



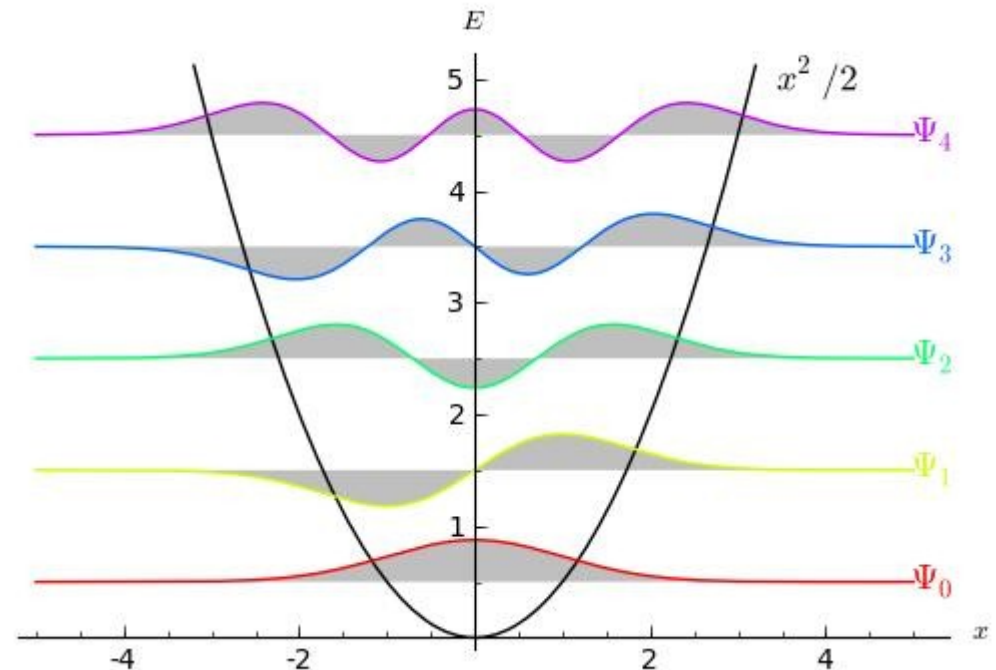
Universidade Federal do ABC

Física Quântica

Aula 10: Equação de Schrödinger em Coordenadas Esféricas, Átomo de Hidrogênio

Pieter Westera

pieter.westera@ufabc.edu.br



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

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

O uso de coordenadas esféricas é útil, no caso que o **potencial é esfericamente simétrico** em torno de um centro. Se este centro fica na origem do sistema de coordenadas, o potencial é da forma

$$V(\mathbf{r}) = V(r)$$

e a **força** $\mathbf{F}(r) = -\nabla V(r)$ é na **direção radial** e seus **módulo** e **sentido**, (para o centro ou para fora) também **independem** de r ,

$|\mathbf{F}| = F(r)\mathbf{r}^\wedge$, onde \mathbf{r}^\wedge é o vetor unidade na direção de \mathbf{r}
e $F(r)$ é positivo para forças apontando para fora

Chamamos forças deste tipo de **forças centrais**.

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esféricas

Às vezes é útil usar **coordenadas esféricas**, i. e. quando o **potencial** é devido a uma **força central**, ou seja, **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:

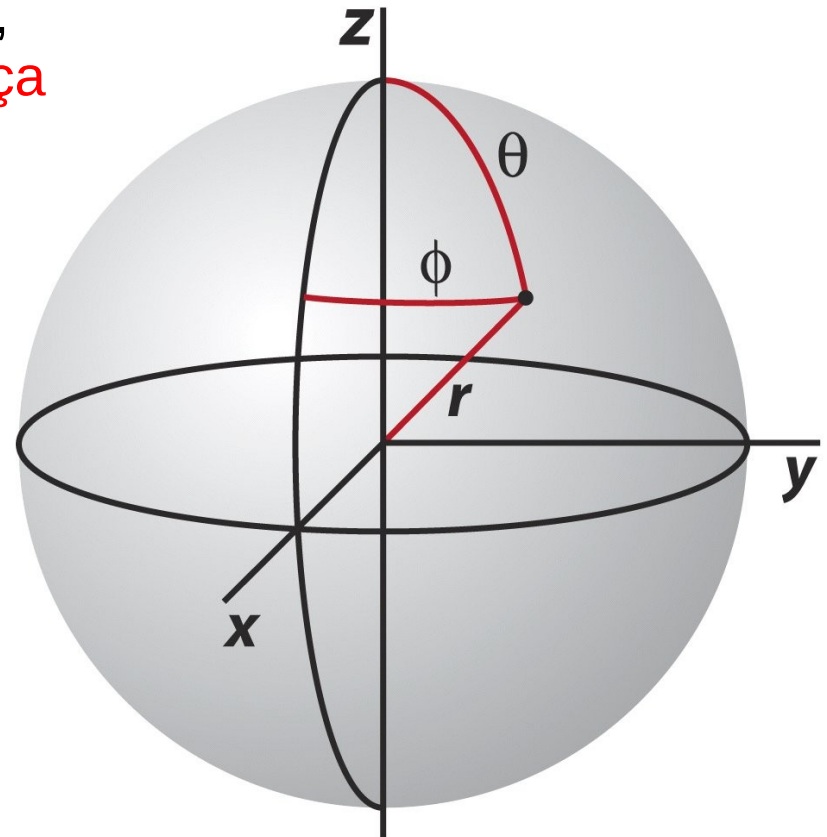
$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

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

$$z = r \cos \theta$$

O laplaciano também tem que ser escrito em coordenadas esféricas, e a Equação de Schrödinger vira:

$$-\hbar^2/2m \cdot 1/r^2 \cdot \partial/\partial r(r^2 \partial\psi/\partial r) - \hbar^2/2mr^2 [1/\sin \theta \partial/\partial \theta(\sin \theta \partial\psi/\partial \theta) + 1/\sin^2 \theta \cdot \partial^2\psi/\partial \varphi^2] + V(r,\theta,\varphi) \cdot \psi = E \cdot \psi$$



A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Reescrevendo e Interpretando

$$\underbrace{\underbrace{1/2m \cdot \underbrace{-\hbar^2/r^2 \cdot \partial/\partial r(r^2 \partial/\partial r)}_{(p_r^2)_{op}} \psi}_{E_{cin,r,op}} + \underbrace{1/2mr^2 \cdot [-\hbar^2/\text{sen } \theta \partial/\partial \theta(\text{sen } \theta \partial/\partial \theta) + 1/\text{sen}^2 \theta \cdot \underbrace{-\hbar^2 \partial^2/\partial \varphi^2}_{(L_z^2)_{op}}]}_{(L^2)_{op}} \psi}_{E_{cin,\theta,\varphi,op}} + \underbrace{V(r,\theta,\varphi)}_{E_{pot,op}} \cdot \psi = E \cdot \psi$$

$$\underbrace{\underbrace{E_{cin,r,op} \psi + E_{cin,\theta,\varphi,op} \psi}_{E_{cin,op} \psi}}_{H_{op} \psi} + E_{pot,op} \psi = E \cdot \psi$$

ou seja: $1/2m \cdot (p_r^2)_{op} \psi + 1/2mr^2 \cdot (L^2)_{op} \psi + V(r,\theta,\varphi) \cdot \psi = E \cdot \psi$,

onde $(p_r^2)_{op}$ contém apenas termos que dependem só de r ,
e $(L^2)_{op}$ contém apenas termos que dependem só de θ e φ .

