

Instituto de Física USP

Física Moderna I Aula 29

Professora: Mazé Bechara

Aula 29– O átomo de hidrogênio na teoria de Schroedinger

1. A solução do átomo de H na teoria de Schroedinger. Comparação com os resultados de Bohr.
2. Os estados degenerados em energia: estados de mesma energia e diversos módulos de momento angular e diferentes componente z do momento angular.
3. As funções de onda, **as densidades volumétricas** de probabilidade e as **densidades radiais** de probabilidade: diferenças e significados. A simetria esférica em Schroedinger.
4. Aplicação: o valor mais provável e o valor médio da distância do elétron ao núcleo no estado fundamental: comparação com o raio do movimento relativo no Modelo de Bohr.

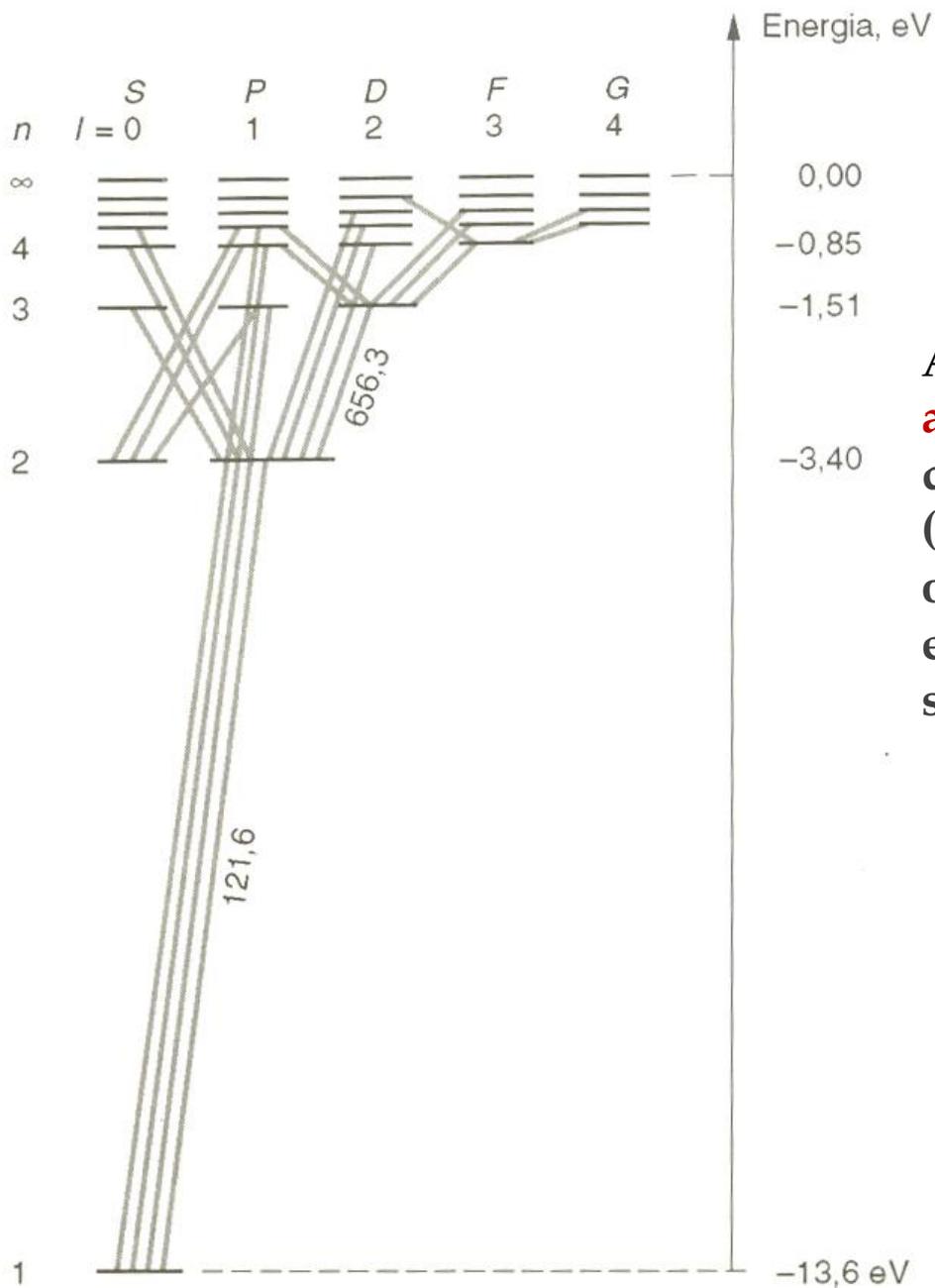
Tabela 7-1 Harmônicos esféricos

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

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

