

Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

Função de Onda,
Equação de Schrödinger

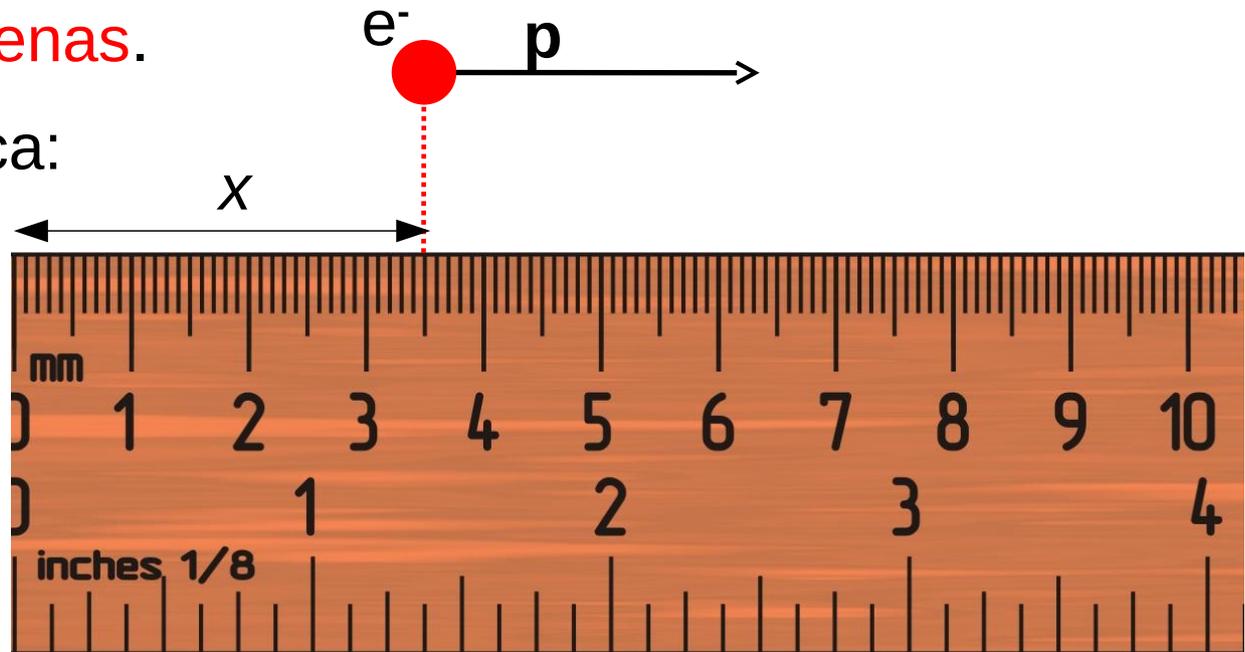
<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Estrutura.html>

O Princípio de incerteza de Heisenberg

Quando experimentos são realizados, o experimentador sempre se depara com **incertezas experimentais** nas medidas.

A **Mecânica Clássica** permite que sejam realizados experimentos com **incertezas** experimentais arbitrárias **muito pequenas**.

Uma pergunta filosófica:
É possível conhecer as características de um objeto (partícula) com precisão absoluta?



O Princípio de incerteza de Heisenberg

Por outro lado, a **Mecânica Quântica** prediz que a barreira para medidas com **incertezas desprezíveis não** existe.

Em 1927, Heisenberg introduziu o **Princípio da Incerteza**: Se uma medida da posição de uma partícula for realizada com precisão Δx e uma medida simultânea do momento linear é feita com precisão Δp , então o produto das duas incertezas não pode nunca ser menor que $h/4\pi$, ou $\hbar/2$.



$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

É fisicamente impossível medir simultaneamente a posição exata e o momento linear exato de uma partícula.

Quanto melhor é medido um dos dois, tanto menos bem medido é o outro.

O Princípio de incerteza de Heisenberg

Mais exatamente, há uma **relação** de **incerteza** para **cada coordenada**:

$$\begin{aligned}\Delta p_x \Delta x &\geq \frac{1}{2}\hbar, \\ \Delta p_y \Delta y &\geq \frac{1}{2}\hbar, \\ \Delta p_z \Delta z &\geq \frac{1}{2}\hbar.\end{aligned}$$

Ou seja: É fisicamente impossível medir simultaneamente a coordenada x da posição e a coordenada x do momento linear de uma partícula.

Idem para as coordenadas y e z .

O Princípio de incerteza de Heisenberg

Uma relação equivalente existe também entre **energia** (p. e. a energia de um estado de um átomo) e **tempo** (p. e. o tempo de vida do estado):

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Quanto **maior** a **vida média** de um estado de energia, **menor** é a **largura** de seu estado.



e entre outros pares de grandezas.

O Princípio de incerteza de Heisenberg

Conclusão:

Não é apropriado imaginar o elétron movendo-se ao redor do núcleo em órbita bem definida.

Vamos precisar de um **novo modelo** atômico.

Mecânica Quântica

Estudo do comportamento e das leis do movimento para partículas microscópicas

Antecedentes

Teoria da quantização da energia (M. Planck): $E = h \cdot \nu$

Dualidade onda-partícula (L. de Broglie): $\lambda = h / p$

Princípio de incerteza (Heisenberg): $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$, $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$

Energias de Bohr: $E_n = -(Z^2/n^2) \cdot E_0$

Se o elétron é uma onda, qual é esta onda?

Voltando pro **princípio de incerteza**: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

=> A posição de uma partícula não é definida com precisão.

Ela se encontra com certa **probabilidade** no lugar \mathbf{x}_1 , com certa probabilidade no lugar \mathbf{x}_2 , etc.

A **probabilidade** de **estadia** da partícula **depende** da **posição** $\mathbf{x} = (x, y, z)$.

Ela é descrita por uma função, que depende da posição, a **função de onda** $\psi(\mathbf{x})$ (letra grega psi minúscula).

A Função de Onda

A função de onda é **complexa**, quer dizer os valores dela têm uma parte real e uma parte imaginária.

A **probabilidade** de encontrar a partícula entre as posições \mathbf{x} e $\mathbf{x}+d\mathbf{x} = (x+dx, y+dy, z+dz)$, $P(\mathbf{x})d\mathbf{x}$, é dada pelo **quadrado do módulo da função de onda**:

$$P(\mathbf{x})d\mathbf{x} = |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x},$$

onde $\psi(\mathbf{x})^*$ é a complexamente conjugada de $\psi(\mathbf{x})$.

Integrada (somada) sobre o **espaço inteiro**, a probabilidade de estadia da partícula tem que ser **1** (a partícula tem que estar em algum lugar):

Normalização da função de onda:

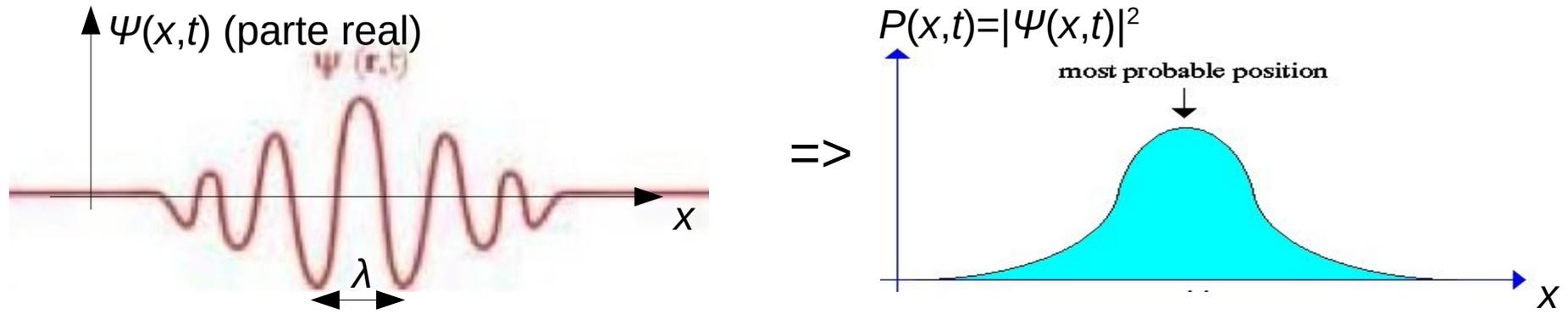
$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}, = 1$$

Como a distribuição da probabilidade de estadia da partícula pode mudar com o tempo, em geral a função de onda também depende do tempo (psi maiúsculo):

$$\Psi(\mathbf{x},t), \quad P(\mathbf{x},t)d\mathbf{x} = |\Psi(\mathbf{x},t)|^2 d\mathbf{x}$$

A Função de Onda

Exemplo de uma função de onda e a distribuição de probabilidade correspondente

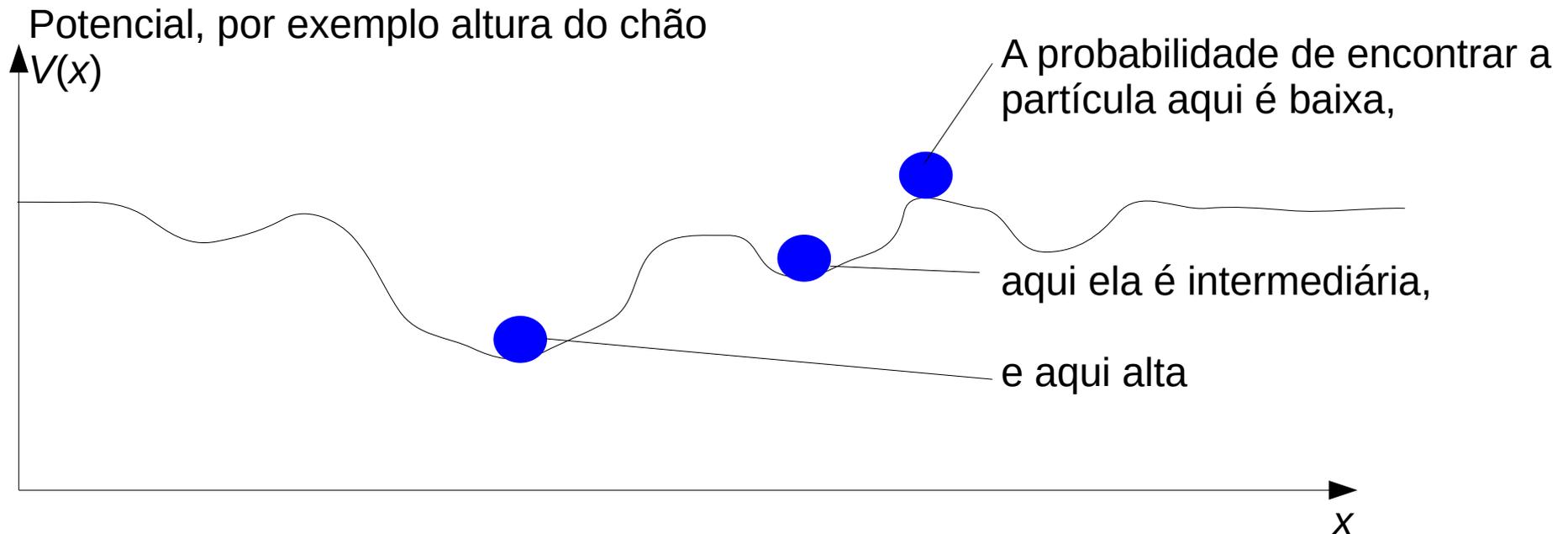


Neste caso, os máximos e mínimos da parte real da função de onda coincidem com os pontos zero da parte imaginária, e vice-versa. Como a distribuição de probabilidade é a soma dos quadrados das partes real e imaginária, os mínimos e máximos não aparecem na distribuição de probabilidade.

