

Lista de exercícios

Estados quânticos e função de onda.

1- No começo do século XX, os cientistas desenvolveram uma teoria capaz de descrever a dinâmica de sistemas na escala atômica. Essa teoria, conhecida como mecânica quântica, obteve grande sucesso na descrição dos átomos e das ligações entre átomos que formam moléculas e sólidos. Julgue os itens a seguir, relacionados à mecânica quântica e a alguns de seus resultados, e assinale com V (verdadeiro) ou F (falso) as afirmações abaixo:

() De acordo com o modelo mecânico-ondulatório, as posições que os elétrons em um átomo podem assumir são descritas por uma função distribuição (ou densidade) de probabilidade;

() Segundo a mecânica quântica, uma partícula em um poço de potencial infinito não pode ter energia total nula;

() O espectro discreto de energias do átomo de hidrogênio possui uma quantidade definida de níveis de energia, cuja energia depende inversamente do número quântico principal n ;

() Em uma mesma camada, e na ausência de campos elétricos ou magnéticos externos, os níveis de energia do átomo de hidrogênio são sempre degenerados.

A resposta correta é :V-V-F-V

2- Analise as afirmações acerca da teoria quântica:

I. A teoria quântica coloca em xeque a precisão rigorosa e o determinismo característicos da física clássica de Newton;

II. A teoria quântica é limitada ao mundo do infinitamente pequeno, segundo Erwin Schrödinger;

III. O Princípio da Incerteza, formulado em 1927 por Werner Heisenberg, afirma ser impossível medir com precisão, no mesmo instante, a posição e a velocidade de uma partícula.

Dentre elas, quais são corretas?

I, II e III são corretas;

- 3- Na Mecânica Quântica os observáveis (medidas experimentais) de um sistema não são diretamente descritos pelo estado quântico.
- O que são operadores quânticos?
 - Como eles são usados e qual a sua importância na Mecânica Quântica?
 - Descreva os principais operadores usados em Mecânica Quântica, e para que eles são utilizados.
- 4- Na mecânica quântica o estado de um sistema determina tudo o que podemos conhecer sobre o sistema quântico.
- Explique o significado físico da função de onda e da função densidade de probabilidade.
- 5- Considere que a função de onda de um elétron confinado em uma caixa unidimensional de comprimento L seja dada por:

$$\psi(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right); \quad -L/2 \leq x \leq +L/2$$
$$\psi(x) = 0, \quad |x| > L/2$$

- Essa função de onda é de quadrado integrável?
 - Essa função de onda é normalizada?
 - Em caso negativo, normalize-a.
 - Qual a probabilidade de encontrar o elétron nos seguintes intervalos: $-L/2 \leq x \leq 0$, $0 \leq x \leq L/2$, $-L/4 \leq x \leq +L/4$?
- 6- Uma partícula que vive em uma dimensão espacial tem a função de onda
- $$\psi(x) = Ax \exp\left(ikx - b\frac{|x|}{2}\right)$$
- onde A , k e b são parâmetros reais ($b < 0$). (a) Normalizar a função de onda dessa partícula, assim achar A como função de outros parâmetros. (b) Achar o valor esperado da coordenada x dessa partícula (como função de k e b).

- Quando o potencial é independente do tempo, a normalização de uma função de onda pode ser escrita como

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

trabalhando esta expressão resulta

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-ikx - b\frac{|x|}{2}\right) x \exp\left(ikx - b\frac{|x|}{2}\right) dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ikx) \exp\left(-b\frac{|x|}{2}\right) \exp(ikx) \exp\left(-b\frac{|x|}{2}\right) dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-b|x|) dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-b|x|) dx = 1 \end{aligned}$$

observe que a função a integrar é uma função par ($f(x) = f(-x)$), a integral, que varre a área abaixo a curva, pode ser escrita como, o dobro da integral de $0 \rightarrow \infty$, ou seja

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-b|x|) dx = 2A^2 \int_0^{\infty} x^2 \exp(-b|x|) dx$$