Tabela 7-2 Funções radiais do átomo de hidrogênio

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



A **degenerescência dos auto-estados de energia:** diferentes estados (diferentes funções de onda) com a mesma energia (aqui agrupados só nos diferentes l)

Compare com o modelo de Bohr!

Estados degenerados em energia do átomo de H na teoria de Schroedinger

1. Estado fundamental: $n=1$, $l=0$ e $m_l=0 \rightarrow$

(um estado s); não há degenerescência em energia (só há um estado com esta energia)

2. Primeiro estado excitado: $n=2$

$l=0$ e $m_l=0$ (um estado s);

$l=1$ e $m_l=1$; $l=1$ e $m_l=0$; $l=1$ e $m_l=-1$ (três estado p);

Quatro diferentes estados com mesma energia \rightarrow nível de degenerescência = 4

3. Segundo estado excitado: $n=3$

$l=0$ e $m_l=0$ (um estado s);

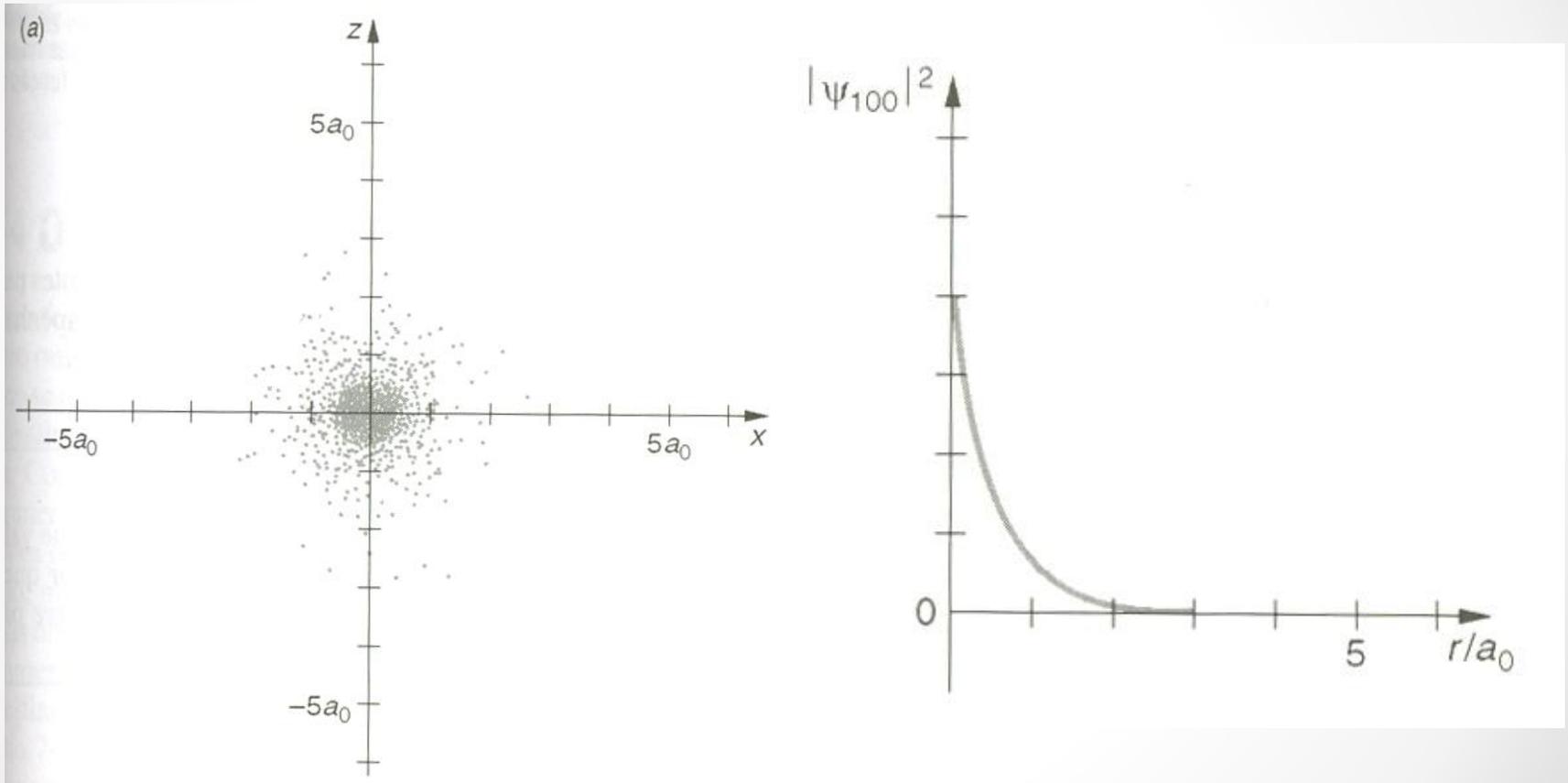
$l=1$ e $m_l=1$; $l=1$ e $m_l=0$; $l=1$ e $m_l=-1$ (três estado p);