Todos os **fenômenos quânticos** que já conhecemos, a quantização da energia, a dualidade onda-partícula, o princípio de incerteza, etc., **podem ser deduzidos a partir das propriedades das funções de onda.**

Como determinar a função de onda?

Física Clássica



A **probabilidade** de encontrar a partícula numa dada posição x depende do **potencial** naquela posição, $V(x)$.

O **potencial** $V(x)$ é a **energia potencial** que a partícula teria na **posição** x . Ele é uma função da posição e tem um valor mesmo sem que a partícula se encontre lá.

Como determinar a função de onda?

Física Quântica

Na física quântica também:

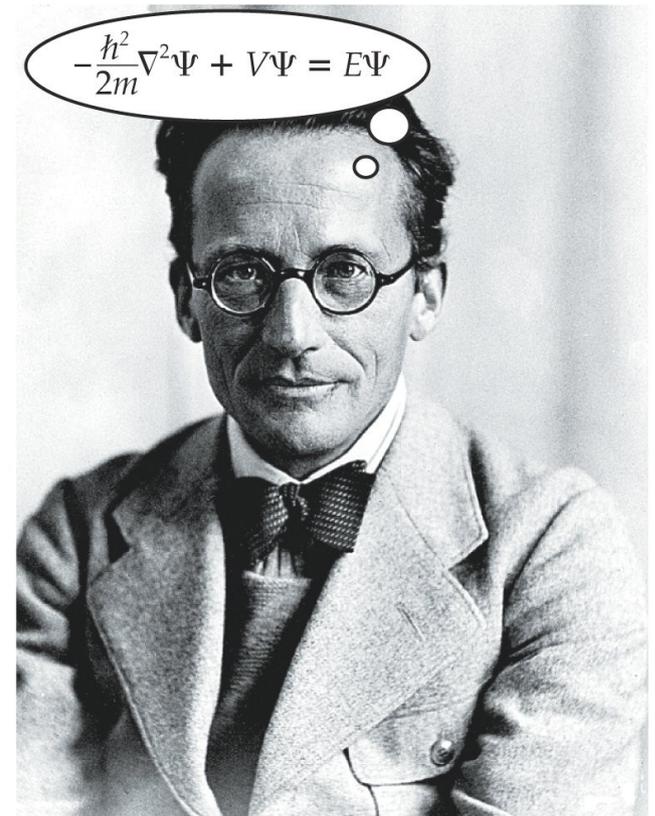
A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição \mathbf{x} , e então, **a função de onda $\psi(\mathbf{x})$, depende do potencial $V(\mathbf{x})$.**

Esta dependência é dada pela **Equação de Schrödinger (1925)**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

onde m é a massa da partícula, e E é uma constante. Pode se mostrar que E é a **energia** da partícula.

Uma função de onda corresponde a uma certa energia.



Erwin Schrödinger

A Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Isto é a equação de Schrödinger **independente do tempo**, que vale quando $V(x)$, e, então, $\psi(x)$ não variam com o tempo.

Para o caso independente do tempo, **frequentemente** é possível encontrar soluções, q. d. **funções de onda, reais** (sem parte imaginária).

Da mesma maneira que a equação $7+x = 13$ serve para determinar a incógnita x , **a equação de Schrödinger serve para determinar uma função incógnita, a função de onda $\psi(x)$ e a energia correspondente E , quando o potencial $V(x)$ é dado.**

Procura-se **pares função de onda - energia** que **satisfazem** esta equação.

A Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

A Equação de Schrödinger relaciona a função procurada $\psi(\mathbf{x})$ com a sua (segunda) **derivada** $d^2\psi(\mathbf{x})/d\mathbf{x}^2$.

Uma equação deste tipo é chamada **equação diferencial**, e existem métodos para resolver equações deste tipo, em alguns casos simples.

=> Quando se sabe o potencial $V(\mathbf{x})$ (por exemplo o potencial elétrico) de uma partícula em função da sua posição \mathbf{x} , pode-se determinar, usando a equação de Schrödinger, a função de onda $\psi(\mathbf{x})$ e, então, a função probabilidade de estadia $P(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$ da partícula.

A Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Normalmente, há **mais** de uma solução $\psi_i(\mathbf{x})$, $i = 1, \dots$
Isto significa que existem várias funções de onda possíveis,
(análogo às diferentes órbitas no átomo de Bohr).
Cada função de onda ψ_i tem seu própria valor de energia E_i .

Quando as **energias** de duas funções de onda, $\psi_i(\mathbf{x})$ e $\psi_j(\mathbf{x})$, onde $i \neq j$, são **iguais**, $E_i = E_j$, se diz que este nível de energia é **degenerado**.

A Equação de Schrödinger é **linear** nos ψ com a **mesma energia**, o que significa que, se as funções de onda ψ_1 e ψ_2 são soluções (satisfazem a equação) correspondendo à mesma energia, $E_1 = E_2$, então $a \cdot \psi_1 + b \cdot \psi_2$, onde a e b são constantes, também é uma solução correspondendo à mesma energia, $E = E_1 = E_2$.

O Poço Quadrado Infinito

$V(x) = 0$ para $0 < x < L$ (região II),
 ∞ para $x < 0$ ou $x > L$ (regiões I e III).

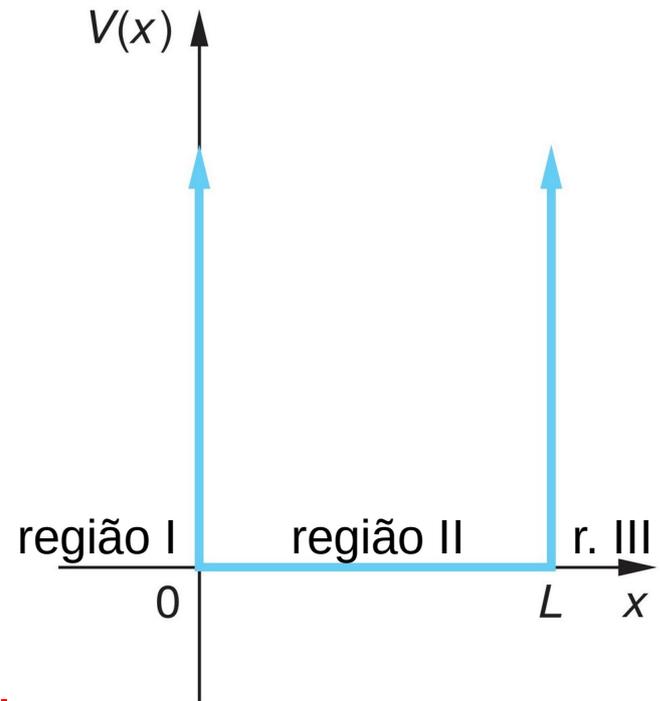
É razoavelmente bem realizado no caso de um elétron preso entre grades carregadas negativamente, elétrons presos num metal, e outros casos.

Caso clássico

- $E > 0$: Partícula movimentando-se **ida e volta** entre $x = 0$ e $x = L$ com **velocidade constante**, $v = \pm\sqrt{2E/m}$, sendo refletida nas paredes do poço.

A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição é igual em todas as posições dentro do poço, já que, durante uma ida e volta, ela passa por todos os lugares duas vezes e com a mesma velocidade.

- $E < 0$: Impossível



O Poço Quadrado Infinito

No caso **quântico**, a **função de onda** deve ser **zero fora do poço** (o elétron não pode se encontrar lá) e nas **"paredes"**, $x = 0$ e $x = L$.
 \Rightarrow **Condições de contorno**

Resolvendo a Equação de Schrödinger para este potencial (\Rightarrow disciplina Física Quântica) vemos que as **soluções** são **ondas estacionárias** que se **encaixam** entre as **paredes**

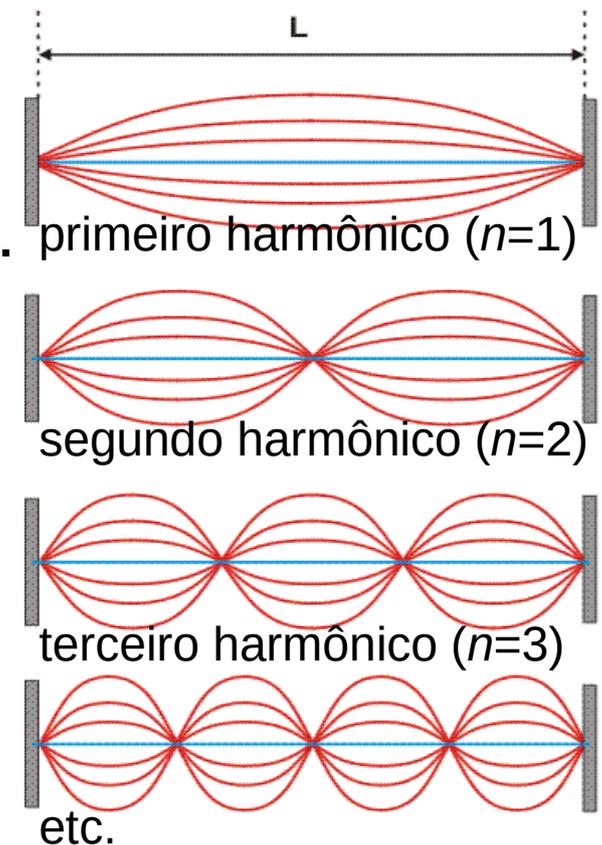
$$\Rightarrow L = n\lambda/2 \Rightarrow \lambda = nL/2,$$

onde n é um número inteiro que **caracteriza** uma dada solução, a n -ésima solução e chamamos de **número quântico**.