Do formulário temos a integral

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-\beta x} dx = \frac{2}{\beta^3}$$

(aqui podemos tirar o valor absoluto pois varremos apenas valores positivos de x), assim

$$\int_0^{\infty} x^2 \exp(-b|x|) dx = \frac{2}{b^3}$$

e a normalização fica escrita como

$$\begin{aligned} 2A^2 \int_0^{\infty} x^2 \exp(-b|x|) dx &= 1 \\ -2A^2 \frac{2}{-b^3} &= 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{1}{4}b^3} \end{aligned}$$

- O valor esperado da medida x , é definido como

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx$$

Trabalhando essa expressão, resulta

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-ikx - b\frac{|x|}{2}\right) x^2 \exp\left(ikx - b\frac{|x|}{2}\right) dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^3 \exp(-b|x|) dx \end{aligned}$$

Agora a função é ímpar ($f(-x) = -f(x)$), e por propriedades da integral (de $-\infty$ a ∞ , ou de $-\alpha$ a α), resulta zero. Assim o valor esperado de uma onda-partícula com essa função de onda é nula, $\langle x \rangle = 0$.

Oscilador Harmônico

- 7- Considere uma molécula de HI vibrando como um átomo de I imóvel e um átomo de H que oscila aproximando-se e afastando-se do átomo de I. Sendo a constante de força de ligação do HI igual a 314 N.m^{-1} , calcule
- a frequência de vibração da molécula
 - o comprimento de onda necessário para excitar a molécula para a vibração.

8- Em um oscilador harmônico clássico, a partícula não pode ir além dos pontos em que a energia total é igual à energia potencial. Classicamente, esses pontos são conhecidos como pontos de retorno. Considere uma partícula que possui a energia do estado fundamental do oscilador harmônico quântico.

- Determine os pontos de retorno clássico para essa partícula.
- No caso quântico, indique como poderia ser obtida a probabilidade de encontrar a partícula na região proibida classicamente.

9- A energia do oscilador harmônico linear é dada por

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

em que m é a massa da partícula em movimento harmônico simples e ω é a frequência da oscilação. (a) Deduza e mostre a expressão para a energia média $\langle E \rangle$. (Dica: para o oscilador harmônico $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$). (b) mostre que a energia mínima do oscilador é $\frac{1}{2}\hbar\omega$, chamada energia do ponto zero. (Dica: encontre os mínimos da energia em relação a $\langle x^2 \rangle$)

- Sabemos que $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ pelo que

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* E \psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{p^2}{2m} \psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi dx \\ &= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p^2 \psi dx + \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx \\ &= \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle \end{aligned}$$

mas $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - 0 = \langle x^2 \rangle$, e $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle - 0 = \langle p^2 \rangle$. Assim

$$\Delta x^2 \Delta p^2 = \langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

ou bem

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4 \langle x^2 \rangle}$$

por tanto

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{8m \langle x^2 \rangle} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle \end{aligned}$$

- Encontrando os mínimos da energia em relação a $\langle x^2 \rangle = \gamma$, que resultam de

$$\frac{\partial E}{\partial \gamma} = 0$$

encontramos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \gamma} \langle E \rangle &= \left(\frac{\hbar^2}{8m\gamma} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{1}{2}m\omega^2 \gamma \right) = 0 \\ &= \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{1}{\gamma} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\partial}{\partial \gamma} (\gamma) = 0 \\ &= \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{-1}{\gamma^2} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 = 0 \end{aligned}$$

ou bem

$$\gamma = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

resultando para a energia

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \frac{\hbar^2 2m\omega}{8m\hbar} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2}\hbar\omega\end{aligned}$$

Outra forma de demonstrar isso, menos elegante, seria saber que os níveis de energia para o oscilador harmônico estão como

$$\xi = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

com valores de $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ sendo o de menor energia $n = 0$, o que dá

$$\xi = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Átomo de Hidrogênio

- 10- Explique, a partir dos números quânticos do átomo de Hidrogênio, por que a subcamada s pode possuir no máximo 2 elétrons, a subcamada p no máximo 6, e a subcamada d no máximo 10.