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

No caso de **forças centrais**, $V = V(r)$, de maneira similar ao que fizemos separando a função de onda em uma parte dependendo do tempo, e uma dependendo da posição para potenciais independentes do tempo, podemos **separar a função de onda** em duas partes, uma dependendo apenas da **coordenada radial** e uma - apenas das **coordenadas angulares**. Esta segunda parte podemos ainda separar em duas que dependem cada uma de uma das duas coordenadas angulares:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) = R(r) \cdot f(\theta) \cdot g(\varphi)$$

Também de maneira similar ao que fizemos para potenciais independentes do tempo (usando constantes de separação), podemos **separar a equação de Schrödinger** em duas (ou três) **equações diferenciais**, uma para cada parte da função de onda:

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Substituindo na Equação de Schrödinger

$$1/2m \cdot (p_r^2)_{op} R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) + 1/2mr^2 \cdot (L^2)_{op} R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) + V(r) \cdot R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) = E \cdot R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow 1/2mr^2 \cdot (L^2)_{op} RY = -1/2m \cdot (p_r^2)_{op} RY - V(r) \cdot RY + E \cdot RY \quad | \cdot 2mr^2 / RY$$

$$\Rightarrow (L^2)_{op} RY / RY = -r^2 \cdot (p_r^2)_{op} RY / RY - 2mr^2 V(r) \cdot RY / RY + 2mr^2 E \cdot RY / RY$$

$$\Rightarrow R(L^2)_{op} Y / RY = -r^2 \cdot Y(p_r^2)_{op} R / RY - 2mr^2 V(r) + 2mr^2 E$$

$$\Rightarrow (L^2)_{op} Y / Y = -r^2 (p_r^2)_{op} R / R - 2mr^2 V(r) + 2mr^2 E =: l(l+1) \cdot \hbar^2$$

(I)

(II)

(III)

$$(I) = (III): (L^2)_{op} Y / Y = l(l+1) \cdot \hbar^2 \quad | \cdot Y \Rightarrow (L^2)_{op} Y = l(l+1) \cdot \hbar^2 \cdot Y$$

\Rightarrow Equação de Schrödinger pra parte angular

$$(III) = (II): l(l+1) \cdot \hbar^2 = -r^2 (p_r^2)_{op} R / R - 2mr^2 V(r) + 2mr^2 E$$

$$\Rightarrow l(l+1) \cdot \hbar^2 + r^2 (p_r^2)_{op} R / R + 2mr^2 V(r) = 2mr^2 E \quad | \cdot R / 2mr^2$$

$$\Rightarrow l(l+1) \cdot \hbar^2 / 2mr^2 \cdot R + 1/2m \cdot (p_r^2)_{op} R + V(r) \cdot R = E \cdot R$$

\Rightarrow Equação de Schrödinger pra parte radial

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

Substituindo os operadores de volta:

Parte radial:

$$\underbrace{-\hbar^2/2mr^2 \cdot d/dr(r^2 \cdot d/dr)}_{E_{\text{cin},r,\text{op}}} R(r) + \underbrace{[V(r) + 1/2mr^2 \cdot l(l+1)\hbar^2]}_{V_{\text{eff}}} \cdot R(r) = E \cdot R(r)$$

Para resolver esta, precisamos conhecer o potencial $V(r)$

Parte angular:

$$\underbrace{[-\hbar^2/\text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta) + 1/\text{sen}^2 \theta \cdot (L_z^2)_{\text{op}}]}_{(L^2)_{\text{op}}} Y(\theta, \varphi) = l(l+1) \cdot \hbar^2 Y(\theta, \varphi)$$

Não contém $V(r) \Rightarrow$ A parte **angular** da **função de onda** é **igual** para **todos** os **potenciais esfericamente simétricos!**

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

Esta última, da parte angular, ainda pode ser separada em duas, uma para $f(\theta)$ e uma para $g(\varphi)$:

$$[-\hbar^2/\text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta) + 1/\text{sen}^2 \theta \cdot (L_z^2)_{\text{op}}]Y(\theta, \varphi) = l(l+1) \cdot \hbar^2 Y(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow -\hbar^2/\text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta)f(\theta)g(\varphi) - l(l+1) \cdot \hbar^2 f(\theta)g(\varphi)$$

$$= 1/\text{sen}^2 \theta \cdot \hbar^2 \partial^2/\partial\varphi^2 f(\theta)g(\varphi) \quad | \cdot (-\text{sen}^2 \theta/\hbar^2 fg)$$

$$\Rightarrow \text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta)fg/fg + l(l+1) \cdot \text{sen}^2 \theta = -\partial^2/\partial\varphi^2 fg/fg$$

$$\Rightarrow \text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta)f/f + l(l+1) \cdot \text{sen}^2 \theta = -\partial^2/\partial\varphi^2 g/g = m^2$$

(I)

(II)

(III)

$$(I) = (III): \text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta)f/f + l(l+1) \cdot \text{sen}^2 \theta = m^2 \quad | \cdot f$$

$$\Rightarrow \text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta)f + l(l+1) \cdot \text{sen}^2 \theta \cdot f = m^2 \cdot f \quad | -l(l+1) \cdot \text{sen}^2 \theta f$$

$$\Rightarrow \text{sen } \theta \cdot d/d\theta(\text{sen } \theta d/d\theta)f(\theta) = [m^2 - \text{sen}^2 \theta \cdot l(l+1)] \cdot f(\theta)$$

$$(II) = (III): -\partial^2/\partial\varphi^2 g/g = m^2 \quad | \cdot (-g) \Rightarrow d^2g(\varphi)/d\varphi^2 = -m^2 \cdot g(\varphi)$$

Equações de Schrödinger para $f(\theta)$ e $g(\varphi)$.

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

A última destas duas, $d^2g(\varphi)/d\varphi^2 = -m^2 \cdot g(\varphi)$, dá para resolver:

$$g(\varphi) = e^{im\varphi} =: g_m(\varphi), \quad \text{onde } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad \leftarrow g(\varphi) = g(\varphi + 2\pi)$$

Já que $|g_m(\varphi)|^2 = 1$, g_m não importa no cálculo de $P(\mathbf{r})$, isto é, $P(\mathbf{r})$ independe de φ e tem **simetria rotacional** em torno do eixo z.