A **função de onda** da n -ésima solução é:

$$\psi_n(x) = A \cdot \sin n\pi x/L \quad (\text{entre } x = 0 \text{ e } x = L)$$

e a **energia** correspondente, $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2 \Rightarrow$ **quantizada!**



O Poço Quadrado Infinito

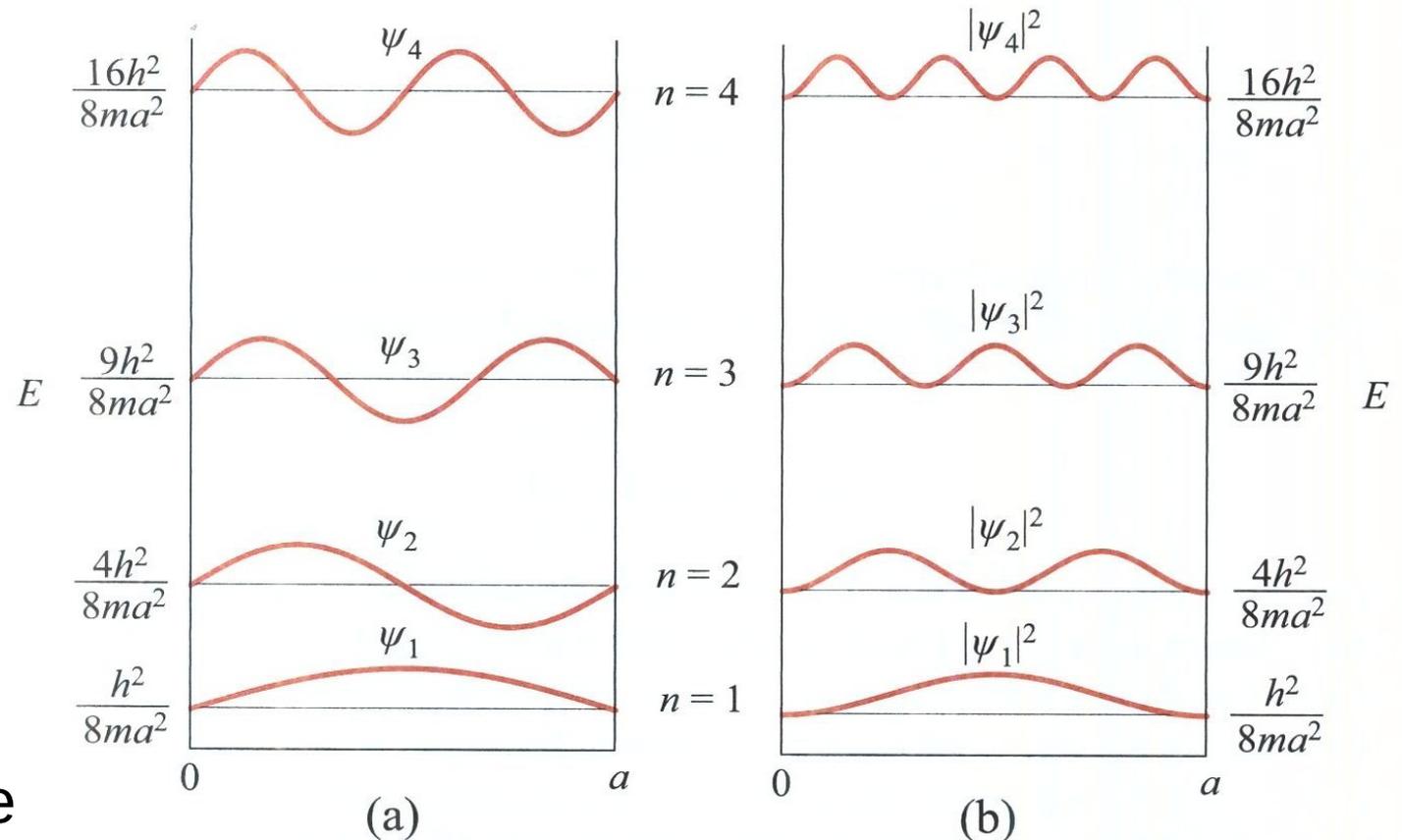
As funções de onda e as correspondentes distribuições de probabilidade de estadia

$$P_n(x) = |\psi_n(x)|^2$$

dentro de um diagrama de energias

(maneira frequente de visualizar de

soluções na mecânica quântica: Tudo na mesma figura: Potencial, energias e funções de onda das soluções).



Em geral, em **problemas 3D** temos **três números quânticos**.

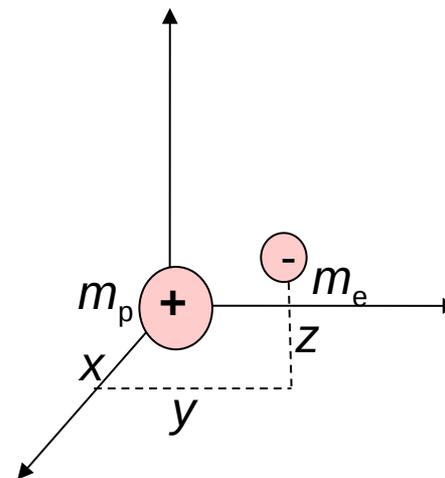
O Átomo de Hidrogênio

Um problema que pode ser resolvido usando a equação de Schrödinger é aquele de encontrar a **função de onda do elétron num átomo de hidrogênio** (ou de um outro átomo com um só elétron, chamado hidrogenóide).

Como a massa do núcleo é muito maior do que aquela do elétron, o **núcleo** pode ser tido como **parado no ponto zero** do sistema de coordenadas, e o nosso problema vira:

Achar a função de onda do elétron no potencial devido ao núcleo, e assim determinar

a **probabilidade** de encontrar o elétron na posição (x, y, z) para **cada posição** (x, y, z) .



A Equação de Schrödinger coordenadas esfericas

Às vezes é útil usar **coordenadas esféricas**, i. e. quando o **potencial** é devido a uma **força central**, isto é, o potencial depende apenas da distância até a origem (no caso, o núcleo), ou seja, ele é **esfericamente simétrico**,
 $V(\mathbf{r}) = V(r) = V(\sqrt{x^2+y^2+z^2})$:

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$\theta = \cos^{-1} z/r = \cos^{-1} z/\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

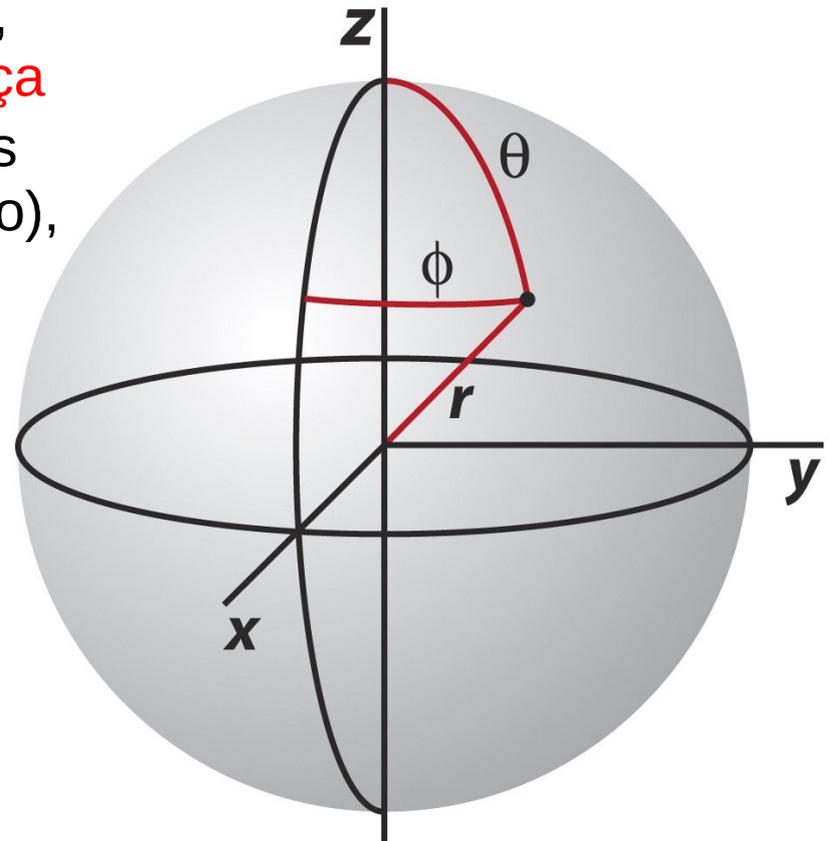
$$\varphi = \tan^{-1} y/x$$

transformação inversa:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$



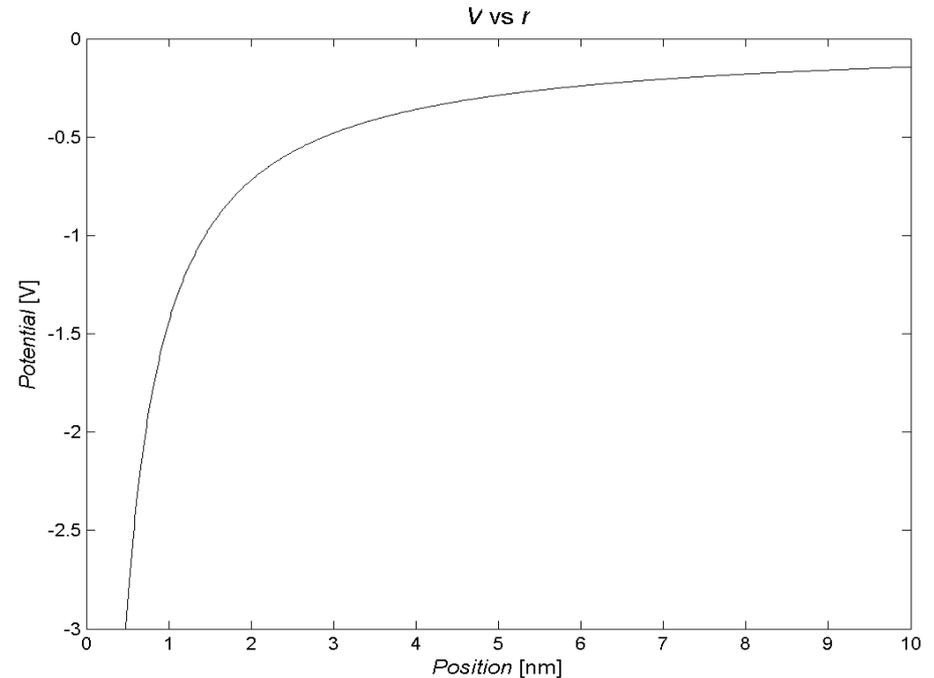
O Átomo de Hidrogênio

O potencial do elétron num átomo de hidrogênio (ou outro hidrogenóide) é justamente desta forma (esfericamente simétrico). Se trata do **potencial elétrico** (de Coulomb) que é dado pela **distância** entre as duas cargas, isto é, **entre o núcleo e o elétron**, $r = |\mathbf{x}|$:

$$V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$$

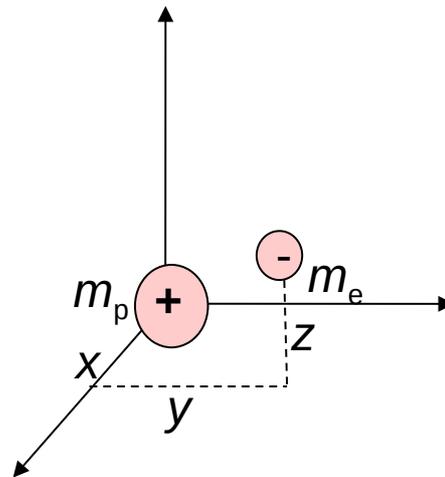
Se o **elétron** tem uma **energia a baixo de 0**, ele **não** consegue **escapar** à atração do núcleo.