$l=2$ e $m_l=2$; $l=2$ e $m_l=1$; $l=2$ e $m_l=0$; $l=2$ e $m_l=-1$;

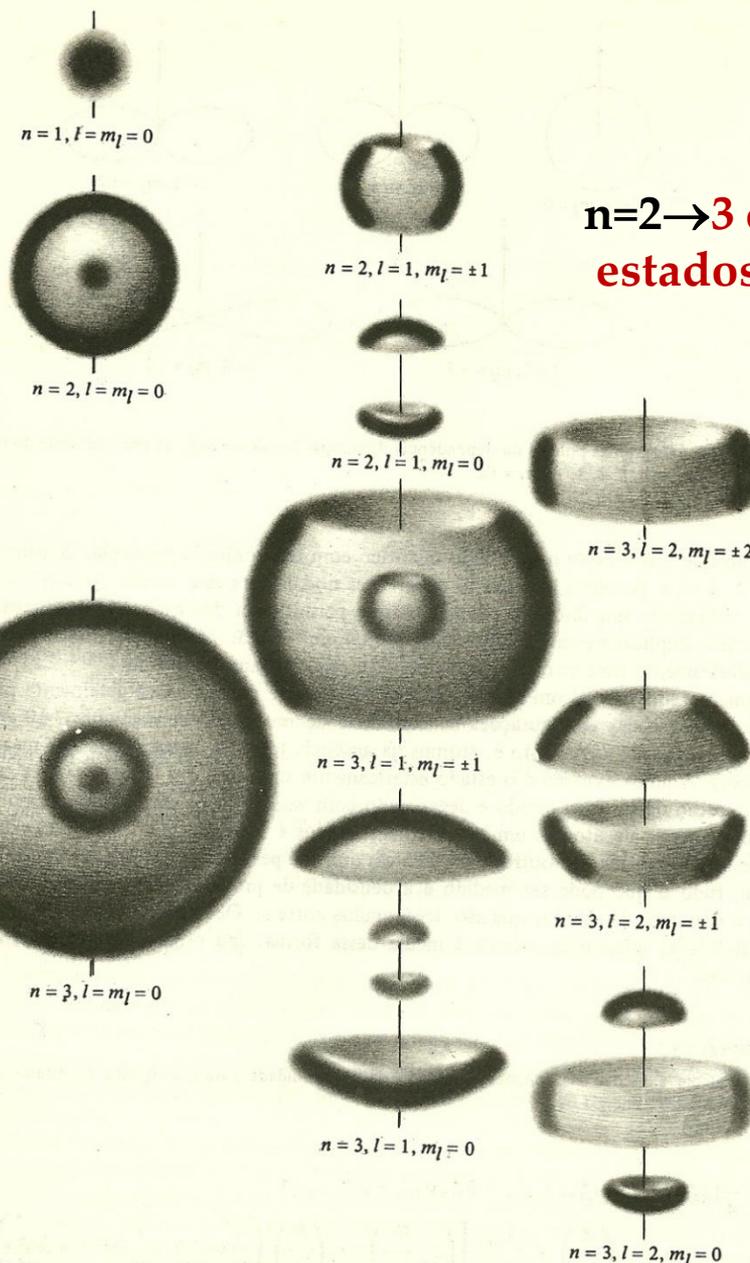
$l=2$ e $m_l=-2$; (cinco estados d);

• Nove diferentes estados com mesma energia \rightarrow nível de degenerescência = 9

Duas representações no plano para a densidade volumétrica de probabilidade do estado fundamental do átomo de H



$n=1 \rightarrow EF$



$n=2 \rightarrow 3$ diferentes primeiros estados excitados

Observe a simetria esférica do potencial sendo reproduzida na probabilidade de estar em todos os diferentes estados de mesma energia.