A anterior, $\text{sen } \theta \cdot d/d\theta(\text{sen } \theta d/d\theta)f(\theta) = [m^2 - \text{sen}^2 \theta \cdot l(l+1)] \cdot f(\theta)$, tem as soluções

$$f(\theta) = (\text{sen } \theta)^{|m|}/2^{|l|}! [d/d(\cos \theta)]^{+|m|} (\cos^2 \theta - 1)^l =: f_{lm}(\theta), \quad \text{onde } l \geq |m|$$

chamadas funções de Legendre associadas

As partes angulares completas, $Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{lm}(\theta)g_m(\varphi)$

são chamadas **harmônicas esféricas**.

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

O que significam l e m ?

Aplicando o **operador** quadrado do **momento angular**,
 $(L^2)_{\text{op}} = -\hbar^2[1/\text{sen } \theta \partial/\partial\theta(\text{sen } \theta \partial/\partial\theta) + 1/\text{sen}^2 \theta \cdot \partial^2/\partial\varphi^2]$, na função de onda:

$$\begin{aligned}(L^2)_{\text{op}} \psi(r, \theta, \varphi) &= (L^2)_{\text{op}} [R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)] = R(r) \cdot (L^2)_{\text{op}} Y(\theta, \varphi) \\ &= R(r) \cdot l(l+1) \cdot \hbar^2 \cdot Y(\theta, \varphi) = l(l+1) \cdot \hbar^2 \cdot R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) = l(l+1) \cdot \hbar^2 \cdot \psi(r, \theta, \varphi)\end{aligned}$$

$$\Rightarrow L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar,$$

ou $\sqrt{l(l+1)}$ é o **módulo** do **momento angular**, em unidades de \hbar .

Por isto, l é chamado **número quântico** do **momento angular**.

\Rightarrow O **momento angular** é **quantizado**.

O momento dado pelo número quântico l é um pouco maior que $l\hbar$.
Exceção para $l = 0$, $L = 0$ também.

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

O que significam l e m ?

Aplicando o **operador componente z** do **momento angular**,

$L_{z,op} = -i\hbar \cdot \partial/\partial\varphi$ na função de onda:

$$\begin{aligned}L_{z,op} \psi(r, \theta, \varphi) &= L_{z,op} [R(r) \cdot f(\theta) \cdot g(\varphi)] = -i\hbar \cdot \partial[R(r) \cdot f(\theta) \cdot g(\varphi)]/\partial\varphi \\ &= -i\hbar \cdot R(r) \cdot f(\theta) \cdot \partial g(\varphi)/\partial\varphi = -i\hbar \cdot R(r) \cdot f(\theta) \cdot im \cdot e^{im\varphi} = m\hbar \cdot R(r) \cdot f(\theta) \cdot e^{im\varphi} \\ &= m\hbar \cdot R(r) \cdot f(\theta) \cdot g(\varphi) = m\hbar \cdot \psi(r, \theta, \varphi)\end{aligned}$$

$\Rightarrow m\hbar = L_z$, ou $m = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, l-1$, l é a **componente z** do **momento angular**, em unidades de \hbar .

\Rightarrow A **orientação** do **momento angular** é **quantizada!**

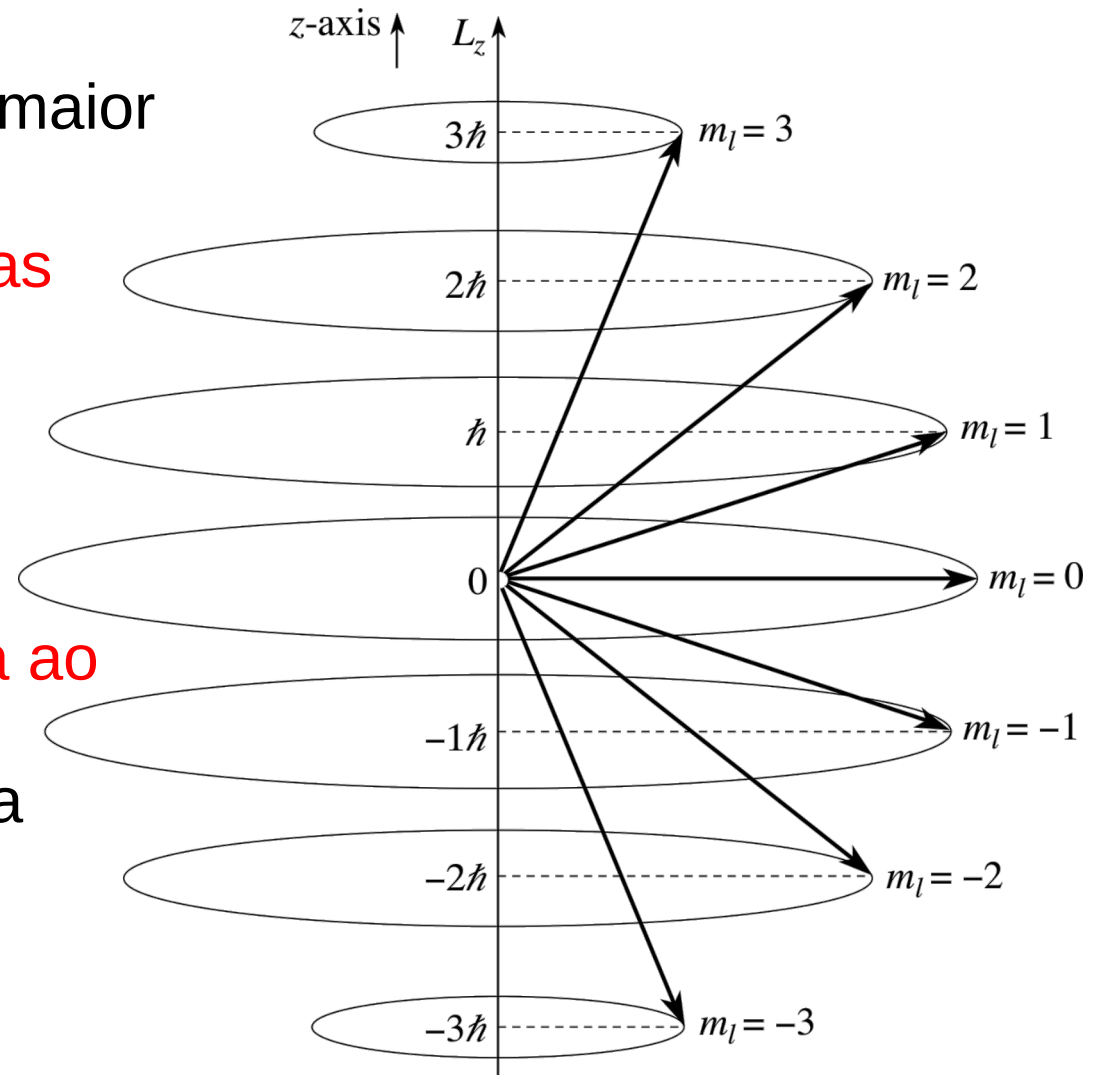
A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

Forças Centrais

Pelo fato, que L é um pouco maior que $l\hbar$, e L_z varia de $-l\hbar$ a $l\hbar$, para dados l e m há **incertezas** nas **componentes x e y** do **momento angular**, aqui ilustrado para $l = 3$.