O potencial de Coulomb do núcleo apresenta um tipo de **poço de potencial** para ele (condições de contorno) e teremos fenômenos similares ao exemplo do poço quadrado infinito:
=> **ondas estacionárias** e **estados quantizados**.



O Átomo de Hidrogênio

Então substituímos na Equação de Schrödinger as coordenadas cartesianas (x, y, z)

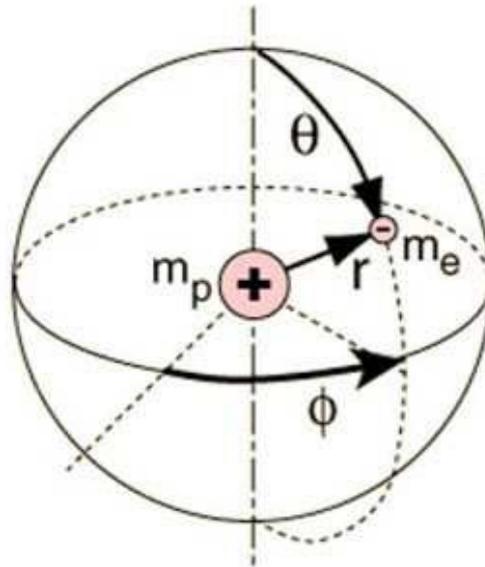


O Átomo de Hidrogênio

Então **substituímos** na **Equação de Schrödinger** as **coordenadas cartesianas** (x, y, z) por **coordenadas esféricas**, e nosso problema vira:

Achar a função de onda $\psi(r, \theta, \varphi)$ do elétron no potencial devido ao núcleo, $V(r, \theta, \varphi) = V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ e assim determinar a **probabilidade** de encontrar o elétron na posição (r, θ, φ) para **cada posição** (r, θ, φ) .

! Enquanto V não depende de θ e φ , ψ pode, sim, depender das coordenadas angulares.



O Átomo de Hidrogênio

Agora o problema é **resolver a equação de Schrödinger** para este potencial, ou seja, **encontrar as funções de onda ψ** com as **energias** correspondentes E que satisfazem:

$$-\hbar^2/2m \cdot \nabla^2\psi(r, \theta, \varphi) + Ze^2/4\pi\epsilon_0 r \cdot \psi(r, \theta, \varphi) = E \cdot \psi(r, \theta, \varphi)$$

Após alguns passos de matemática complicada, encontra-se que as soluções, as **funções de onda** do **elétron**, são da forma

$$\psi(r, \theta, \varphi) := \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi), \text{ onde}$$

$R_{nl}(r)$ **depende só** de r ,

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (= harmônicas esféricas) **só depende** de θ e φ ,

n, l, m são **números quânticos**, que caracterizam as funções de onda:

$n = 1, 2, 3, \dots$: número quântico **principal**

$l = 0, 1, \dots, n-1$: número quântico **orbital**, do **momento angular**,
ou **secundário**

m (ou m_l) = $-l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$: número quântico **magnético**

O Átomo de Hidrogênio

Tabela 1. Relação entre os valores permitidos para os números quânticos n , l e m_l , até $n = 3$.

n	Valores permitidos para l	Valores permitidos para m_l	Função de onda correspondente Ψ_{n,l,m_l}
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$
		-1	$\Psi_{2,1,-1}$
	1	0	$\Psi_{2,1,0}$
		1	$\Psi_{2,1,1}$
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$
		-1	$\Psi_{3,1,-1}$
	1	0	$\Psi_{3,1,0}$
		1	$\Psi_{3,1,1}$
		-2	$\Psi_{3,2,-2}$
		-1	$\Psi_{3,2,-1}$
	2	0	$\Psi_{3,2,0}$
		1	$\Psi_{3,2,1}$
		2	$\Psi_{3,2,2}$

O Átomo de Hidrogênio

(a) Radial wavefunctions, $R_{nl}(r)$			(b) Angular wavefunctions, $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$		
n	l	$R_{nl}(r)$	l	" m_l "*	$Y_{lm_l}(\theta, \phi)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$	1	x	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$
	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$		y	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$
3	0	$\frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(3 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-Zr/3a_0}$	2	z	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
	1	$\frac{2}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}$		xy	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$
	2	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$		yz	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \sin \phi$
				zx	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta \cos \phi$
				$x^2 - y^2$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$
				z^2	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$

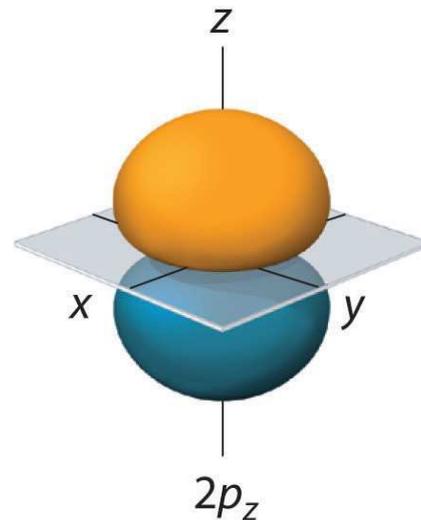
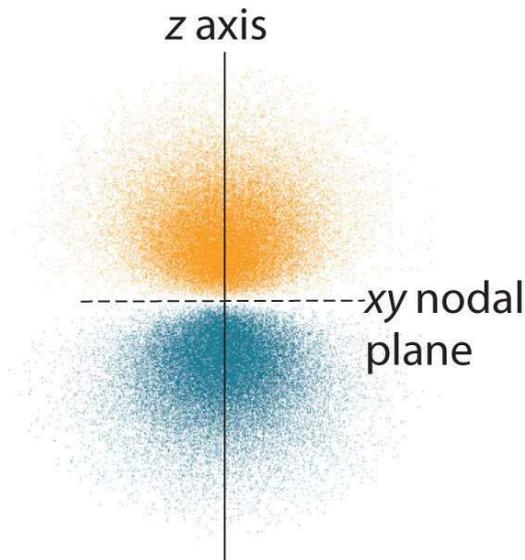
O Átomo de Hidrogênio

As funções **probabilidade** de **estadia** do elétron P_{nlm} que correspondem às soluções n, l, m_l ,

$$P_{nlm}(r, \theta, \varphi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 \quad \text{ou} \quad P_{nlm}(x, y, z) = |\psi_{nlm}(x, y, z)|^2$$

são chamadas **orbitais**, e são o análogo quanto-mecânico das órbitas dos elétrons.

Há diferentes maneiras para visualizar um orbital.



O Átomo de Hidrogênio

Como Interpretar a parte **radial**,

$$R_{nl}(r) = a_0/Zr \cdot e^{-Zr/a_0n} L_{nl}(Zr/a_0)?$$

Gráficos das partes radiais das funções de onda com $n = 1, 2$ e 3

Fórmulas das partes radiais das funções de onda com $n = 1, 2$ e 3

$$R_{10} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

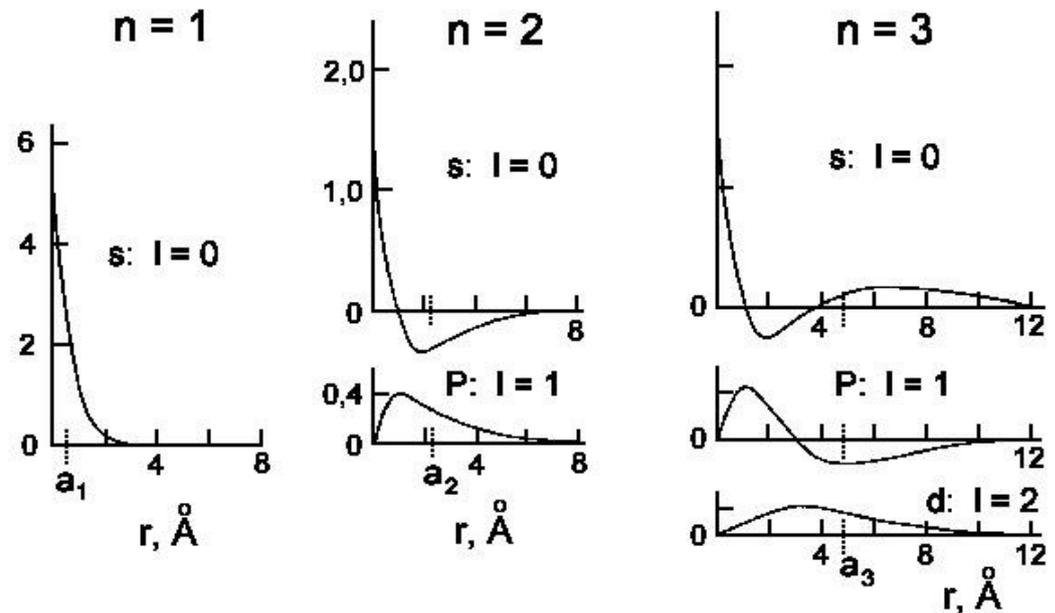
$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{20} = 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{32} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{31} = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) \left(1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{30} = 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$