As subcamadas s, p, d correspondem a $l = 0, 1, e 2$, respectivamente.

Para cada valor de l , os orbitais são dados pelo número quântico m que varia de $-l$ até l .

Cada orbital contém até dois elétrons (princípio de exclusão de Pauli + spin do elétron)

Para $s \rightarrow l = 0 \rightarrow m = 0 \rightarrow 1$ orbital \rightarrow máximo 2 elétrons

Para $p \rightarrow l = 1 \rightarrow m = -1, 0, 1 \rightarrow 3$ orbitais \rightarrow máximo 6 elétrons

Para $d \rightarrow l = 2 \rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2 \rightarrow 5$ orbitais \rightarrow máximo 10 elétrons

- 11- Explique o que é um orbital atômico, dizendo como este conceito surge na mecânica quântica desenvolvida por Schrödinger.

Um orbital atômico representa uma região em torno do núcleo atômico onde é maior a probabilidade de se encontrar os elétrons. Correspondem ao que às vezes chamamos de "nuvens eletrônicas", nas representações gráficas que são usadas para se entender várias propriedades dos átomos. O conceito surge ao se encontrar a função de onda como solução da equação de Schrödinger, encontra-se diferentes funções de onda para diferentes números quânticos n, l e m , e ao se fazer um gráfico do módulo quadrado dessas funções de onda, chegamos à forma dos orbitais.

- 12- Considere o átomo de hidrogênio no estado excitado, com um elétron no orbital 5p. Liste todos os conjuntos possíveis de números quânticos (n, l, m, m_s) para esse elétron; Os conjuntos de números quânticos possíveis para um elétron em um orbital 5p são tais que:

$$n = 5, l = 1, m = -1, 0, 1 \text{ e } m_s = +1/2, -1/2;$$

13- A Para o átomo de hidrogênio, quantos estados quânticos possíveis correspondem ao número quântico principal $n = 3$? Qual é o valor das energias associadas a estes estados?

Se $n = 3$, os valores permitidos para l são 0, 1 e 2. Para $l = 0$ temos que $m = 0$ (1 estado), para $l = 1$ temos que $m = -1, 0, 1$ (3 estados) e para $l = 2$ temos que $m = -2, -1, 0, 1, 2$ (5 estados). Ou seja, no total, existem $1 + 3 + 5 = 9$ estados permitidos.

Como a energia total só depende do número quântico principal,

$$\xi_n \approx \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

Com $n = 3$, a energia de cada um destes estados é igual a $-1,51 \text{ eV}$

14- Escreva a função onda espacial do átomo de Hidrogênio correspondem ao estado energético com $n=2, l=1$ e $m=0$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$$

15- A Determine o número total de estados em que podemos colocar um elétron para a camada $n = 3$.

Resposta: Para $n = 3$, levando em conta o spin $+1/2$ e $-1/2$, teremos 18 estados

16- Qual o significado físico da quantidade conhecida como densidade de probabilidade radial $P(r)$

$$P(r) dr = \psi^* \psi 4\pi r^2 dr$$

$P(r)$ representa a distância ao núcleo mais provável de encontrar o elétron.

17- Quantos valores pode ter a componente z do momento angular por causa do elétron girando ao redor do núcleo atômico.

Respostacorreta: $2l+1$

18- A função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio é dada por

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

A partir desta equação, qual é o diâmetro do átomo de hidrogênio?

Aqui a_0 é o raio de Bohr. A densidade de probabilidade radial $P(r)$ para o átomo de hidrogênio nos diz o raio mais provável, que quando aplicado à função de onda em

questão, nos dá como raio mais provável justamente um a_0 . Assim, o diâmetro do átomo de Hidrogênio nesse estado fundamental é aproximadamente um $2a_0$.

