

Notas de Aula de Física Quântica (BCK0103)

Prof. Dr. Marcelo Augusto Leigui de Oliveira

Física atômica II

I. QUANTIZAÇÃO DA ENERGIA

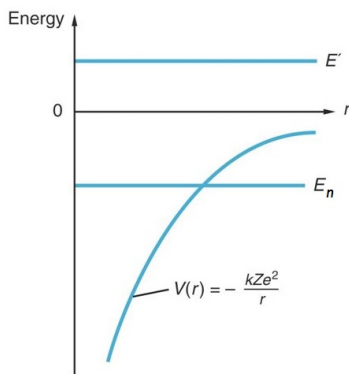


Figura 1: Energias de uma partícula num estado não-ligado E' ou num estado ligado E_n , sujeitas a um potencial coulombiano.

Seja o potencial coulombiano (conforme a figura 1):

$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r}.$$

O nível de energia positiva E' indica um estado de uma partícula não-ligada e o nível de energia E_n um estado ligado (com número quântico n).

Da parte radial da equação diferencial da equação (1) da aula passada:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \left[-k \frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r),$$

cujos valores permitidos são:

$$E_n = - \left(\frac{kZe^2}{\hbar} \right)^2 \frac{\mu}{2n^2} = - \frac{Z^2}{n^2} E_1, \text{ onde } n = 1, 2, 3, \dots \text{ e } l < n.$$

Note que:

$$E_1 = \frac{\mu k^2 e^4}{2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV}.$$

As soluções são: $R_{nl}(r) = A_{nl}e^{-r/na_0}r^l\mathcal{L}_{nl}(r/a_0)$, onde $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu ke^2}$ é o raio de Bohr e $\mathcal{L}_{nl}(r/a_0)$ são os *polinômios de Laguerre*:

$n = 1$	$l = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-r/a_0}$
$n = 2$	$l = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
	$l = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$
$n = 3$	$l = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}$
	$l = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{a_0}\left(1 - \frac{r}{6a_0}\right)e^{-r/3a_0}$
	$l = 2$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a_0^3}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}$

II. AS FUNÇÕES DE ONDA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = C_{nlm}R_{nl}(r)f_{lm}(\theta)g_m(\varphi),$$

com

- n : número quântico principal (quantização da energia): $n = 1, 2, 3, \dots$;
- l : número quântico orbital (quantização do momento angular): $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;
- m : número quântico magnético (quantização da projeção z do momento angular): $m = -l, -l + 1, \dots, l$.

1. O *estado fundamental* é o nível de energia $n = 1$, com um único valor possível de momento angular ($l = 0$) e uma única projeção z possível ($m = 0$). Como $l = 0$, a função de onda do estado é independente de θ e ϕ , isto é, tem simetria esférica. Em espectroscopia, os orbitais com $l = 0$ são chamados de *s (sharp)*. Assim, o estado fundamental é o orbital $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$):

$$\psi_{100} = C_{100}e^{-Zr/a_0},$$

onde C_{100} é determinada pela condição de normalização:

$$\int \psi^* \psi dV = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^* \psi r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1 \Rightarrow$$

$$C_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}, \text{ para } Z = 1.$$

2. O primeiro estado excitado é o nível de energia $n = 2$, com dois valores possíveis de momento angular:

- $l = 0$ (simetria esférica) e $m = 0$, o orbital $2s$ ($n = 2$, $l = 0$, $m = 0$):

$$\psi_{200} = C_{200} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

- $l = 1$ e $m = -1, 0, 1$, os orbitais $2p$ (*principal*).

→ com ($n = 2$, $l = 1$, $m = 0$):

$$\psi_{210} = C_{210} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$$

→ com ($n = 2$, $l = 1$, $m = \pm 1$):

$$\psi_{21\pm 1} = C_{21\pm 1} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \text{sen } \theta e^{\pm i\varphi}$$

3. O segundo estado excitado é o nível de energia $n = 3$, com três valores possíveis de momento angular:

- $l = 0$ (simetria esférica) e $m = 0$, o orbital $3s$ ($n = 3$, $l = 0$, $m = 0$):

$$\psi_{300} = C_{300} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2Z^2 r^2}{27a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

- $l = 1$ e $m = -1, 0, 1$, os orbitais $3p$:

→ com ($n = 3$, $l = 1$, $m = 0$):

$$\psi_{310} = C_{310} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) \left(1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$$

→ com ($n = 3$, $l = 1$, $m = \pm 1$):

$$\psi_{31\pm 1} = C_{31\pm 1} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) \left(1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-Zr/3a_0} \text{sen } \theta e^{\pm i\varphi}$$

- $l = 2$ e $m = -2, -1, 0, 1, 2$, os orbitais $3d$ (*diffuse*):

→ com ($n = 3$, $l = 2$, $m = 0$):

$$\psi_{320} = C_{320} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

→ com ($n = 3$, $l = 2$, $m = \pm 1$):

$$\psi_{32\pm 1} = C_{32\pm 1} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/3a_0} \text{sen } \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

→ com ($n = 3$, $l = 2$, $m = \pm 2$):

$$\psi_{32\pm 2} = C_{32\pm 2} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/3a_0} \text{sen}^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

4. O terceiro estado excitado é o nível de energia $n = 4$, com quatro valores possíveis de momento angular: o orbital $4s$, com $l = 0$ (simetria esférica) e $m = 0$, os orbitais $4p$, com $l = 1$ e $m = -1, 0, 1$, os orbitais $4d$, com $l = 2$ e $m = -2, -1, 0, 1, 2$ e os orbitais $4f$ (*fundamental*), com $l = 3$ e $m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$;
5. etc.