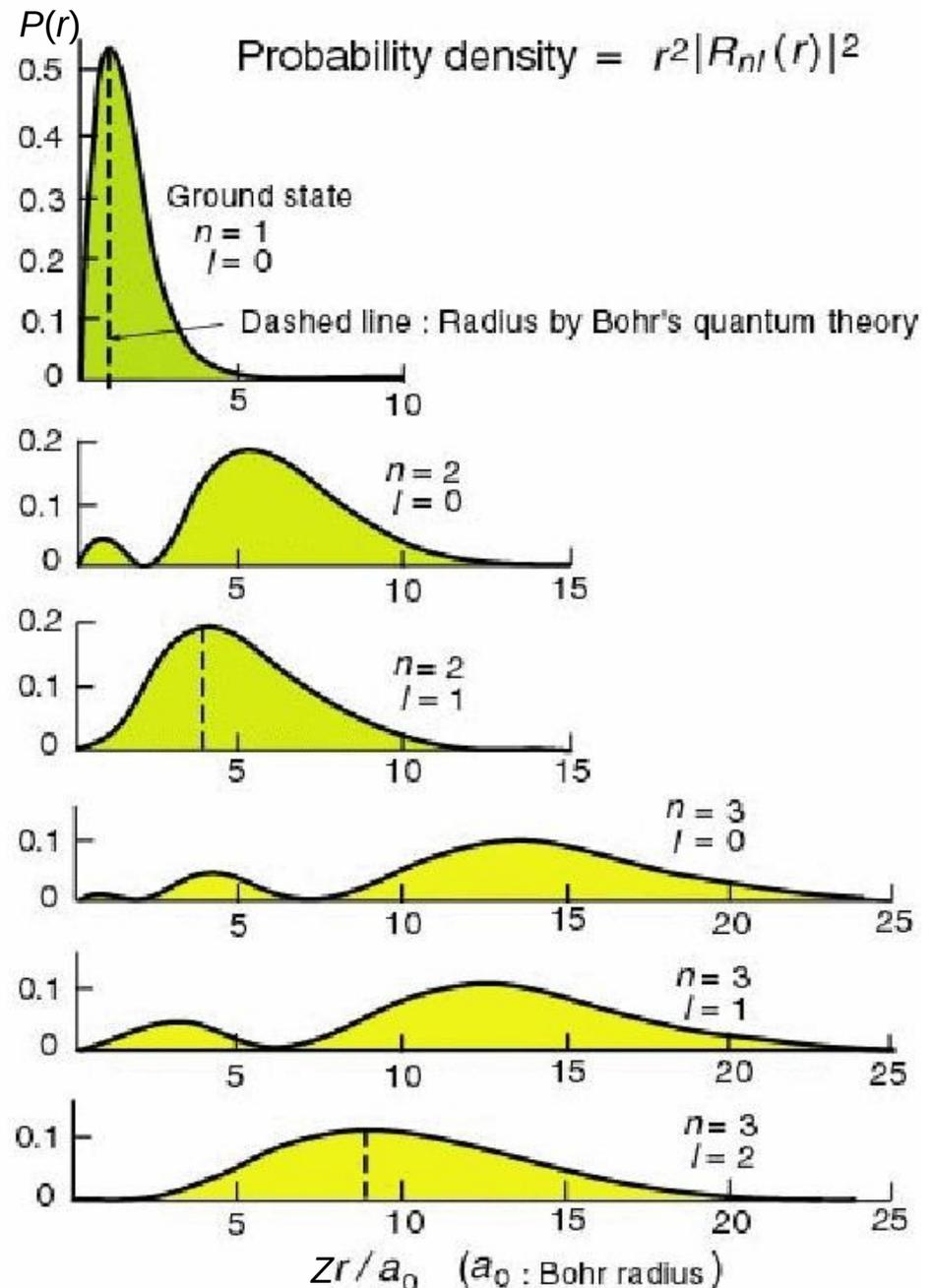
O Átomo de Hidrogênio

Como Interpretar a parte **radial**,
 $R_{nl}(r) = a_0/Zr \cdot e^{-Zr/a_0n} L_{nl}(Zr/a_0)$?

! $P(r) = 4\pi r^2 \cdot P(\mathbf{x})$ prop. $r^2 |R_{nl}(r)|^2$,
Já que $P(\mathbf{x})$ é a probabilidade de estadia num único ponto \mathbf{x} , e $P(r)$ é a probabilidade somada sobre todos os pontos na distância r .

n dá uma dica do **tamanho** do orbital, o valor esperado para r , $\langle r_{nl} \rangle$ é da ordem de $n^2 a_0/Z$, o que condiz com o fato, que n quantifica a **energia** do orbital.

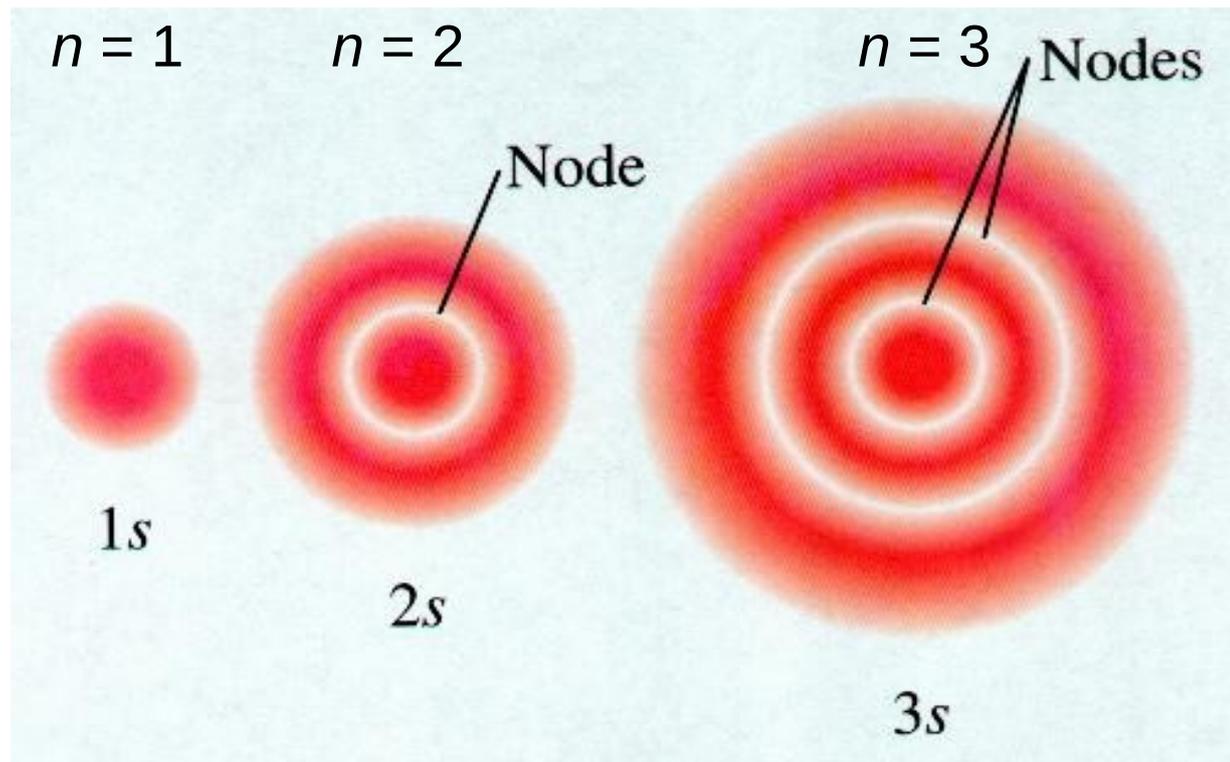
A distribuição tem $n-l$ máximos em r e $n-l-1$ pontos zero, “nós” (tirando aquele em $r = 0$).



O Átomo de Hidrogênio

Isto é, num dado orbital, há distâncias nucleo-cêntricos, naquelas o elétron não pode se encontrar.

Exemplo: Os três orbitais s (esfericamente simétricas, $l = m = 0$) de mais baixa energia ($n = 1, 2, 3$)



O Átomo de Hidrogênio

E a parte **angular**, $Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{lm}(\theta)g_m(\varphi)$?

Fórmulas das partes angulares das funções de onda com $l = 0, 1$ e 2 (das harmônicas esféricas)

$$\bullet Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$$

$$\bullet Y_{10}(\theta, \phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$$

$$\bullet Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} e^{\pm i\phi} \sin\theta$$

$$\bullet Y_{20}(\theta, \phi) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$\bullet Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} e^{\pm i\phi} \sin\theta \cos\theta$$

$$\bullet Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} e^{\pm 2i\phi} \sin^2\theta$$

Gráficos das partes angulares das funções de onda com $l = 0, 1$ e 2 (vermelho: valores positivos, azul: valores negativos)



$l = 0 \ m = 0$



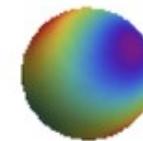
$l = 1 \ m = 0$



$l = 1 \ m = 1$



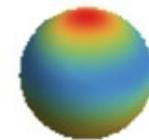
$l = 2 \ m = 0$



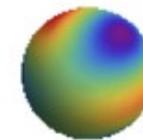
$l = 2 \ m = 1$



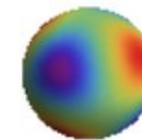
$l = 2 \ m = 2$



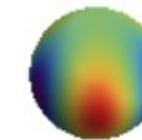
$l = 3 \ m = 0$



$l = 3 \ m = 1$



$l = 3 \ m = 2$



$l = 3 \ m = 3$

O Átomo de Hidrogênio

E a parte **angular**, $Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{lm}(\theta)g_m(\varphi)$?

Pelo fato, que $|g(\varphi)|^2 = 1$ e não importa no cálculo de $P(\mathbf{r})$, os orbitais têm **simetria rotacional** em torno do eixo z.

Os orbitais dependem apenas do módulo e não do sinal de m , q. d., os orbitais ψ_{nlm} e ψ_{nl-m} são iguais (mas as funções de onda, não!).

Orbitais com $l = 0$ (e, então $m = 0$ também) são **esfericamente simétricos**, e são chamados orbitais **s**.

Para um dado l , quanto **maior** é $|m|$, tanto mais **achatado** é o orbital, isto é, tanto mais concentrado perto do plano xy, para $m = 0$, o orbital se concentra perto do **eixo z**.

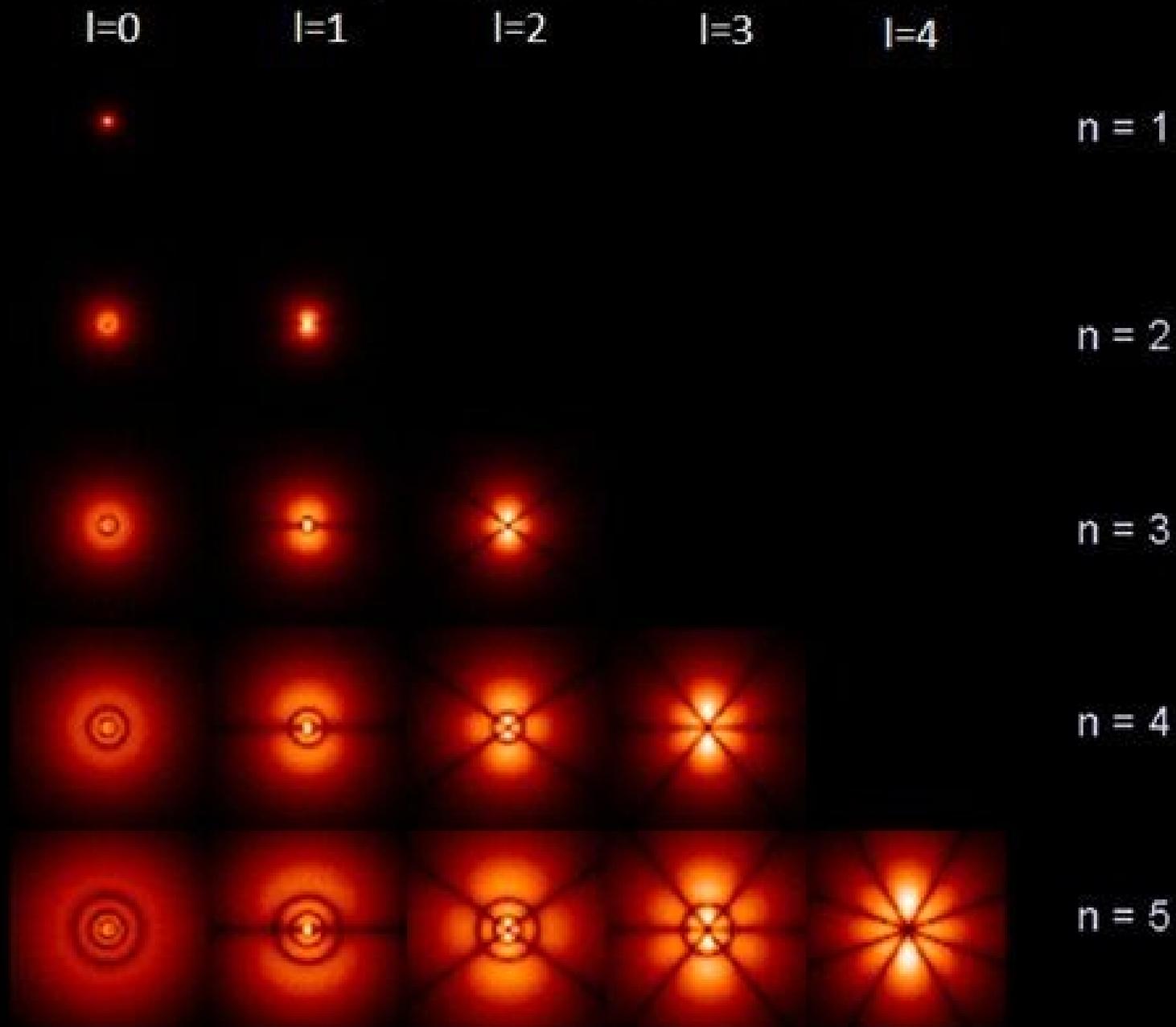
l mede o **momento angular** do orbital, e m , o **componente z** do momento angular.