Só **uma** das três **componentes** pode ser **determinada ao mesmo tempo**. A medição de uma segunda leva à perda da informação sobre a primeira.

De novo, e exceção é para momento angular zero.



A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

E como são estas funções angulares $Y_{lm}(\theta, \phi)$?

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)



$l = 0 \ m = 0$



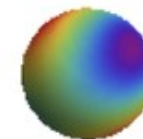
$l = 1 \ m = 0$



$l = 1 \ m = 1$



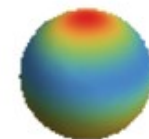
$l = 2 \ m = 0$



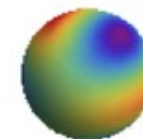
$l = 2 \ m = 1$



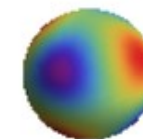
$l = 2 \ m = 2$



$l = 3 \ m = 0$



$l = 3 \ m = 1$



$l = 3 \ m = 2$



$l = 3 \ m = 3$

A Equação de Schrödinger em Coordenadas Esfericas

E como são estas funções angulares $Y_{lm}(\theta, \varphi)$?

Como mencionado, as distribuições de probabilidade $P(\theta, \varphi)$, têm **simetria rotacional** em torno do eixo z.

Elas dependem apenas do módulo e não do sinal de m , q. d., os distribuições de probabilidade de Y_{lm} e Y_{l-m} são iguais (mas as funções, não!).

Funções com $l = 0$ (e, então $m = 0$ também) são **esfericamente simétricos**.

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

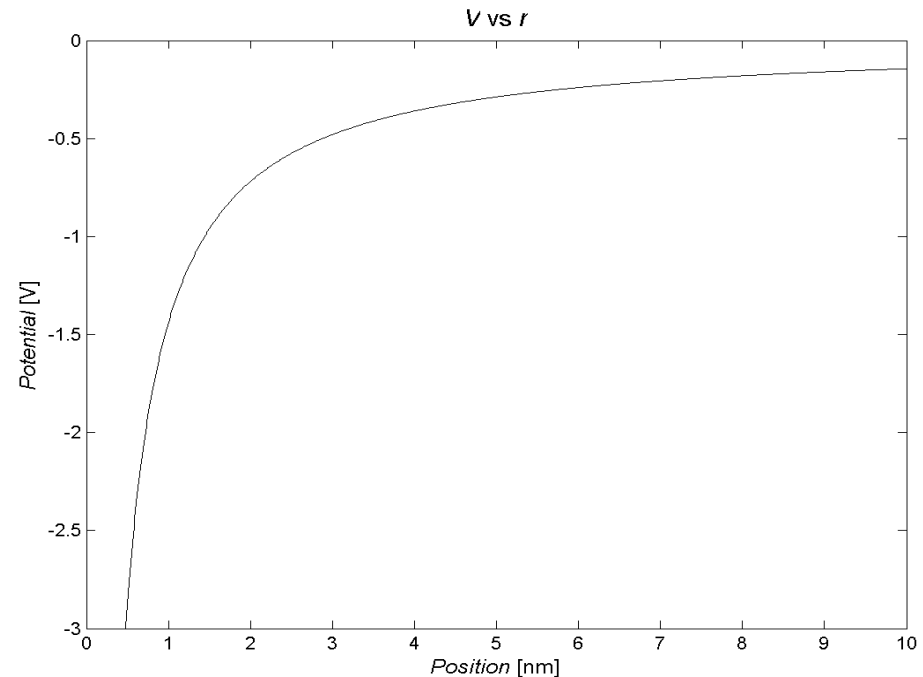
O Átomo de Hidrogênio

Um problema desta natureza (força central) é aquele de encontrar a **função de onda** do **elétron** num **átomo de hidrogênio**, ou de um outro átomo com núcleo $+Ze$ e **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.

Num átomo com um elétron, o **potencial elétrico** é dado pela **distância entre o núcleo e o elétron**, $r = |\mathbf{r}|$:

$$V(r) = V_{\text{Coulomb}} = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$$



O Átomo de Hidrogênio

Substituindo este potencial na equação diferencial para a parte radial para o caso da força central:

$$\underbrace{-\hbar^2/2mr^2 \cdot d/dr(r^2 \cdot d/dr)R(r)}_{E_{\text{cin},r,\text{op}}} + \underbrace{[-Ze^2/4\pi\epsilon_0 r]}_{V(r)} + \underbrace{1/2mr^2 \cdot \underbrace{l(l+1)\hbar^2}_{L^2}}_{\text{"V" centrifugal}} \cdot R(r) = E \cdot R(r)$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{V_{\text{eff}}}$

O Átomo de Hidrogênio

As **soluções** são da forma:

$$R(r) = a_0/Zr \cdot e^{-Zr/a_0n} L_{n-l}(Zr/a_0) =: R_{nl}(r), \text{ onde } n > l,$$

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2/m_e e^2 = \text{raio de Bohr},$$

L_{nl} são polinômios de n -ésima ordem chamados polinômios de Laguerre

As **energias** correspondentes são:

$$E = E_n = -Z^2/n^2 \cdot E_0, \text{ onde } E_0 = m_e e^4/32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 = \text{energia de Bohr}$$

! As **mesmas** energias do **átomo** de **Bohr**!