19- As soluções do átomo de hidrogênio são caracterizadas por três números quânticos inteiros, cujos símbolos e denominações são, n – número quântico principal; l – número quântico azimutal; m – número quântico magnético. Escreva o significado físico do número quântico azimutal

O número quântico azimutal define o momento angular do elétron e especifica o formato do orbital;

20- Sendo a região espacial $x \in [-2,2]$, quantos nodos têm a função de onda unidimensional dada por

$$\Psi(x) = \frac{\sin(2\pi x)}{x}$$

Solução: 8

Os nodos de uma função são definidos como sendo os pontos do espaço onde esta é exactamente igual a zero, isto é $f(x) = 0$. O plot da função de onda em cima é mostrado na figura ??, onde podemos rapidamente concluir que no intervalo $x \in [-2, 2]$ existem 8 pontos onde esta é exactamente zero: $x = \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{3}{2}, \pm 2$.

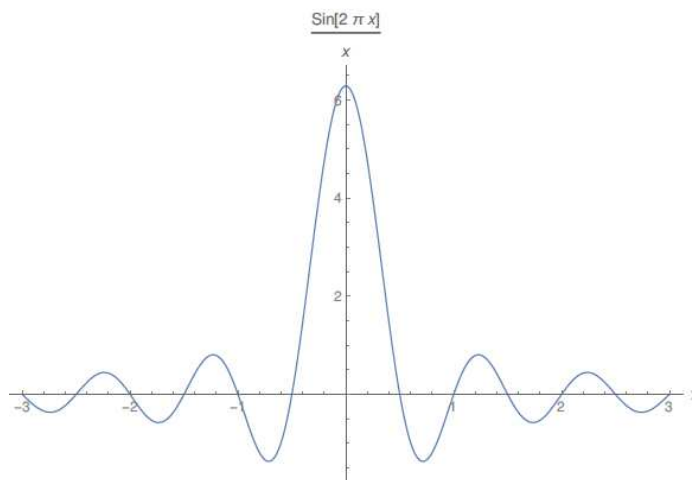


Figure 1: Plot da função $f(x) = \frac{\sin(2\pi x)}{x}$ na região $x \in [-2, 2]$.

21- Para o estado excitado para $n=2, l=0$ e $m=0$:

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

(a) Mostre que a constante de normalização é dada por:

$$C_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$$

(b) Calcule a densidade de probabilidade $P(r)$ no ponto $r=a_0$.

(a) Para normalizar, basta resolver a equação

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi_{200}^* \psi_{200} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1$$

$$|C_{200}|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \sin \theta \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/a_0} dr d\theta d\varphi = 1$$

$$u = \frac{Z}{a_0} r \Leftrightarrow r = \frac{a_0}{Z} u$$

$$du = \frac{Z}{a_0} dr \Leftrightarrow dr = \frac{a_0}{Z} du$$

$$u \rightarrow 0 \Leftrightarrow r \rightarrow 0$$

$$u \rightarrow \infty \Leftrightarrow r \rightarrow \infty$$

$$|C_{200}|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 u^2 \sin \theta (2-u)^2 e^{-u} \left(\frac{a_0}{Z}\right) du d\theta d\varphi = 1$$

$$|C_{200}|^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty (u^4 - 4u^3 + 4u^2) e^{-u} du = 1$$

$$|C_{200}|^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 4\pi \left(\int_0^\infty u^4 e^{-u} du - 4 \int_0^\infty u^3 e^{-u} du + 4 \int_0^\infty u^2 e^{-u} du \right) = 1 \blacktriangleright$$

$$|C_{200}|^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 4\pi(4! - 4 \cdot 3! + 4 \cdot 2!) = 1$$

$$|C_{200}|^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 32\pi = 1$$

$$\boxed{C_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}} \blacksquare$$

(b) A densidade de probabilidade $P(a_0)$ é dada por:

$$P(a_0) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \psi_{200}^* \psi_{200} a_0^2 \sin \theta d\theta d\varphi$$

$$P(a_0) = \frac{1}{32\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 4\pi a_0^2 \left(2 - \frac{Za_0}{a_0}\right)^2 e^{-Za_0/a_0} = \frac{Z^3}{8a_0} (2-Z)^2 e^{-Z}$$