O Átomo de Hidrogênio

Combinando as partes radial e angular
 => As funções de onda completas

n	l	m_l	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$
3	1	± 1	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$

Hydrogen atom orbitals $m = 0$



O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

1. o número quântico principal n

$n = 1, 2, 3, \dots$: determina a **energia** do elétron: $E_n = -(Z^2/n^2) \cdot E_0$, onde E_0 = energia de Bohr.

As energias do Átomo de Hidrogênio mecanico-quântico são as mesmas do que no modelo de Bohr! Ainda bem, senão a mecânica quântica não conseguiria explicar o espectro de hidrogênio.

Anotem que são valores negativos, por se tratar de estados ligados.

Todas as funções de onda com o **mesmo n** têm a **mesma energia E_n** (são n^2).

O conjunto das funções de onda com o mesmo n é se chama **camada eletrônica**, designadas por letras.

n	1	2	3	4	5	...
camada	K	L	M	N	O	...

Exemplo:

Se diz que um elétron com $n = 3$ encontra-se na camada M.

O Átomo de Hidrogênio

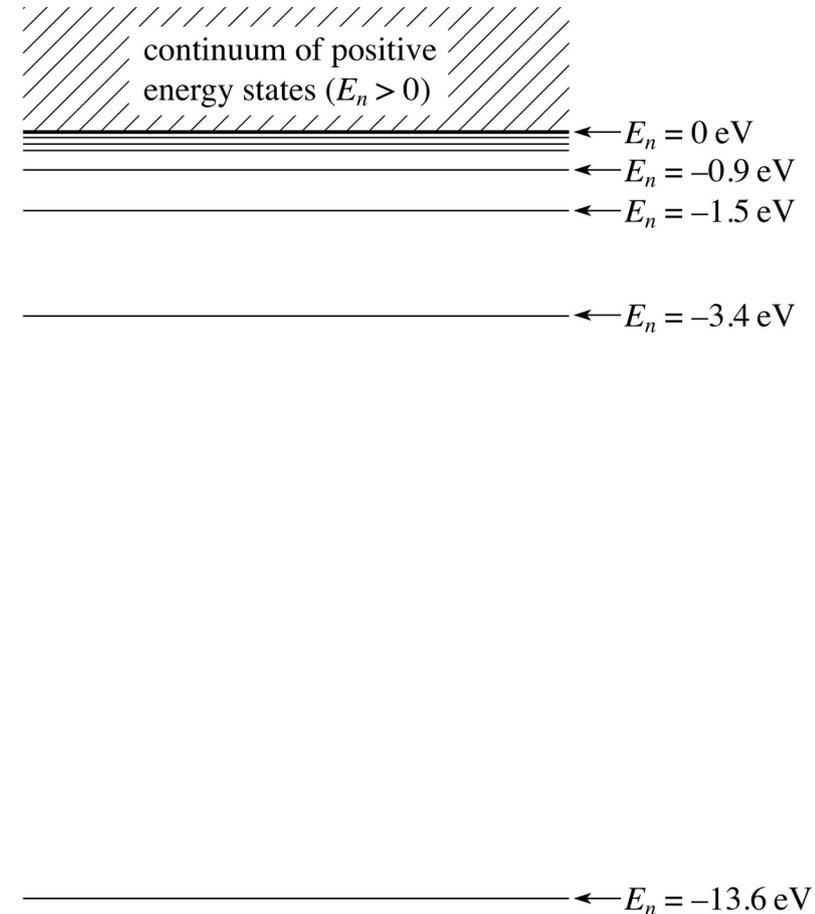
O que significam os números quânticos?

1. o número quântico principal n

$n = 1$: Estado fundamental
(de mais baixa energia, naquele o elétron se encontra normalmente)

Já que $E_n \propto -1/n^2$,
a energia aumenta
e o espaçamento entre níveis diminui
quando n aumenta.
Os dois tendem a zero para $n \rightarrow \infty$.

Estados com o mesmo n , e portanto,
com a mesma energia,
são chamados estados degenerados.



O Átomo de Hidrogênio

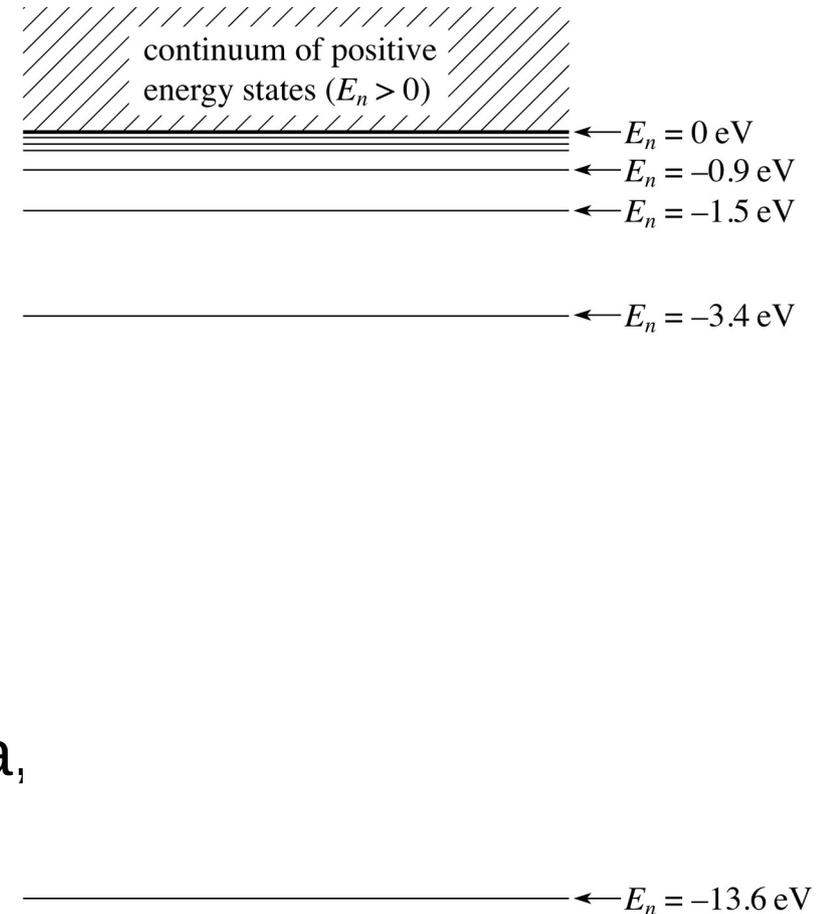
O que significam os números quânticos?

1. o número quântico principal n

O átomo pode fazer uma transição entre níveis absorvendo ou emitindo energia (i.e. na forma de um fóton), onde a energia absorvida ou emitida é igual à diferença de energia entre os dois níveis.

Se chama uma transição destes de excitação ou desexcitação.

Se o elétron adquire mais energia que o módulo da energia (negativa) que ele tinha, assim tornando sua energia positiva, ele é ejetado do átomo, processo chamado ionização.



O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

1. o número quântico principal n

n também é uma medida para a distância média $\langle r \rangle$ entre o elétron e o núcleo.

Esta é da ordem de $r_n = (n^2/Z) \cdot r_1$,

onde $r_1 =$ raio de Bohr

As distâncias médias que os elétrons no Átomo de Hidrogênio mecanico-quântico têm do núcleo são da ordem dos raios das órbitas no modelo de Bohr!

O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

2. o número quântico do momento angular, ou secundário, l

$l = 0, 1, \dots, n-1$: determina o **momento angular** orbital do elétron:

$L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$, onde \hbar = constante de Planck reduzida

São quase os valores de Bohr, mas ao contrário do modelo de Bohr, não é o número quântico n que determina o momento angular.

As funções de onda com os **mesmos n** e l são da mesma **subcamada**. Deram letras também

l	0	1	2	3	4	5	...
subcamada	s	p	d	f	g	h	...

(as primeiras 4 são abreviações para as palavras inglesas *sharp*, *principal*, *diffuse* e *fundamental*, o que tem a ver com características das linhas espectrais associadas às transições envolvendo estes subníveis; a partir do quinto segue a ordem alfabética).

Exemplo: a subcamada com $n = 3$, $l = 2$ se chama $3d$.

l também dá informação sobre o **formato angular** do **orbital**.

O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

2. o número quântico do momento angular, ou secundário, l

Em cada subcamada há $2l + 1$ estados degenerados, correspondendo aos $2l + 1$ valores possíveis de m_l .

É fácil de mostrar que existem n^2 estados com um dado n .

Tabela 3. Valores permitidos para os números quânticos n , l e m_l , até $n = 4$.

n	l	Designação da subcamada	m_l	Número de orbitais na subcamada ($2l + 1$)	Número de orbitais na camada (n^2)
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	-1, 0, 1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	-1, 0, 1	3	
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	-1, 0, 1	3	
	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5	
	3	4f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7	

O Átomo de Hidrogênio

O que significam os números quânticos?

3. o número quântico magnético m (ou m_l)

m (ou m_l) = $-l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$: determina o **componente z** do **momento angular**: $L_z = m \cdot \hbar$.

Também descreve a **orientação** do orbital:

Quanto **maior** $|m|$, tanto mais **achatado** é o **orbital** na direção dos z .

