

Instituto de Física USP

Física Moderna I Aula 28

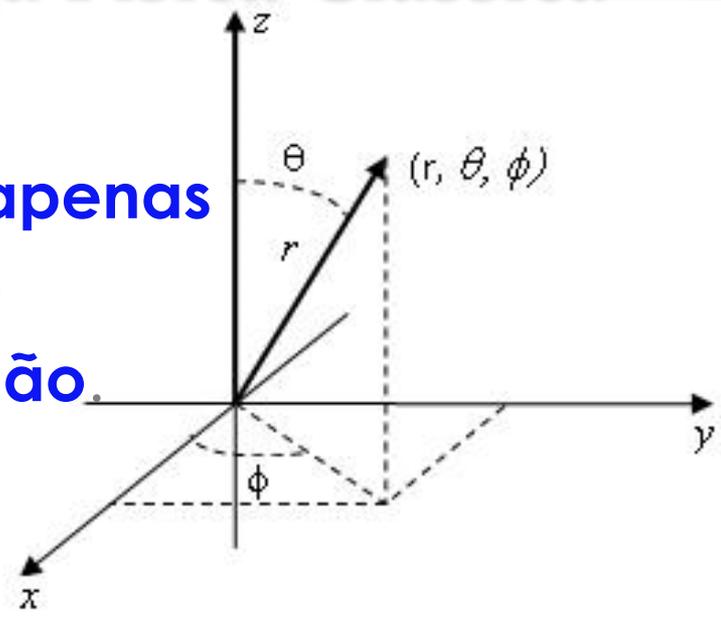
Professora: Mazé Bechara

Aula 28 – Auto estados de energia de potenciais centrais – o átomo de H

1. A conveniência de se usar as coordenadas esféricas para potenciais centrais. Os operadores energia e momento angular e quadrado de momento angular em coordenadas esféricas. A equação de auto-estados de energia de um potencial central.
2. A solução dos auto-estados de energia usando o método de separação de variáveis angulares da radial.
3. A parte angular de todas as auto-funções de energia de qualquer potencial central:
 - Conservação e quantização do módulo do momento angular e o número quântico associado;
 - Conservação e quantização da componente z do momento angular e o número quântico associado;
 - Uma imagem vetorial do momento angular dos potenciais centrais (**incluído o coulombiana atrativo que descreve o H**).
4. 4. A parte radial da equação – a solução para o átomo de H

Potencial Central na Física Clássica

- A força central depende apenas da distância à uma origem e tem a direção do vetor posição.



- O potencial é conservativo: depende só da distância r e a energia mecânica é constante.
- O vetor momento angular é uma constante de movimento (**MOSTRE!**).
- No caso de interação de duas partículas por potencial central, a energia do movimento relativo depende da massa reduzida e da distância entre elas; e a origem é uma das partículas.

Grandezas dinâmicas do *movimento relativo* de duas partículas – Física Clássica

A **energia mecânica**: cinética + potencial (constante):

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$$

○ **momento angular** do movimento relativo (constante: variação no tempo igual ao torque):

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

○ **momento linear** do movimento relativo (variação no tempo igual à força):

$$\vec{p} = \mu \frac{d\vec{r}}{dt}$$

A origem de r ($r=0$) está em uma das duas partículas. μ é a massa reduzida.

As coordenadas esféricas e as cartesianas

$$-\infty < x < +\infty$$

$$-\infty < y < +\infty$$

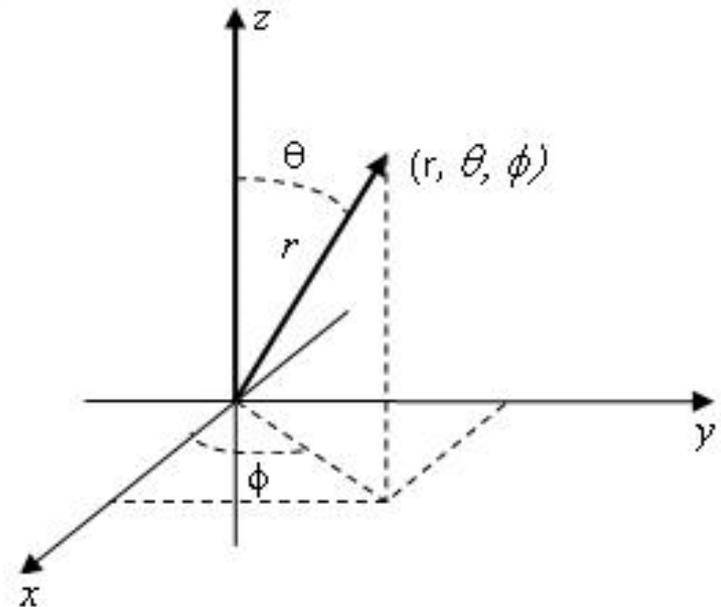
$$-\infty < z < +\infty$$

$$0 \leq r < \infty$$

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$

$$dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = r^2 r d\Omega$$



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

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} =$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Operadores componentes e módulo ao quadrado do momento angular em coordenadas esféricas