Caso $Z = 1$, temos:

$$\boxed{P(a_0) = \frac{e^{-1}}{8a_0}}$$

22- Qual é o momento angular orbital (na forma de múltiplos de \hbar) dos orbitais (a) 1s; (b) 3s; (c) 3d; (d) 2p; (e) 3p? Dê os números de nós angulares e radiais em cada caso. (f) Qual é o elemento químico que possui a configuração (g) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ e (h) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$.

O momento angular orbital de um elétron em um átomo de hidrogênio é dado por:

$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2$$

O número de nós radiais é definido pela energia do orbital e é dado por $n - (l + 1)$, enquanto que o número de nós angulares depende da geometria dos lóbulos, dado por l .

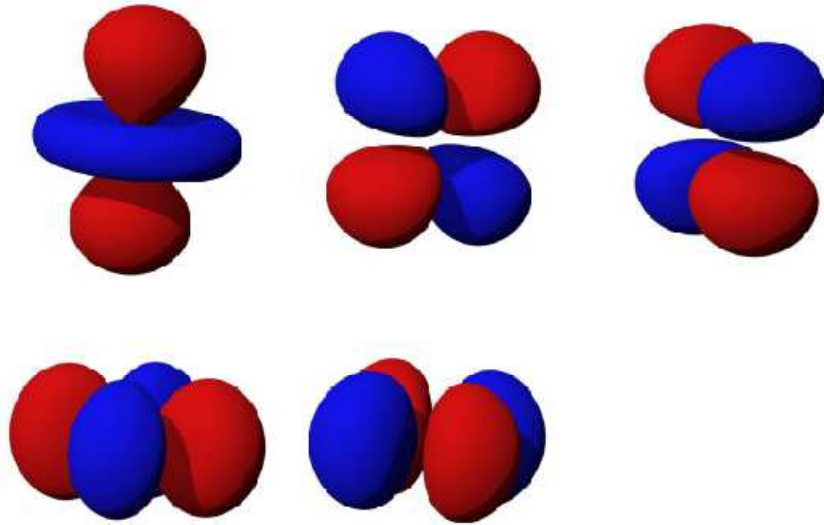
(a) $1s \rightarrow n = 1, l = 0 \Rightarrow L = 0$ nós radiais = 0 nós angulares = 0



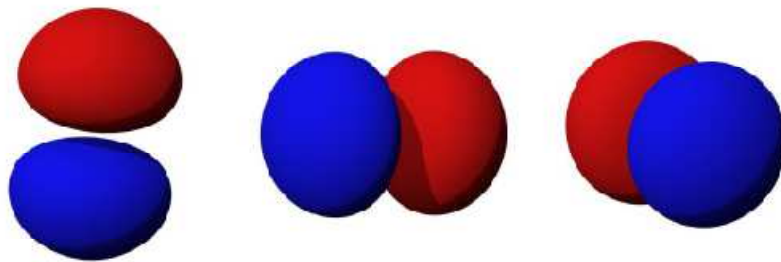
(b) $3s \rightarrow n = 3, l = 0 \Rightarrow L = 0$ nós radiais = 2 nós angulares = 0



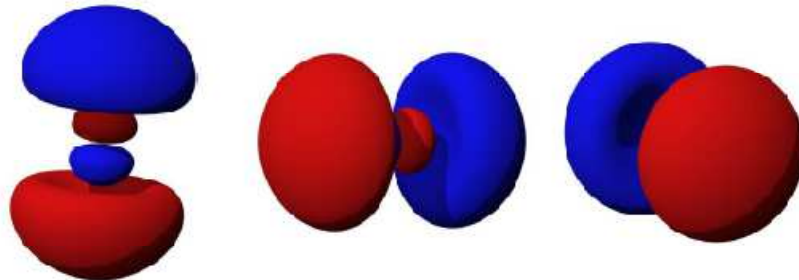
(c) $3d \rightarrow n = 3, l = 2 \Rightarrow L = \sqrt{6} \hbar$ *n*ós r \acute{a} dias = 0 *n*ós angulares = 2