$n=3 \rightarrow 9$ diferentes segundos estados excitados

FIGURA 7-10. Uma concepção artística do aspecto tridimensional de várias funções densidade de probabilidade do átomo de um elétron. Para cada um dos desenhos o eixo dos z está representado por uma linha vertical. Se todas as densidades de probabilidade para um dado n e l forem combinadas, o resultado será esfericamente simétrico.

A densidade radial de probabilidade dos estados do átomo de H

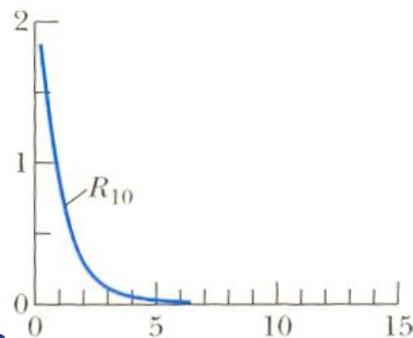
- **Densidade radial de probabilidade = probabilidade do elétron estar a uma distância entre r e $r+dr$ do núcleo dividido por dr (independente da direção do vetor posição):**

$$P_{n,\ell}(r) = r^2 \int \int_{\text{todo } \theta \text{ e } \phi} \psi^*(r, \theta, \phi, t) \psi(r, \theta, \phi, t) \sin \theta d\theta d\phi =$$
$$= r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 \int \int_{\text{todo } \theta \text{ e } \phi} Y_{\ell, m_\ell}^*(\theta, \phi) Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2$$

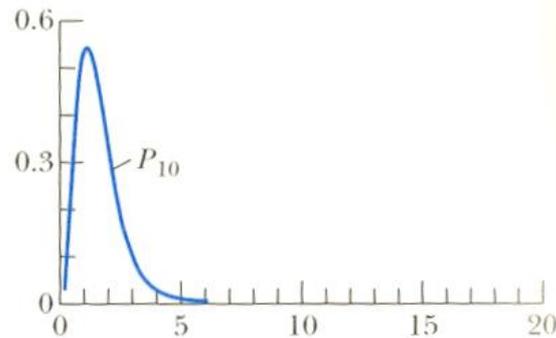
- **As funções harmônicas esféricas estão normalizadas**
- **Densidade radial do estado fundamental:**

$$P_{1,0}(r) = r^2 |R_{1,0}|^2 = r^2 \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

Radial wave functions ($R_{n\ell}$)

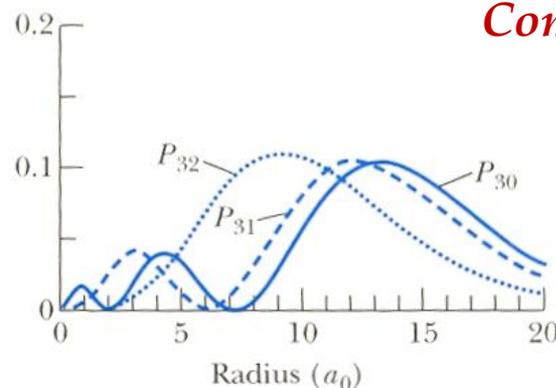
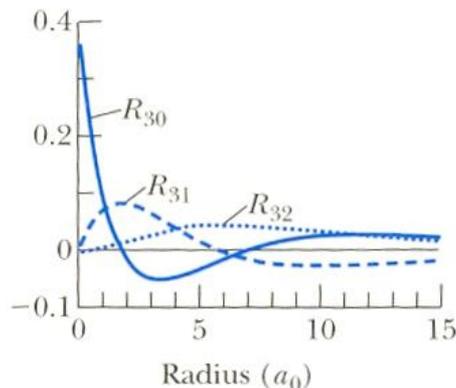
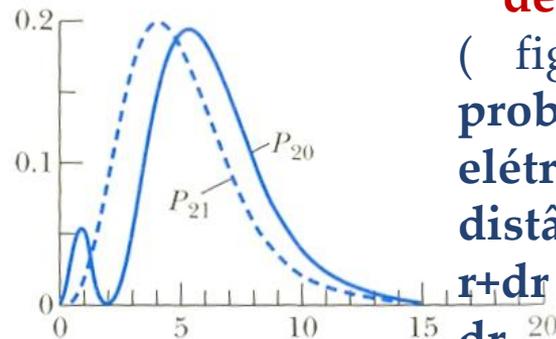
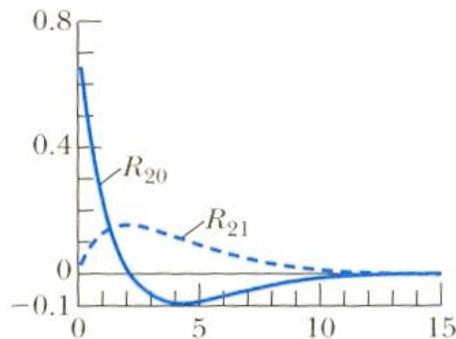


