

Nome: Felipe Firi IshizakaRA: 11031712Nome no TIDIA: Felipe Firi Justifique todas as passagens. Respostas sem justificativas não serão aceitas.1. Para a seguinte função de onda, $\Psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$.(a) Usando a condição de normalização, $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$, demonstre que a constante A é $(2\alpha/\pi)^{1/4}$. (1 ponto)(b) Usando essa função de onda $\Psi(x)$, e considerando o seguinte operador hamiltoniano, $H = -4 \frac{d^2}{dx^2} + 9x^2$.Calcule a energia E usando a definição do valor esperado do hamiltoniano:

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) H \Psi(x) dx. \quad (2 \text{ pontos})$$

(c) Calcule o valor mínimo da energia E . (2 pontos)

Dado: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-cx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}} ; \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-cx^2} dx = \frac{1}{2c} \sqrt{\frac{\pi}{c}}$

a) $\Psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |Ae^{-\alpha x^2}|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\alpha x^2} dx = 1$$

$$\Rightarrow A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = 1$$

1resolvendo a integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx$ temos (dado no exercício):

$$A^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1 \Rightarrow A^4 \cdot \frac{\pi}{2\alpha} = 1 \Rightarrow A^4 = \frac{2\alpha}{\pi} \Rightarrow A = \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}}$$

b) $H = -4 \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + 9x^2 = -4A\alpha^2 e^{-\alpha x^2} + 9x^2 A e^{-\alpha x^2}$

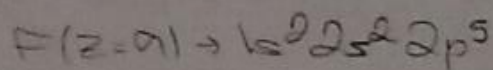
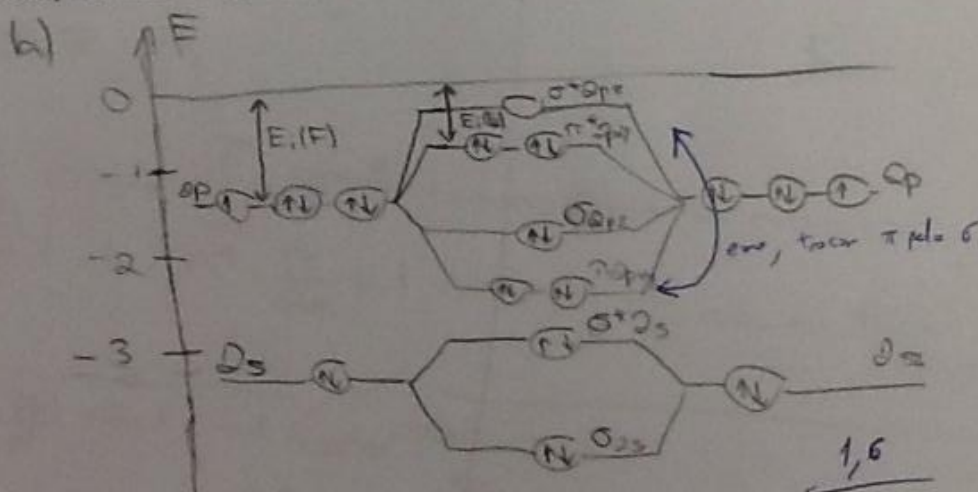
$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \cdot (-4A\alpha^2 e^{-\alpha x^2} + 9x^2 A e^{-\alpha x^2}) = \int_{-\infty}^{\infty} -4A^2 \alpha^2 e^{-2\alpha x^2} + 9x^2 A^2 e^{-2\alpha x^2} dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} -4A^2 \alpha^2 e^{-2\alpha x^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} 9x^2 A^2 e^{-2\alpha x^2} dx = -4A^2 \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx + 9A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx$$

2. Responda de forma clara e legível: explique o princípio de exclusão de Pauli e mencione por que esse princípio é importante no estudo da formação de moléculas. (2 pontos).

1,0
O princípio da exclusão de Pauli afirma que dois elétrons num átomo não podem ter todos os quatro números iguais. Por exemplo, se escolhermos um número particular de valores para n , l e m correspondente a um orbital particular, é possível ter apenas dois elétrons com valores diferentes do m -quântico de spin m_s ($s = 1/2$ ou $s = -1/2$). Isso limita a dois o número de elétrons num dado orbital e também que os spins desses dois elétrons estejam em direções opostas. Uma consequência desse princípio é que ajuda no estudo das moléculas e a elaboração estrutural das mesmas eletrônicas dos átomos e a maneira como eles partilham elétrons na formação de moléculas.

3. (a) Usando a teoria do orbital molecular, esquematize o diagrama de energia e determine a configuração eletrônica para a molécula de F_2 (2 pontos). (b) Discuta o comportamento magnético dessa molécula (para ou diamagnética)? (1 ponto).



(b) O spin total da F_2 é igual a zero, portanto ela é diamagnética. 1