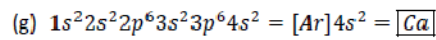
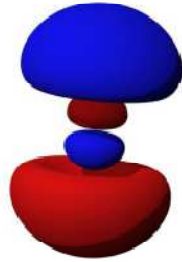
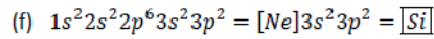


(d) $2p \rightarrow n = 2, l = 1 \Rightarrow L = \sqrt{2} \hbar$ *n*ós r \acute{a} dias = 0 *n*ós angulares = 1



(e) $3p \rightarrow n = 3, l = 1 \Rightarrow L = \sqrt{2} \hbar$ *n*ós r \acute{a} dias = 1 *n*ós angulares = 1





23- Escreva os valores possíveis da componente z do momento angular orbital (a) de um elétron d ; (b) de um elétron f .

Os valores possíveis da componente z são quantizados de acordo com

$$L_z = m\hbar,$$

onde m pode ter valores de $-l$ a l .

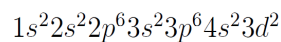
(a) Para um elétron no orbital d de um átomo de hidrogênio, temos $\ell = 2$. Logo:

$$\boxed{L_z = -2\hbar, -\hbar, 0, +\hbar, +2\hbar}$$

(b) Para um elétron no orbital f de um átomo de hidrogênio, temos $\ell = 3$. Logo:

$$\boxed{L_z = -3\hbar, -2\hbar, -\hbar, 0, +\hbar, +2\hbar, +3\hbar}$$

24- Escreva a configuração eletrônica para o estado fundamental do elemento Ti.



25- Explique porquê a energia de um elétron do orbital $4s$ ($n=4$) é menor que a energia de um elétron no orbital $3d$ ($n=3$), sendo que no primeiro caso o valor do número quântico n é maior.

Vamos aproveitar de entender com o sódio, $Z = 11$, o conceito de **blindagem**. É um fato experimental que energias disponíveis para os elétrons $3d$ e $4s$ são:

$$3d \text{ com } -1,521 \text{ eV}$$

$$4s \text{ com } -1,947 \text{ eV}$$

Veja que a energia do estado $4s$ está $0,426 \text{ eV}$ abaixo da energia do estado $3d$, embora o estado $4s$ possua um valor de n maior.

Para entender o conceito de blindagem, imaginamos a remoção dos elétrons da camada externa (neste caso, o elétron de valência do átomo de sódio). Os elétrons que sobram formam um conjunto esfericamente simétrico de 10 elétrons (que preenchem as camadas K e L) juntamente com o núcleo contendo 11 prótons; portanto, $Q_{\text{int}} = -10e + 11e = +1e$. Imaginando que o décimo primeiro elétron esteja fora dessa coleção de cargas, ele será atraído por uma carga efetiva igual a $+1e$, e não $+11e$.

Este efeito chama-se blindagem; os 10 elétrons blindam os 11 prótons, deixando uma carga efetiva líquida igual a $+e$. Em geral, quando o elétron permanece a maior parte do tempo fora de uma distribuição de cargas, ele possui energias dadas pela expressão dos níveis de energia do átomo de hidrogênio substituindo-se Ze^2 por $Z_{ef}e^2$. Ou seja, de acordo à equação

$$\xi_n = -\frac{Z_{ef}^2 \xi_1}{n^2}$$

para os níveis de energia com blindagem (onde $\xi_1 = 13,6 \text{ eV}$).

No caso do sódio, se o décimo primeiro elétron está fora dessa coleção de cargas, então $Z_{ef} = 1$. Assim

$$\xi_{3d} = -\frac{(1)^2 (13,6)}{(3)^2} = -1,51 \text{ eV}$$

26- Os elétrons no hidrogênio são descritos por quatro números, n , l , m e m_s . Quais restrições (se houver) existem nesses quatro números?