(Só têm sentido físico na Mecânica Quântica)

$$L_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi},$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right).$$

A equação de Schroedinger para auto-estados de energia de um potencial central $V(r)$ no movimento relativo de duas partículas

1. Lembre-se que nos auto-estados de energia:

$$\psi(r, \theta, \phi, t) = \varphi(r, \theta, \phi) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

2. No caso do movimento relativo a origem do potencial é uma das duas partículas que interagem.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial}{r^2 \partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \varphi(r, \theta, \phi) + V(r) \varphi(r, \theta, \phi) = E \varphi(r, \theta, \phi)$$

3. Há **um conjunto particular de soluções** nas quais se separa as variáveis angulares da radial:

$$\{ \varphi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \}$$

- **Multiplicando a equação de Schroedinger por $2\mu r^2$ e dividindo à direita por $R(r)Y(\theta, \phi)$ se pode deixar todos os termos com dependência angular em um lado da equação e todos com dependência radial do outro, o que exige que sejam iguais a uma constante C (resultado nas transparências seguintes).**

Equação da parte angular (dedução em classe)

- A equação da parte angular (a mesma para todo potencial central $V(r)$):

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = C Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = \\ = \hat{L}^2 Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi)$$

- Observe que vale também:

$$\hat{L}_z Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = m_\ell \hbar Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi)$$

• Resultados

- (1) Impondo que $Y(\theta, \phi)$ seja finita, contínua, com derivadas contínuas, normalizáveis e $Y(\theta, 0) = Y(\theta, 2\pi)$, chega-se nas condições: $C = \ell(\ell + 1)$ com $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ e $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$.

Estas funções são chamadas de harmônicas esféricas

Resultados da parte angular da função de onda de potenciais centrais

(2) Todo o potencial central tem o quadrado do momento angular constante e quantizado, ou seja, **o módulo do momento angular é constante e quantizado** $L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$ **com número quântico** $\ell=0,1,2\dots(n-1)$. (Aguarde o número quântico $n=1,2,3\dots$ que aparece em $R(r)$).

(2) **A componente z do momento angular é quantizada com número quântico m_ℓ : $L_z = m_\ell \hbar$**
 $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm \ell$.

Equação da parte radial (em classe)

- A equação da parte radial para qualquer potencial central (**diferente para cada potencial**):