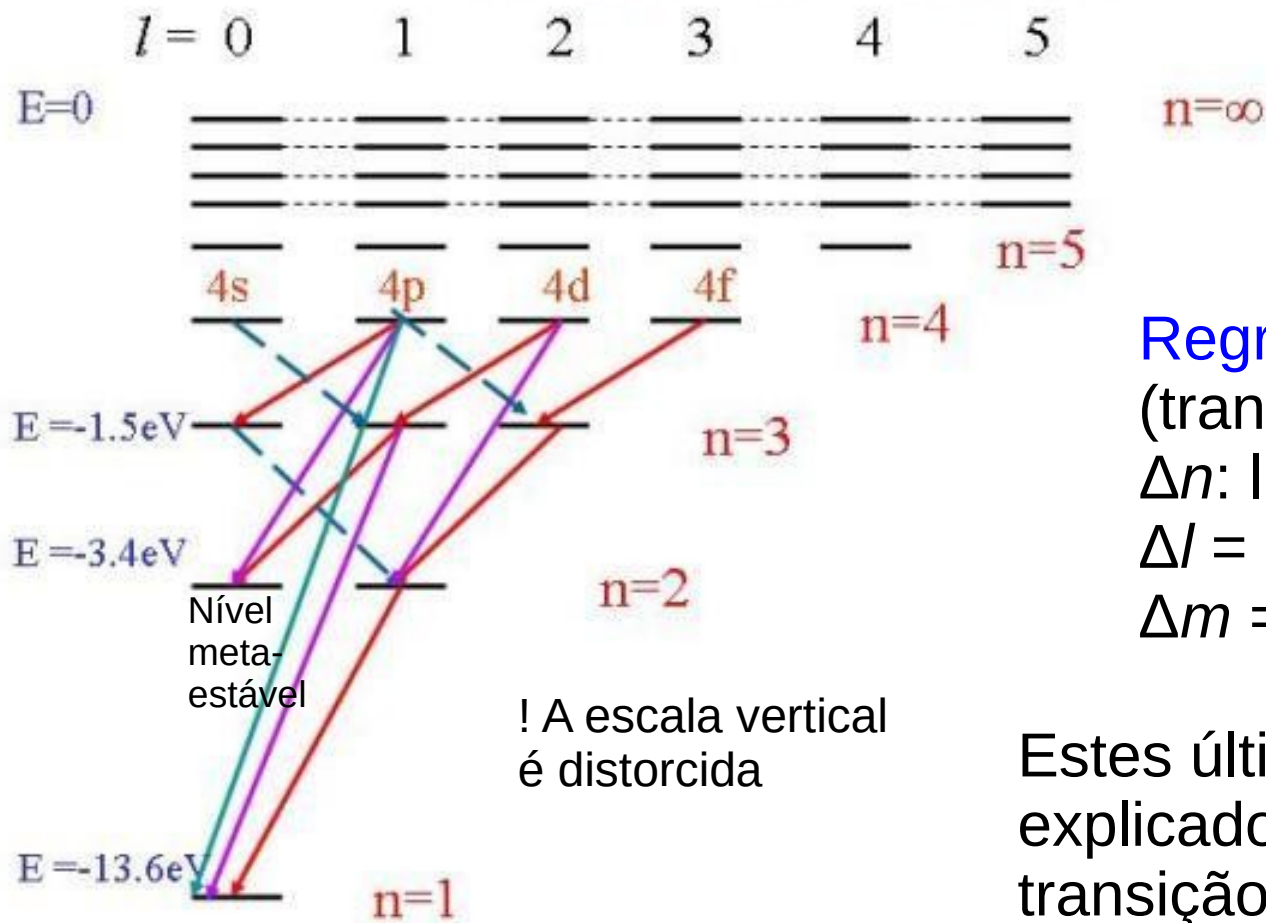
Ainda bem, senão nosso modelo mecânico-quântico não conseguiria explicar o espectro de hidrogênio.

As **energias dependem** apenas de n

=> **degenerescência** em l e m

Diagrama de Níveis de Energia

Energy level diagram



Degenerescência para níveis com o mesmo n

Regras de Seleção

(transições “permitidas”):

Δn : livre

$\Delta l = \pm 1$

$\Delta m = 0$ ou ± 1

Estes últimos dois podem ser explicados pelo fato que, em uma transição, um **fóton** é emitido ou absorvido (o fóton tem $l = 1$ e $m = -l, \dots, l = 0$ ou ± 1)

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

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

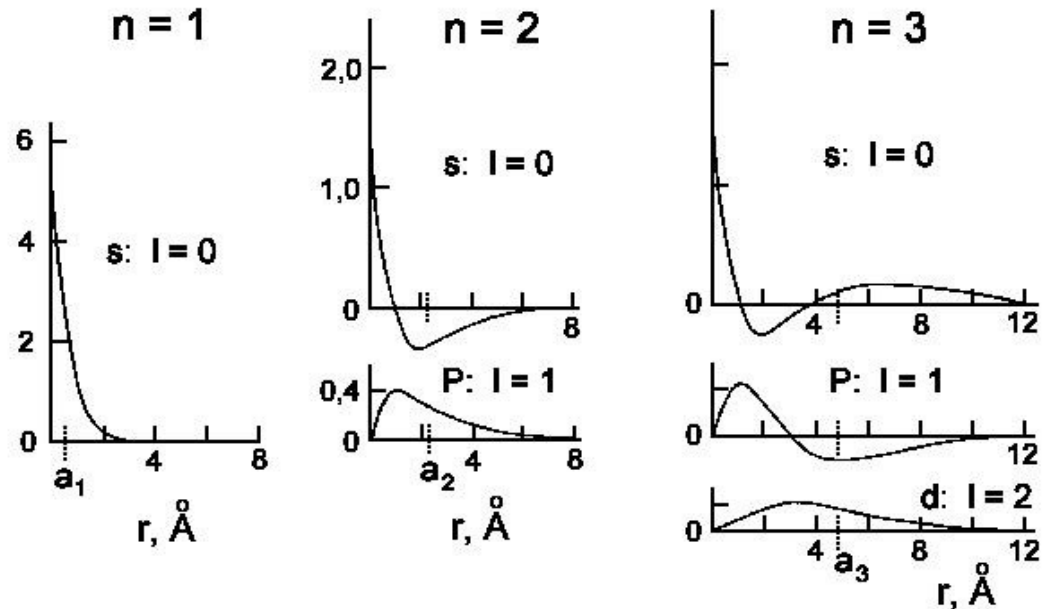
$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