Radial probability distribution ($P_{n\ell}$)



As funções de onda da parte radial $R_{n\ell}$ (à esquerda).

A densidade radial de probabilidade (figuras à direita) probabilidade de o elétron estar a uma distância entre r e $r+dr$ do núcleo por dr .



Compare com o raio de Bohr!

Função de onda, energia e densidade radial do EF do H

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi, t) = Y_{0,0}(\theta, \phi) R_{1,0}(r) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \frac{2}{\sqrt{a_o^3}} e^{-\frac{r}{a_o}} e^{-i\frac{\mu}{2\hbar^2} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o}\right]^2 t}$$

$$E_1 = -\frac{1}{1^2} \frac{\mu}{2\hbar^2} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o}\right]^2 = -13,60 eV$$

$$a_o = r_B = \frac{4\pi\epsilon_o\hbar^2}{\mu} = 0,529 \text{ \AA}$$

A densidade radial de probabilidade do EF:

$$P_{1,0}(r) = r^2 |R_{1,0}|^2 = r^2 \frac{4}{a_o^3} e^{-\frac{2r}{a_o}}$$

O valor mais provável e o valor médio do “raio” do átomo de H no EF

- Determinação do valor mais provável da distância entre o elétron e o núcleo no EF do H (“raio” mais provável no EF):

$$\frac{dP_{1,0}(r)}{dr} = 2r \frac{4}{a_o^3} e^{-\frac{2r}{a_o}} + r^2 \frac{4}{a_o^3} \left(-\frac{2r}{a_o}\right) e^{-\frac{2r}{a_o}} = 0$$
$$r_{+p(EF)} = a_o = r_B$$

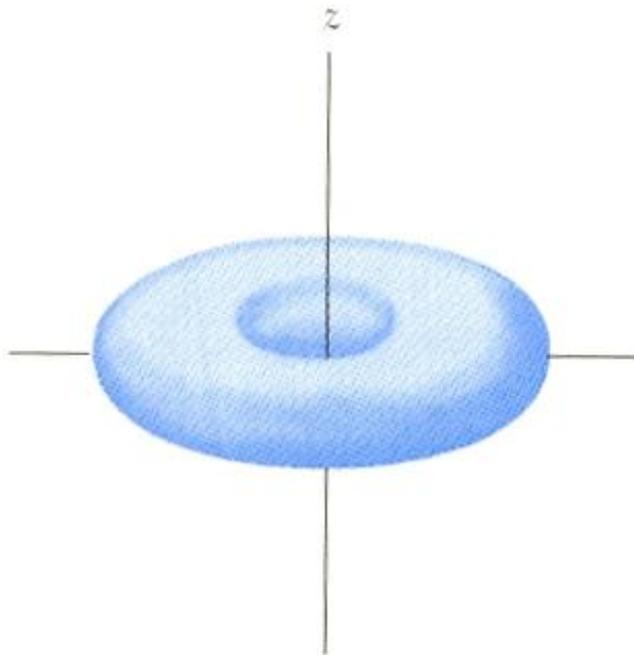
- Determinação da **distância média** no movimento relativo (“raio” médio) **(refaça)**:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} P_{1,0}(r) dr = \int_0^{\infty} r r^2 \frac{4}{a_o^3} e^{-\frac{2r}{a_o}} dr = \frac{3}{2} a_o \equiv \frac{3}{2} r_B$$