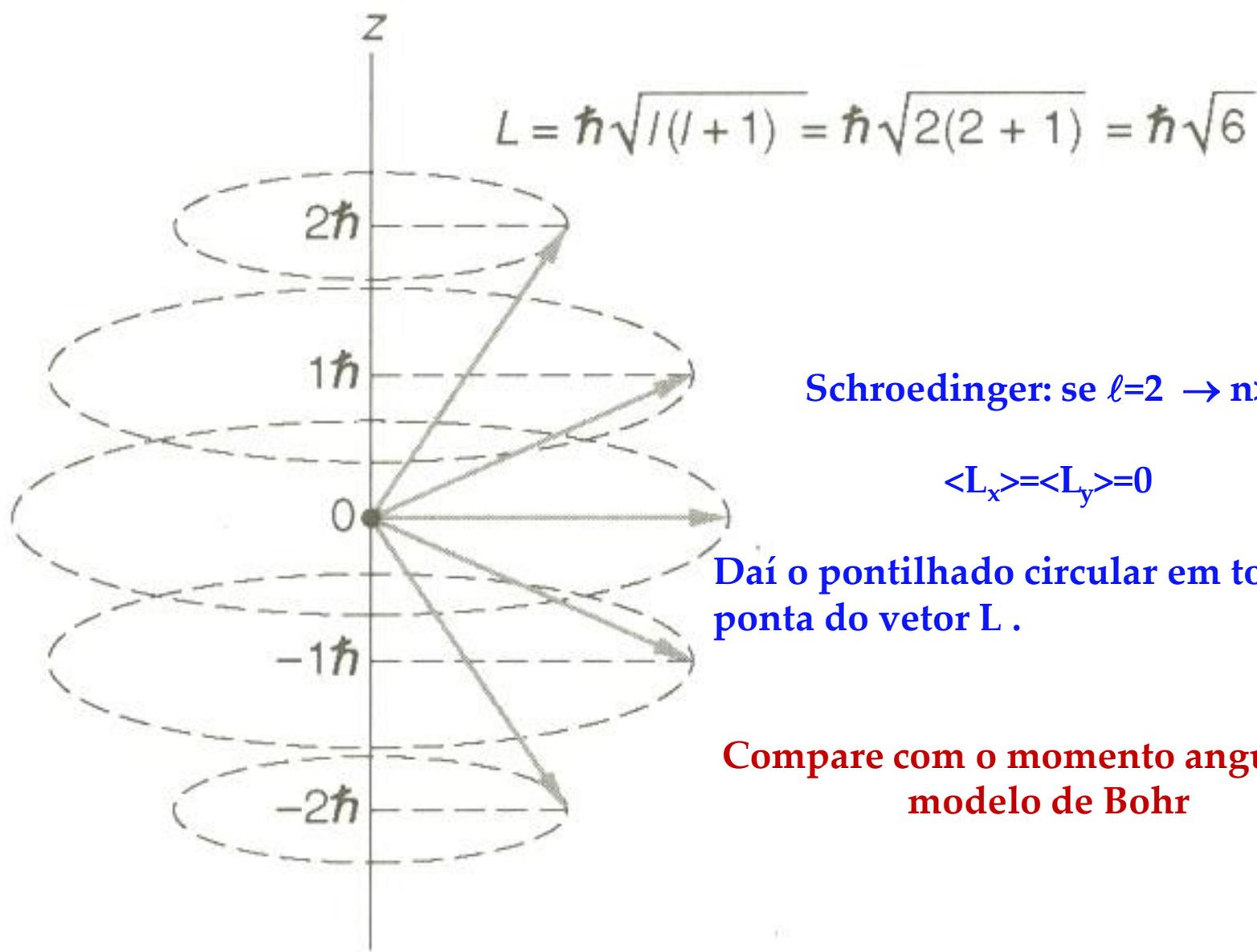
$$\left\{ \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2\mu r^2 \left[E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \right\} R(r) = 0$$

- Para o átomo de H:**

$$\left\{ \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2\mu r^2 \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \right\} R_{n,\ell}(r) = 0$$

- Deve ser imposta a condição de $R(r)$ finita, contínua, com derivada contínua para todo r e normalizável, ou seja, $R(0)=R(\infty)=0$.
- Energia só depende de $n=1,2,3,\dots!!!$ Igualzinho o resultado de Bohr!!! Mas a função (estado) depende de n e ℓ e m_ℓ .**

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu}{2\hbar^2} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right]^2 = -\frac{1}{n^2} 13,60 eV$$



Schroedinger: se $l=2 \rightarrow n>2$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

Daí o pontilhado circular em torno da ponta do vetor L .

Compare com o momento angular do modelo de Bohr

Fig. 7-4 Modelo vetorial ilustrando as orientações possíveis de L no espaço e os valores possíveis de L_z para o caso em que $l = 2$.

Normalização da função de onda em coordenadas esféricas – potenciais centrais

$$\begin{aligned} \iiint_{\text{todo espaço}} \psi^*(r, \theta, \phi, t) \psi(r, \theta, \phi, t) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi &= \\ = \int_0^r r^2 |R_{n,l}(r)|^2 dr \iint_{\text{todo } \theta \phi} Y_{l,m_l}^*(\theta, \phi) Y_{l,m_l}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi &= 1 \\ \int_0^r r^2 |R_{n,l}(r)|^2 dr &= 1 \\ \iint_{\text{todo } \theta \phi} Y_{l,m_l}^*(\theta, \phi) Y_{l,m_l}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi &= 1 \end{aligned}$$

- **A parte radial e a parte angular da função de onda são normalizadas de forma independente.**

Tabela 7-1 Harmônicos esféricos

$l = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$l = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8}\pi} \operatorname{sen} \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4}\pi} \cos \theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8}\pi} \operatorname{sen} \theta e^{-i\phi}$
$l = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \operatorname{sen}^2 \theta e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \operatorname{sen} \theta \cos \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \operatorname{sen} \theta \cos \theta e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \operatorname{sen}^2 \theta e^{-2i\phi}$

Nota: Para uma representação tridimensional dos harmônicos esféricos, consulte a página da Internet <http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qeg/harmonics/charmonics.html>

