

Oscilador Inarmônico

1) São conhecidos os dados de uma molécula,

Molécula	E_d / eV	r_0 / pm	μ / (10^{-26} kg)	f_0 / THz	n_{max}

2) É conhecido o equivalente mecânico para a constante elástica,

k / (N/m)

Para as questões (3) a (6) a seguir, considerar o primeiro auto-estado, $n = 1$.

3) Para o auto-estado $n = 1$, determinar a auto-energia E_1 .

$$E_1 = E_{0,1} - \frac{E_{0,1}^2}{4E_d}$$

4) Determinar a amplitude mínima de movimento, $r_{1,min}$, e a correspondente força elástica. Classificar essa força como atrativa ou repulsiva (o sinal algébrico é indicativo).

$$F_{el,min} = -k \cdot (r_{1,min} - r_0), \quad r_{1,min} = r_0 - \frac{1}{a} \ln \left(1 + \sqrt{\frac{E_1}{E_d}} \right)$$

5) Determinar a amplitude máxima de movimento, $r_{1,max}$, e a correspondente força elástica. Classificar a força como atrativa ou repulsiva (o sinal algébrico é indicativo).

$$F_{el,max} = -k \cdot (r_{1,max} - r_0), \quad r_{1,max} = r_0 - \frac{1}{a} \ln \left(1 - \sqrt{\frac{E_1}{E_d}} \right)$$

6) Comparar numericamente as duas forças (em módulo).

7) Para o auto-estado $n = 0$, determinar a auto-energia E_0 .

$$E_0 = E_{0,0} - \frac{E_{0,0}^2}{4E_d}$$

8) Caso a oscilação migre do auto-estado $n_i = 1$ para o auto-estado $n_f = 0$, qual é a frequência de radiação emitida (fóton)?

$$E_{01} = E_0 - E_1$$

ou

$$\frac{E_{01}}{E_d} = - \left[1 - \frac{\hbar\omega_0}{4E_d} \left(n_f + \frac{1}{2} \right) \right]^2 + \left[1 - \frac{\hbar\omega_0}{4E_d} \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \right]^2$$

daí

$$f = \frac{|E_{01}|}{h}$$