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

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

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

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



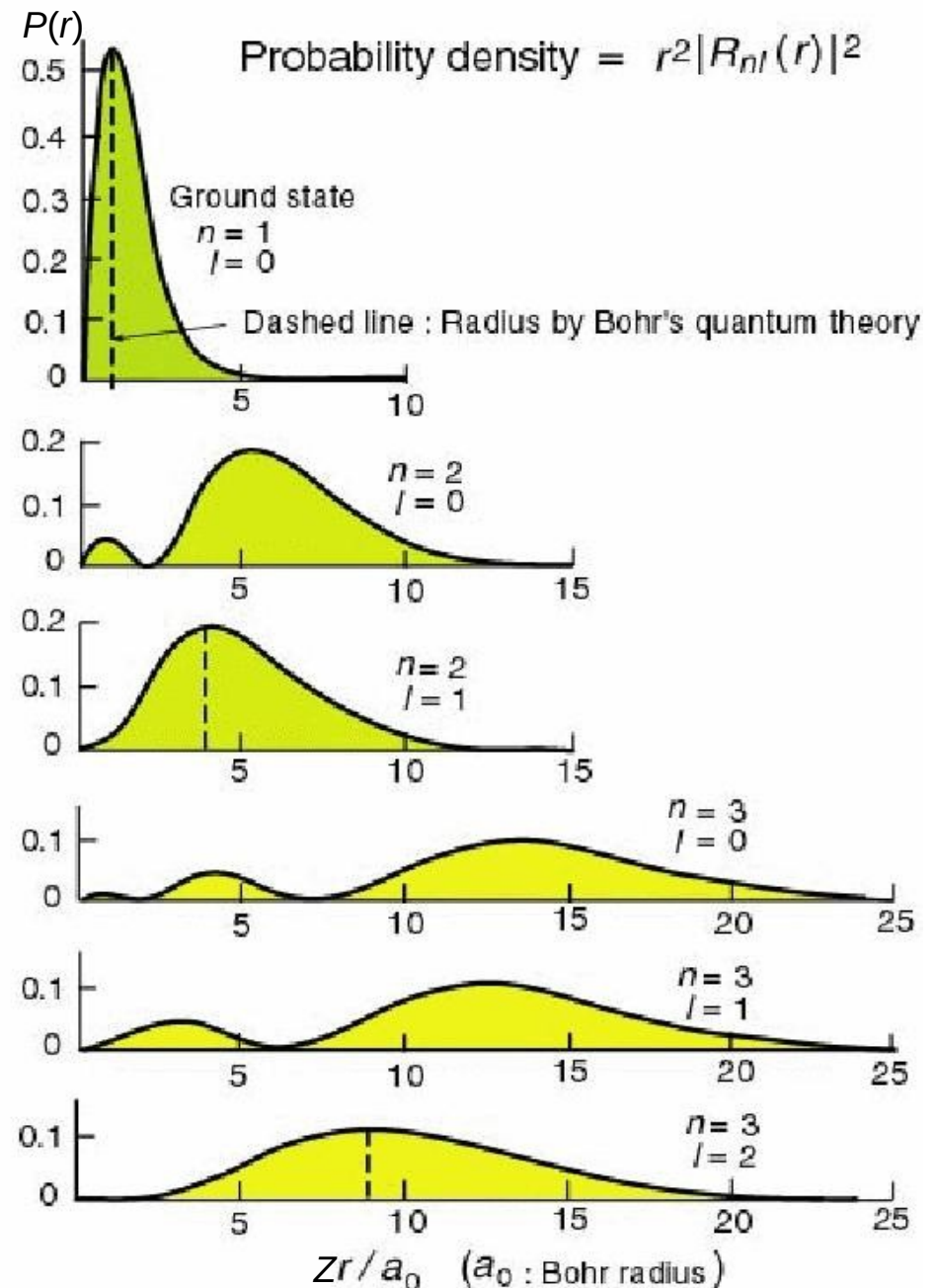
O Átomo de Hidrogênio

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

! $P(r) = 4\pi r^2 \cdot P(\mathbf{r})$ prop. $r^2 |R_{nl}(r)|^2$,
 Já que $P(\mathbf{r})$ é a probabilidade de estadia num único ponto \mathbf{r} , 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 $n^2 a_0/Z$ (fórmula exata na lista 1), 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

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	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$

O Átomo de Hidrogênio

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

$$P_{nlm}(\mathbf{r}) = |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2,$$

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

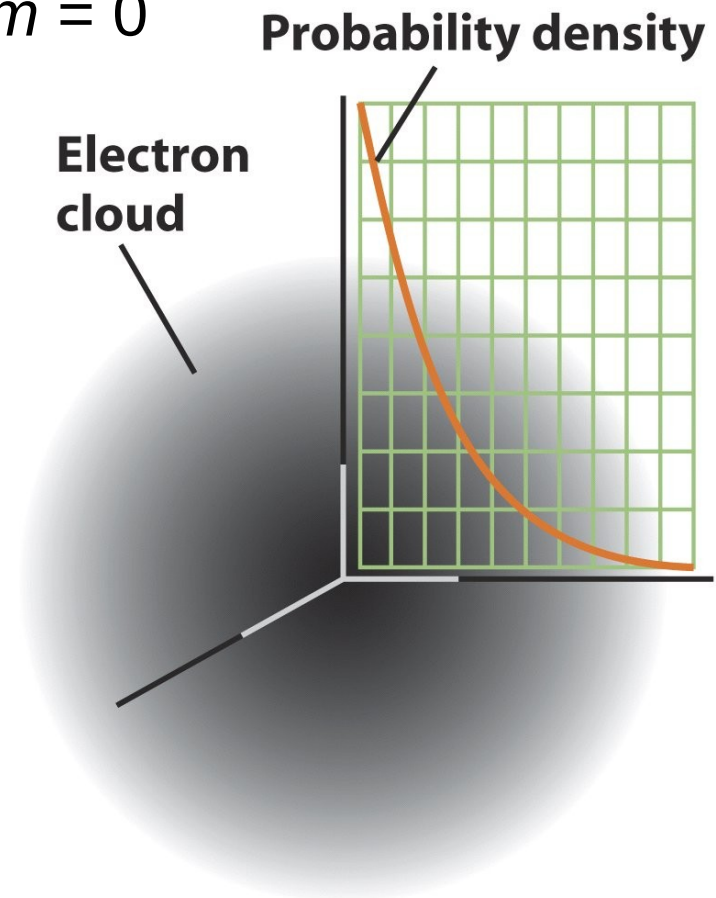
O Átomo de Hidrogênio

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**
(como todos os orbitais s)
- A **probabilidade** de estadia do elétron **cai exponencialmente** com a **distância** do núcleo.