Juntos, l e m_l parametrizam a **parte angular** da **função de onda**, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, funções chamadas harmônicas esféricas, e assim, a parte angular $P_{lm}(\theta, \varphi)$ do **orbital**.

Notação Espectroscópico do Estado de um Elétron

n [código para l]

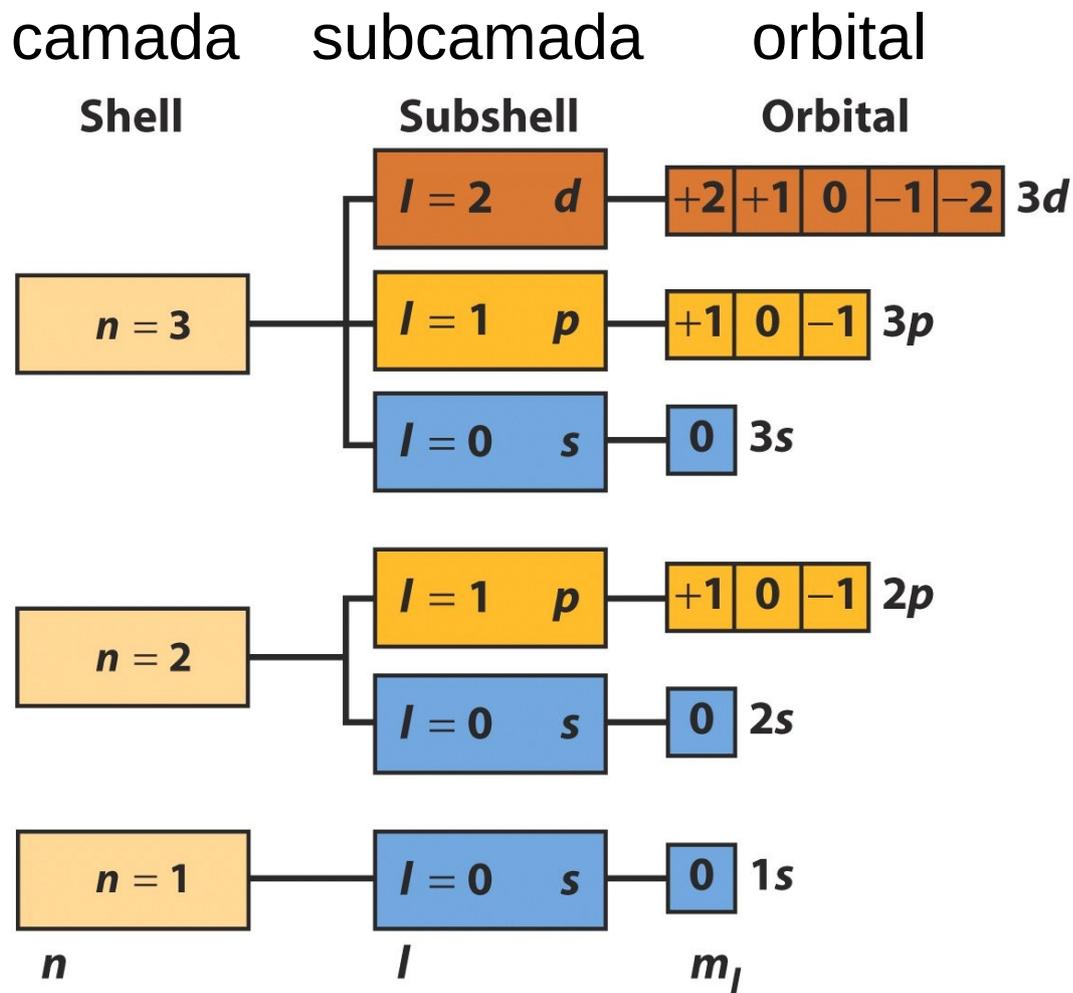
Exemplo: Elétron no estado fundamental
($n = 1$ e $l = 0$): $1s$

Elétron com $n = 2$, $l = 1$: $2p$

Em uma configuração eletrônica,
2 elétrons em orbitais $2p$: $2p^2$

O Átomo de Hidrogênio

Resumo dos orbitais ($n = 1, 2, 3$)



O Átomo de Hidrogênio

Resumo dos orbitais ($n = 4$)

camada subcamada orbital

$n = 4$

4f	<table border="1"><tr><td>+3</td><td>+2</td><td>+1</td><td>0</td><td>-1</td><td>-2</td><td>-3</td></tr></table>	+3	+2	+1	0	-1	-2	-3	
+3	+2	+1	0	-1	-2	-3			
4d	<table border="1"><tr><td>+2</td><td>+1</td><td>0</td><td>-1</td><td>-2</td></tr></table>	+2	+1	0	-1	-2			
+2	+1	0	-1	-2					
4p	<table border="1"><tr><td>+1</td><td>0</td><td>-1</td></tr></table>	+1	0	-1					
+1	0	-1							
4s	<table border="1"><tr><td>0</td></tr></table>	0	16						
0									

etc.

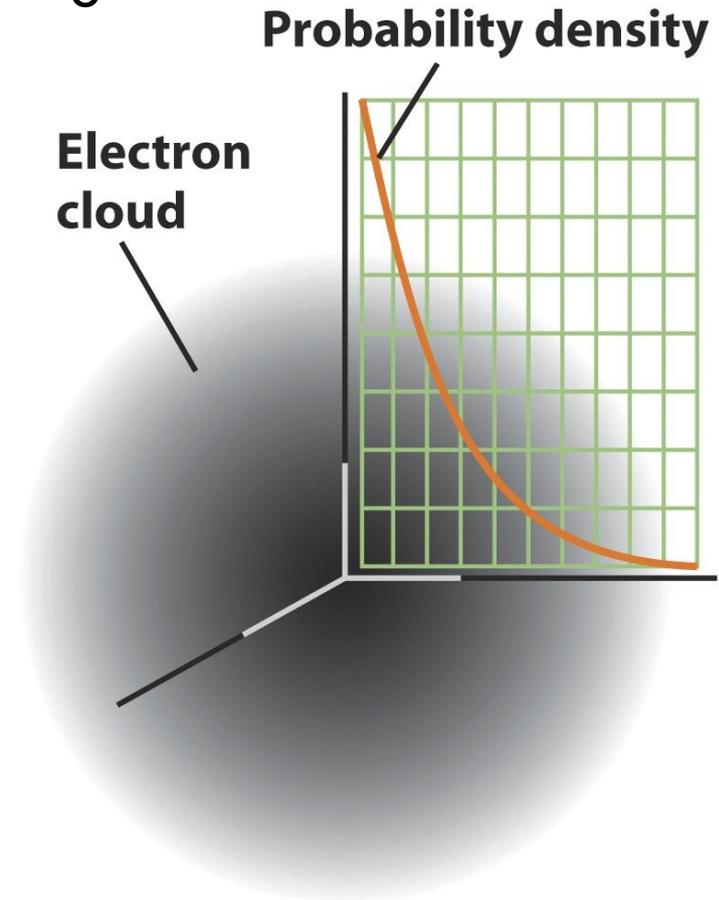
O Átomo de Hidrogênio

Os orbitais

O estado fundamental 1s: $n = 1, l = m = 0$

$\Rightarrow E = -E_0, L = 0, \langle r \rangle = r_1 = a_0$

- Esfericamente simétrica
- A probabilidade de estadia do elétron cai exponencialmente com a distância do núcleo.



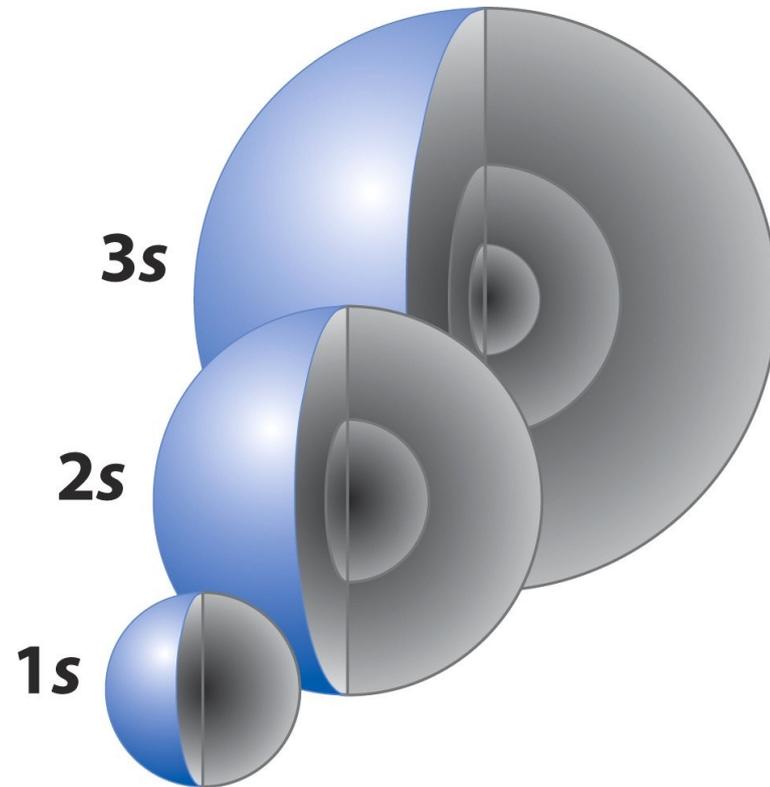
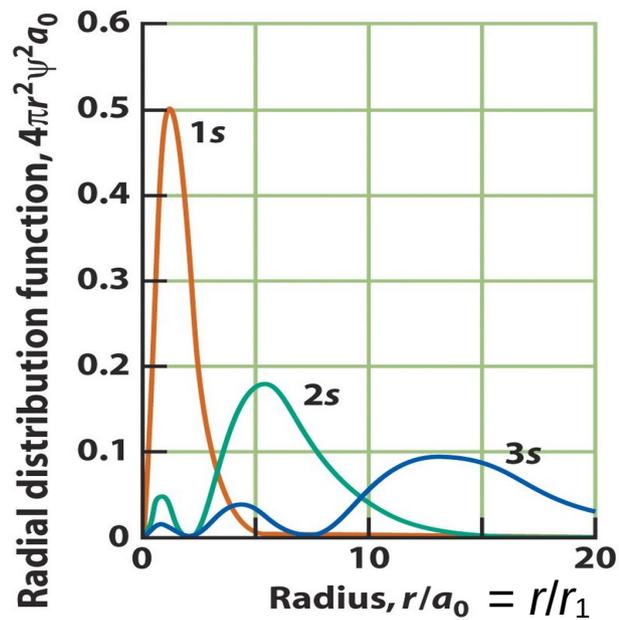
O Átomo de Hidrogênio