**Funções
normalizadas**

Tabela 7-2 Funções radiais do átomo de hidrogênio

Funções normalizadas

$$n = 1 \quad l = 0 \quad R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

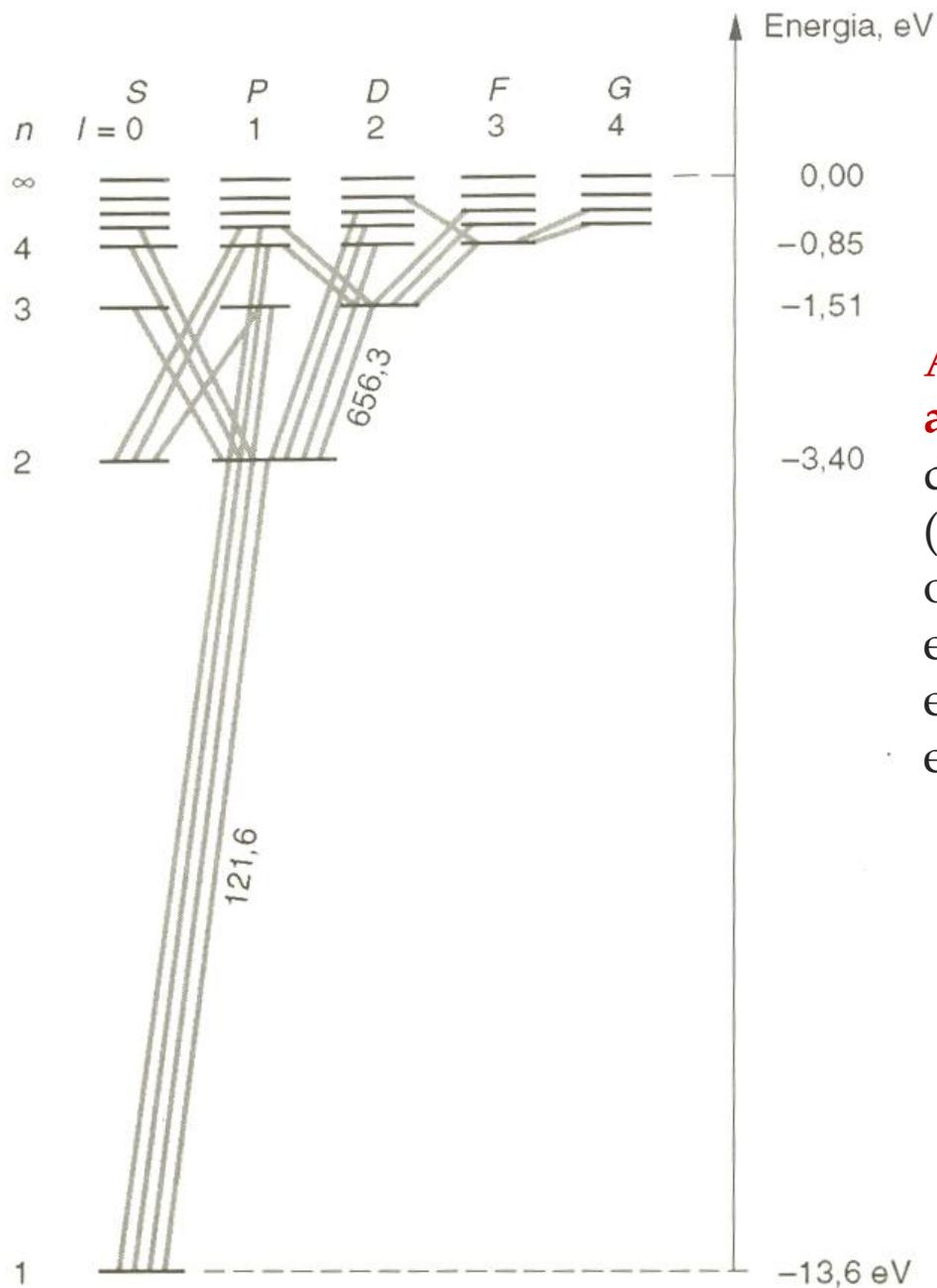
$$n = 2 \quad l = 0 \quad R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

$$l = 1 \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$n = 3 \quad l = 0 \quad R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$l = 1 \quad R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$l = 2 \quad R_{32} = \frac{4}{8\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$$



A degenerescência dos auto-estados de energia: diferentes estados (diferentes funções de onda) com a mesma energia. Nesta figura só estão diferenciados os estados com diferentes l .

Compare com o modelo de Bohr