O número quântico principal n é um número inteiro positivo, 1, 2, 3, O inteiro l é um número inteiro não negativo menor que l , então 0, 1, 2,, $n-1$. O número inteiro m é de magnitude não maior que l , então $m = -l, -l+1, -l+2, l$. Finalmente, m_s assume os valores $m_s = \pm 1/2$.

27- Mostre qual é a distância, r , mais provável entre o elétron e o núcleo no átomo de hidrogênio no estado $n = 3$, $l = 2$ e $m = 0$. Nota: nesse estado a função de onda para o átomo de H é

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

com

$$C_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$$

A densidade de probabilidade radial $P(r)$ representa a distância mais provável de encontrar o elétron.

$$P(r) dr = \psi^* \psi 4\pi r^2 dr = 4\pi r^2 C_{320}^2 \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^4 e^{-2Zr/3a_0} (3\cos^2\theta - 1)^2 dr$$

ou

$$P(r) = 4\pi C_{320}^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 (3\cos^2\theta - 1)^2 e^{-2Zr/3a_0} r^6$$

Logo, a distância mais provável será um máximo na curva $P(r)$, assim, a resposta ao problema pode ser encontrada fazendo $\partial P/\partial r = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial r} &= 4\pi C_{320}^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 (3\cos^2\theta - 1)^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(e^{-2Zr/3a_0} r^6 \right) \\ &= 4\pi C_{320}^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 (3\cos^2\theta - 1)^2 \left(e^{-2Zr/3a_0} \frac{\partial}{\partial r} r^6 + r^6 \frac{\partial}{\partial r} e^{-2Zr/3a_0} \right) \\ &= 4\pi C_{320}^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 (3\cos^2\theta - 1)^2 \left(e^{-2Zr/3a_0} 6r^5 - \frac{2}{3} \frac{Z}{a_0} r^6 e^{-2Zr/3a_0} \right) = 0 \end{aligned}$$

diretamente aqui temos para o termo entre parêntesis

$$\begin{aligned} e^{-2Zr/3a_0} 6r^5 - \frac{2}{3} \frac{Z}{a_0} r^6 e^{-2Zr/3a_0} &= 0 \\ 6 - \frac{2}{3} \frac{Z}{a_0} r &= 0 \\ r &= \frac{9a_0}{Z} \end{aligned}$$

Para o átomo de hidrogênio, $Z = 1$, e resulta $r = 9a_0$.

28- Para o estado fundamental do átomo de hidrogênio, a função de onda é

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

com

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

onde a_0 é o raio atômico de Bohr. Determine a probabilidade de encontrar o elétron em um intervalo $\Delta r = 0.03a_0$ com centro em $r = a_0$.

No estado fundamental temos que $n = 1$, $l = 0$ e $m = 0$ a densidade de probabilidade radial $P(r)$, representa o raio mais provável de encontrar o elétron, é dada por

$$P(r) dr = \psi^* \psi 4\pi r^2 dr = 4\pi C_{100}^2 e^{-2Zr/a_0} r^2 dr$$

com $C_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}$, resulta

$$\begin{aligned} P(r) dr &= 4\pi C_{100}^2 e^{-2Zr/a_0} r^2 dr \\ &= 4\pi \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2Zr/a_0} r^2 dr \\ &= 4 \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2Zr/a_0} r^2 dr \end{aligned}$$

Podemos encontrar a solução integrando entre dois raios

$$P(r) = \int_{r_0}^{r_1} 4 \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2Zr/a_0} r^2 dr$$

ou bem, eliminando a integral em termos da variação Δr , obtendo

$$P(r) = 4 \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2Zr/a_0} r^2 \Delta r$$

Calculando estes valores nesta última equação resulta o valor $P(r) = 0.01623$, ou seja 1.6% de probabilidade de encontrar o elétron nessa distância do núcleo.