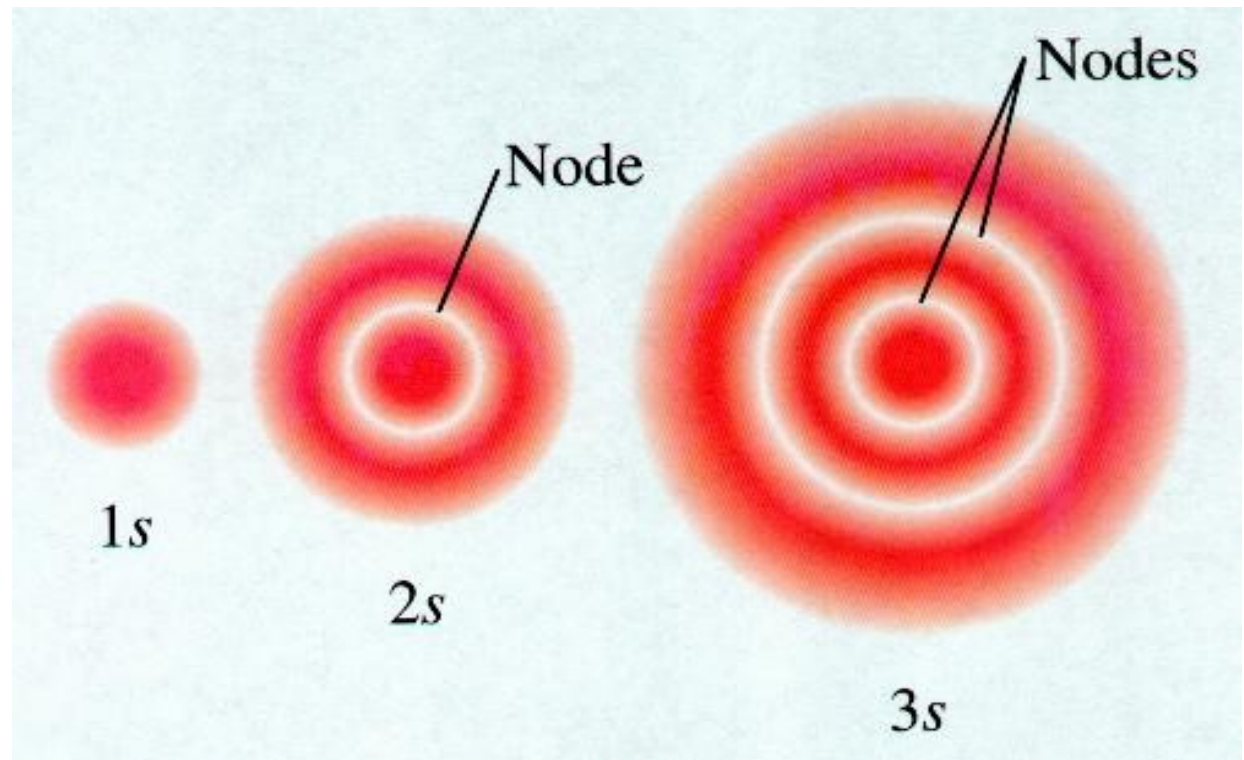
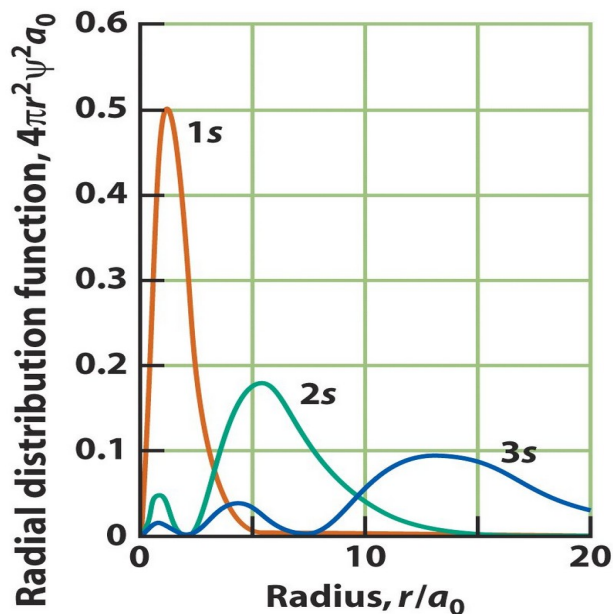


O Átomo de Hidrogênio

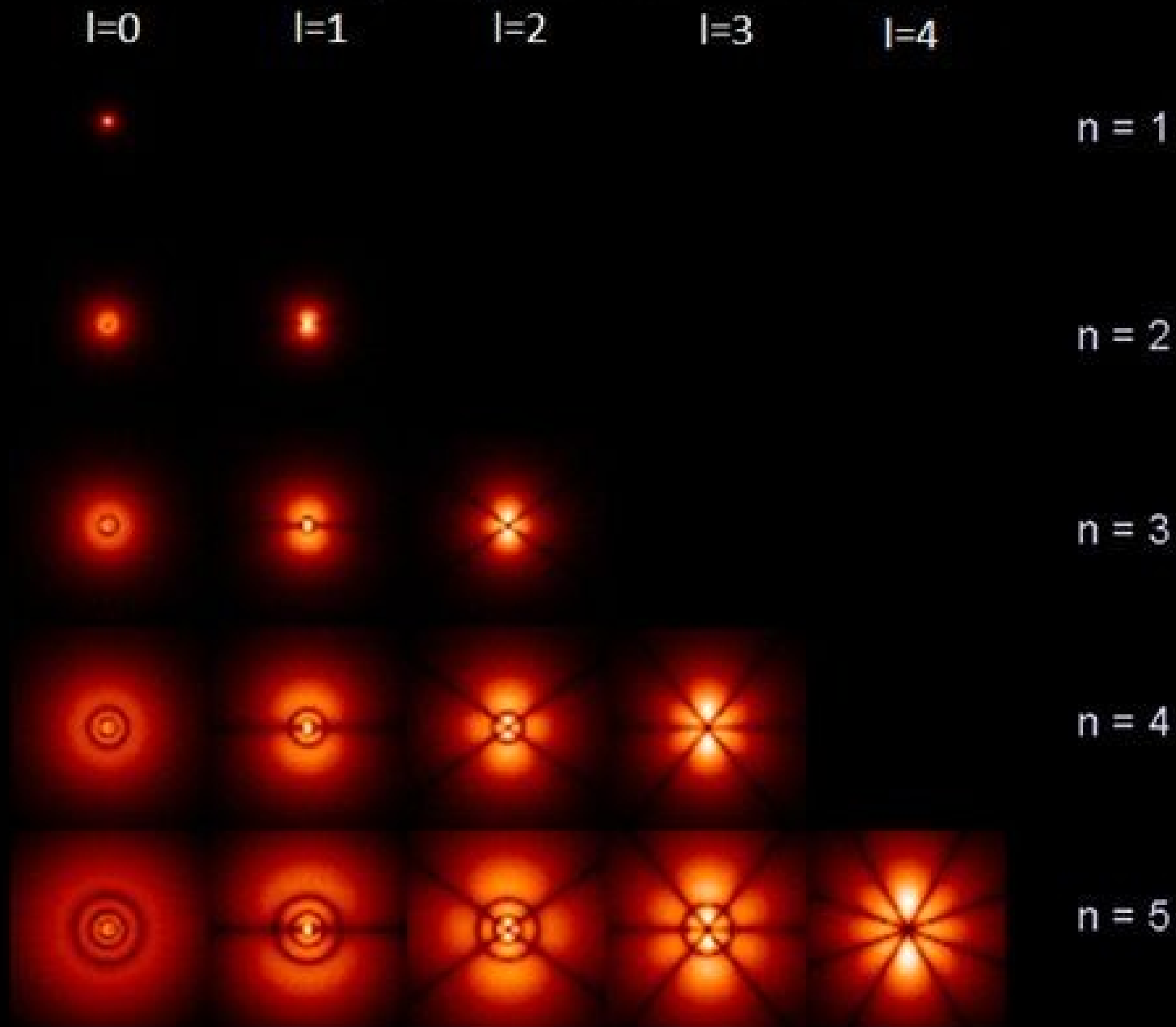
Os orbitais

Os $n-l-1$ **nós** significam que, num dado orbital, há distâncias nucleocêntricas, naquelas o elétron não pode se encontrar.

