text{ Qual é a função } f_{(\theta, \varphi)}? \text{ Determine a função}$$

$R_{(r)}$ para $l = 0$. Sugestão: faça a substituição $R_{(r)} = \frac{g_{(r)}}{r}$, o que tornará a equação mais

facilmente resolvível. Mostre que $\psi = \frac{N}{r} \text{sen}(k \cdot r)$, onde $k = \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}}$ e

$$E = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{8 \cdot m \cdot b^2}, n = 1, 2, 3, 4, \dots \text{ Use a função tentativa } \Phi = b - r, \text{ se } 0 \leq r \leq b \text{ e } \Phi = 0, \text{ se } r > b,$$

para estimar a energia do estado fundamental e compare o valor obtido com o verdadeiro. Calcule a porcentagem de erro na energia obtida.

2ª Questão: Escreva os determinantes de Slater para o estado fundamental e o primeiro estado excitado do Be.

3ª Questão: Calcule o valor da indução magnética (**B**) necessária para provocar a separação de $3,0 \text{ cm}^{-1}$ nos sinais espectroscópicos de estados atômicos do tipo 1P .

4ª Questão: Dê os possíveis termos para Sc: $[\text{Ar}] 3d^1 4s^2$ e Br: $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^5$. Coloque-os em ordem crescente de energia. Em seguida, esquematize a quebra da degenerescência devido a aplicação de um campo magnético.

Bom trabalho