Os orbitais

Os outros orbitais s : $l = m = 0$

$\Rightarrow L = 0$

- Esfericamente simétricas



O Átomo de Hidrogênio

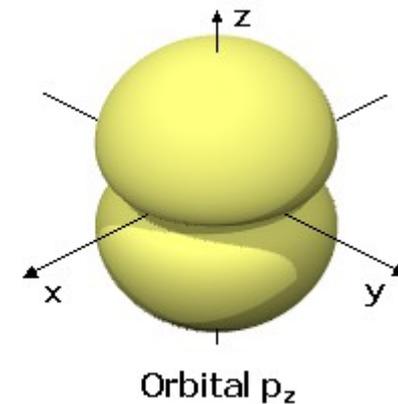
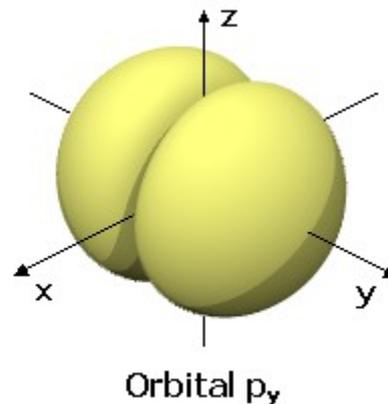
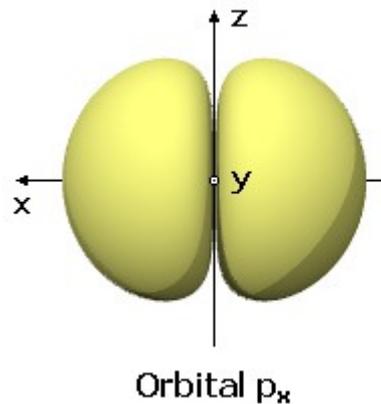
Os orbitais

Os orbitais p : $l = 1$ (aqui $2p$)

$$\Rightarrow L = \sqrt{2} \cdot \hbar$$

- Formas de halteres

- existem 3 orbitais $2p$, já que há 3 valores de m possíveis:
 $m = -1, 0, 1$



O Átomo de Hidrogênio

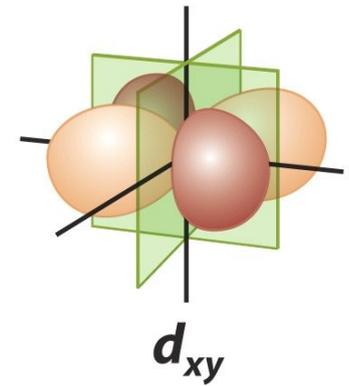
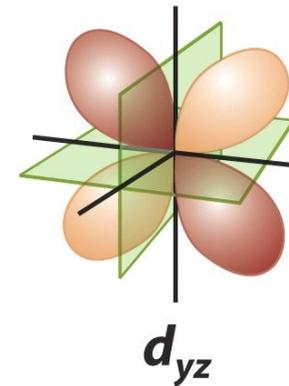
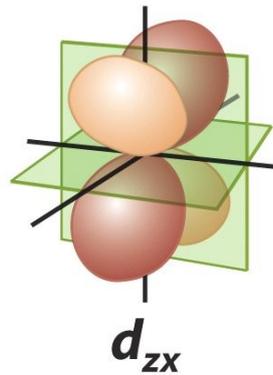
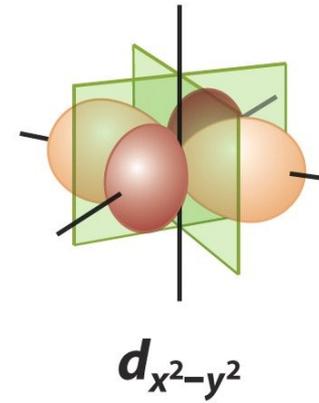
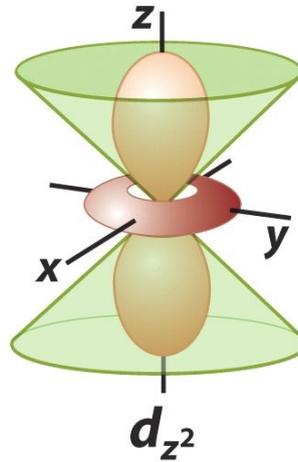
Os orbitais

Os orbitais d : $l = 2$ (aqui $3d$)

$$\Rightarrow L = \sqrt{6} \cdot \hbar$$

- Existem 5

($m = -2, -1, 0, 1, 2$)



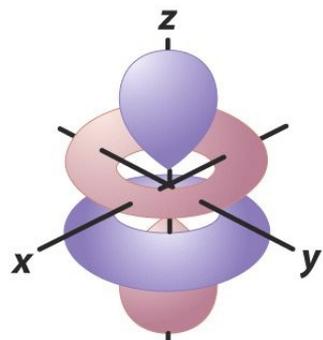
O Átomo de Hidrogênio

Os orbitais

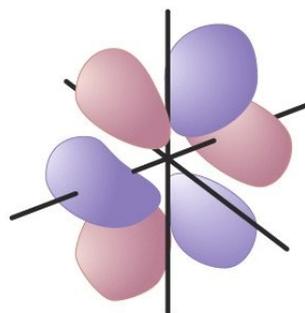
Os orbitais f : $l = 3$ (aqui $4f$)

$$\Rightarrow L = \sqrt{12} \cdot \hbar$$

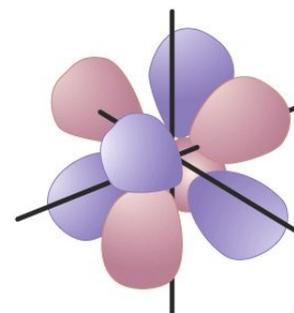
- Existem 7
($m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$)



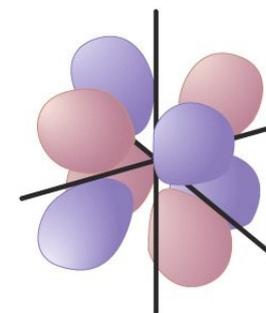
$$5z^3 - 3zr^2$$



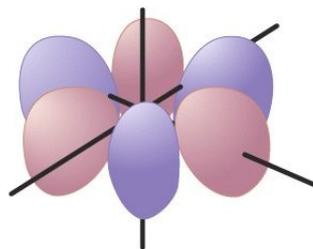
$$5xz^2 - xr^2$$



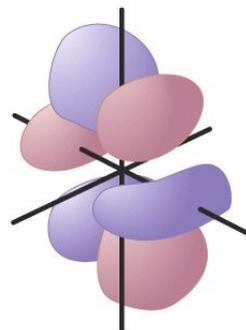
$$zx^2 - zy^2$$



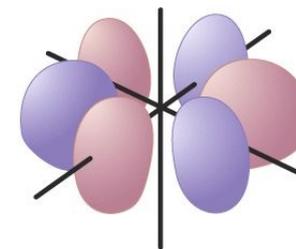
$$xyz$$



$$y^3 - 3yx^2$$



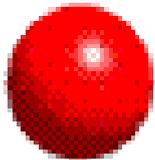
$$5yz^2 - yr^2$$



$$x^3 - 3xy^2$$

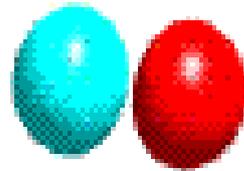
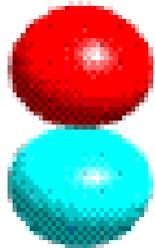
n l Resumo dos orbitais d , f , etc.

1 0
(1s)

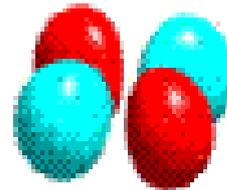
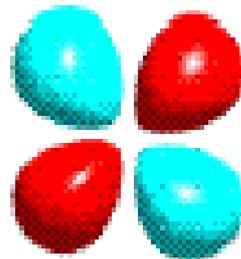


Em um dado orbital, o sinal da função de onda é oposto para lóbulos com cores diferentes (mas a probabilidade é sempre positiva)

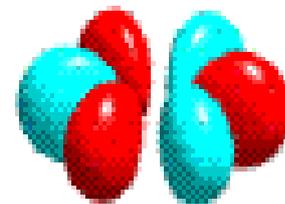
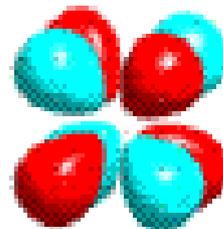
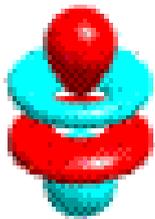
2 1
(2p)



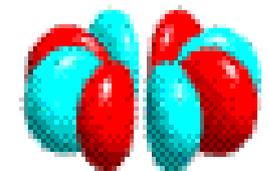
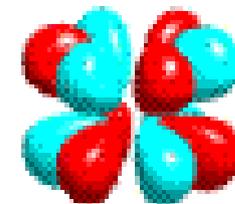
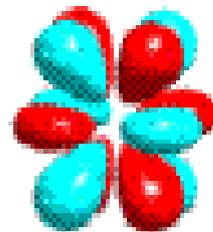
3 2
(3d)



4 3
(4f)



5 4
(5g)



$|m|$

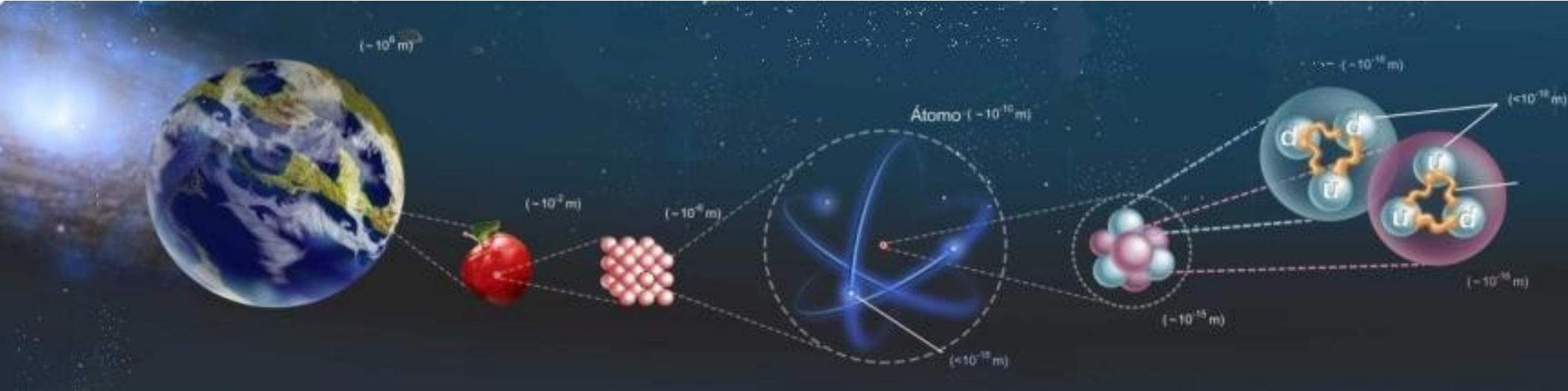
0

1

2

3

4



Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

FIM pra hoje

<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Estrutura.html>