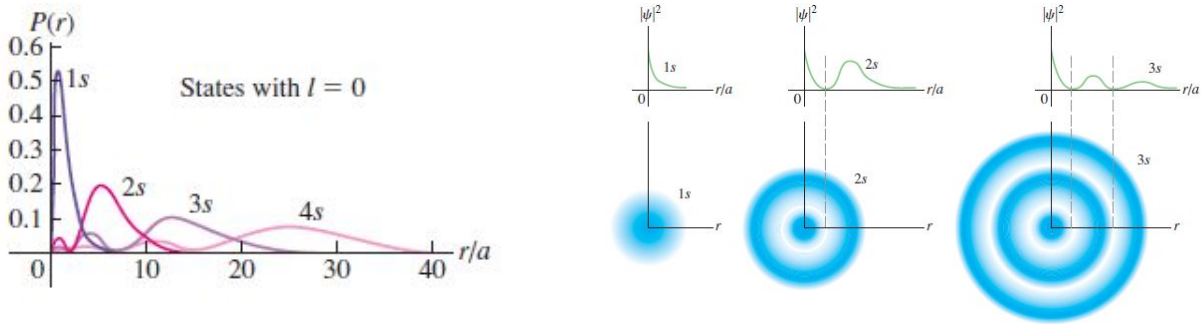


Figura 2: Funções de distribuição de probabilidade $|\psi|^2$ para os orbitais s (estados com $l = 0$).

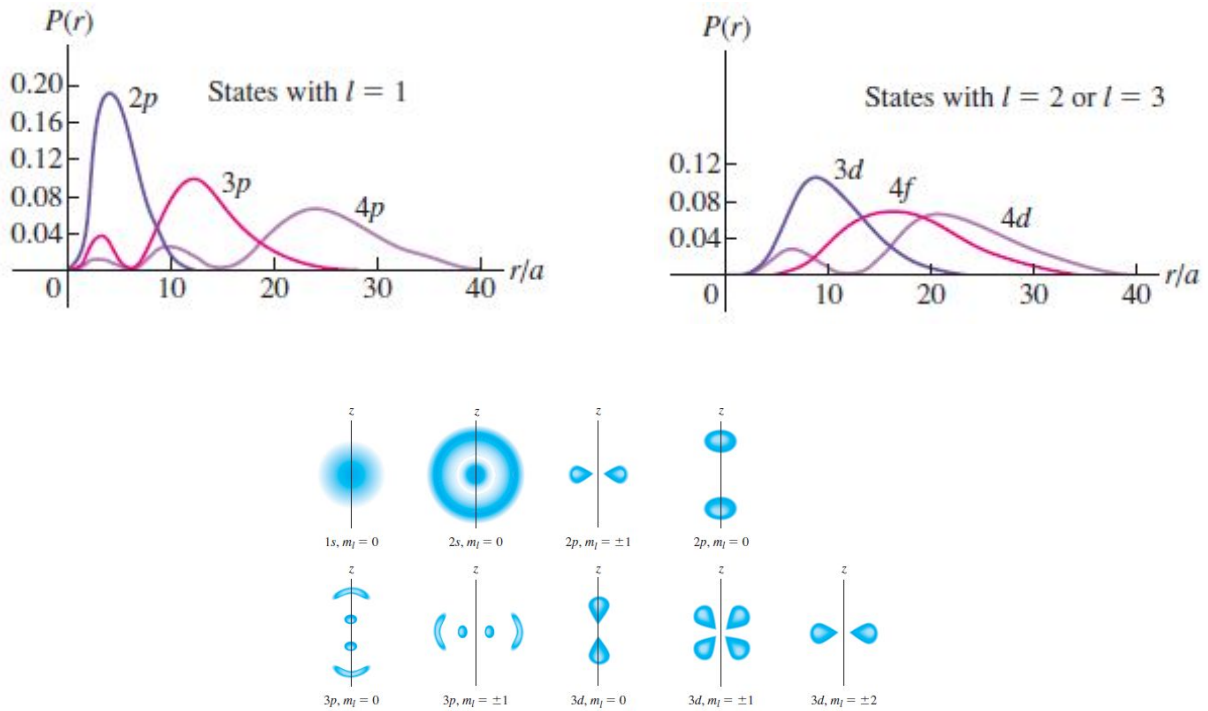


Figura 3: Funções de distribuição de probabilidade $|\psi|^2$ para diversos orbitais: s, p, d, f .

III. EXERCÍCIOS

- Para o átomo de hidrogênio no estado fundamental, determine:
 - A probabilidade de encontrar o elétron no intervalo $\Delta r = 0,02 a_0$ com centro em $r = a_0$;
 - A probabilidade de encontrar o elétron no intervalo $\Delta r = 0,02 a_0$ com centro em $r = 2a_0$;
 - O valor médio da distância elétron-núcleo em termos de a_0 .
- Considere que as autofunções da equação de Schrödinger para um elétron num átomo tipo hidrogênio são dadas por: $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$; e que os autovalores de energia, E_n , são calculados levando-se em conta apenas o potencial coulombiano.
 - Quantas órbitas existem para a energia E_2 (nível $n = 2$);
 - Considerando o spin do elétron, quantos estados existem para o nível $n = 2$?
 - Para o orbital cuja função radial é:

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0},$$

determine o raio mais provável do átomo, isto é, a distância mais provável entre o elétron e o núcleo. Dica: use para a probabilidade na direção radial $P_{nl} = R_{nl}^2 r^2$.

Respostas:

- 0,0107;
 - 0,0059;
 - $\langle r \rangle = 3a_0/2$.
- 4;
 - 8;
 - $4a_0$.