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



Hydrogen atom orbitals $m=0$



O Átomo de Hidrogênio

Resumo dos 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**, senão a mecânica quântica não conseguiria explicar o espectro de hidrogênio.

Para **hidrogenóides** (átomos com 1 e⁻), todas as funções de onda com o **mesmo n** (são n^2) têm a **mesma energia E_n** .

O conjunto das funções de onda com o mesmo n é se chama **camada**.

Deram letras às camadas.

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

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

O Átomo de Hidrogênio

Resumo dos 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 o

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	...

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

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 a **componente z**

do **momento angular**: $L_z = m \cdot \hbar$.

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

Notação Espectroscópico do Estado de um Elétron

n [código para l]

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

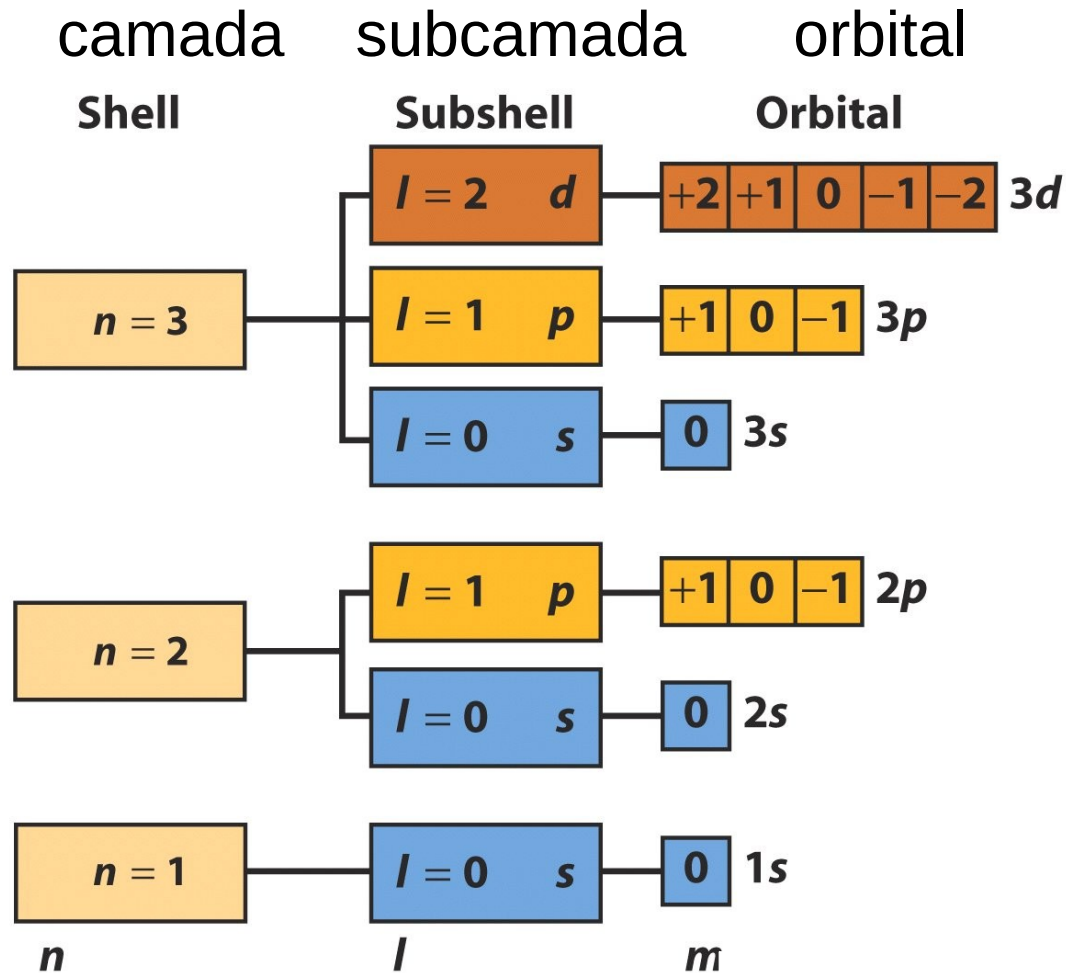
Elétron com $n = 2$, $l = 1$: $2p$

O m não aparece nesta notação.

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	+3	+2	+1	0	-1	-2	-3
4d	+2	+1	0	-1	-2		
4p	+1	0	-1				
4s	0	16					

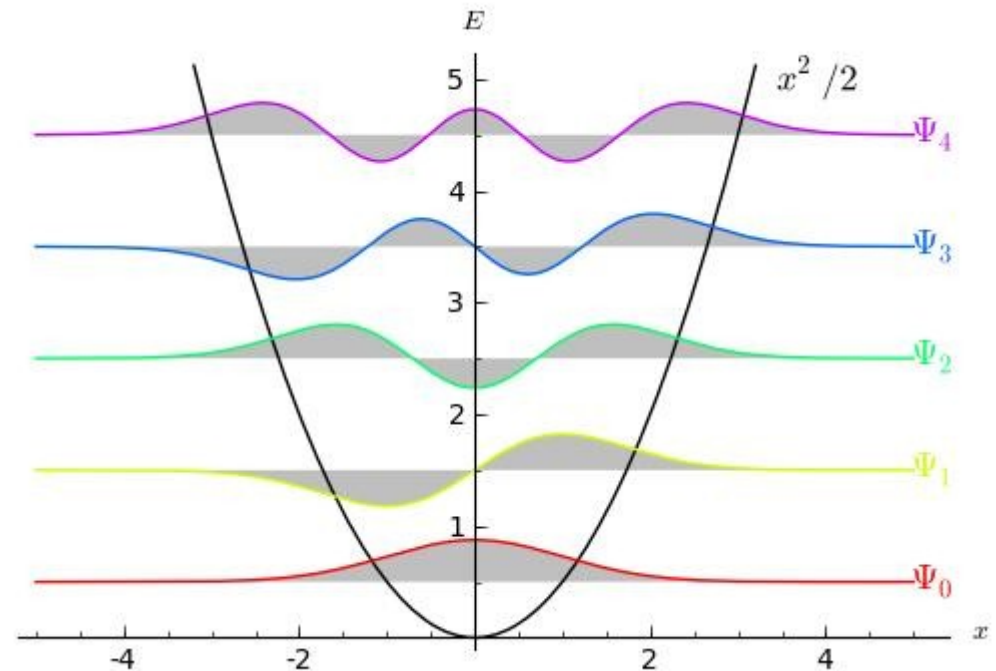
etc.

Física Quântica

FIM PARA HOJE



Universidade Federal do ABC



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