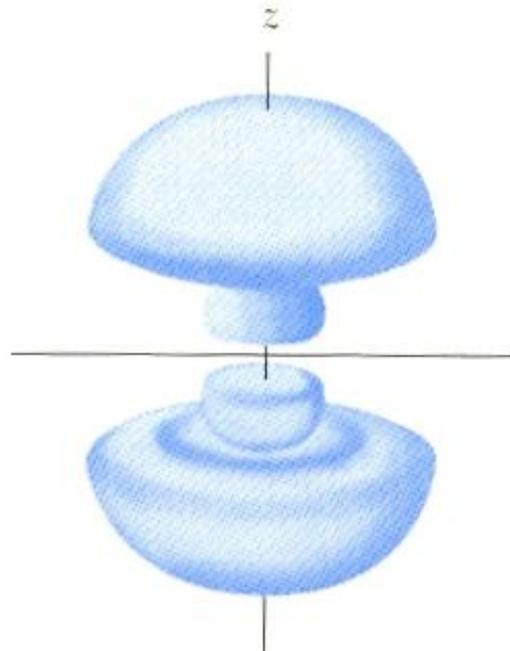
- Foi usada a integral:

$$\int x^n e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = n! \alpha^{n+1}$$

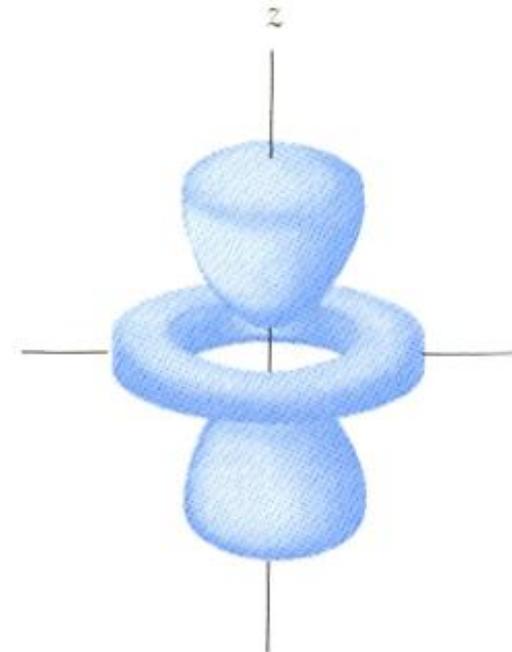
DENSIDADES VOLUMÉTRICAS DE PROBABILIDADE DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO



$$\begin{aligned}n &= 2 \\ \ell &= 1 \\ m_\ell &= \pm 1\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}n &= 3 \\ \ell &= 1 \\ m_\ell &= 0\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}n &= 3 \\ \ell &= 2 \\ m_\ell &= 0\end{aligned}$$

Veja mais em: <http://www.itp.uni-hannover.de/~zawischa/ITP/atoms.html>

Comentários finais

1. As transições entre estados do H quando há apenas a interação coulombiana só se explica com estados mistos. E estes justificam corretamente a emissão de fótons com energia igual a diferença entre as energias dos estados atômicos. Todos os estados estacionários da MQ tem $\Delta E=0$, e portanto deveria ter $\Delta t \sim \tau \rightarrow \infty$.
2. *Observe que as funções harmônicas esféricas têm paridade bem definida: ou são pares ou ímpares.*
3. *Observe também que, apesar das funções de onda dependerem do ângulo ϕ , as densidades de probabilidade nunca dependem de ϕ , o que significa que não dependem da componente z de L. (Vocês repararam na simetria azimutal (em torno do eixo do z) das figuras das distribuições?)*
4. *Mas se for colocado um campo magnético interno ou externo... se observa o que a teoria prediz. Bem, é quase isto!*
Mas esta é uma outra história que fica para uma outra vez....contada no próximo semestre pelo Marcão.

Ops... pelo Prof Martins.

PRAZER EM CONHECE-LOS!

- *Mesmo que vocês não
possam dizer o mesmo!*

Mazé