

Física Moderna I

Aula 16

Marcelo G Munhoz
Edifício HEPIIC, sala 212, ramal 916940
munhoz@if.usp.br

Átomo de um elétron

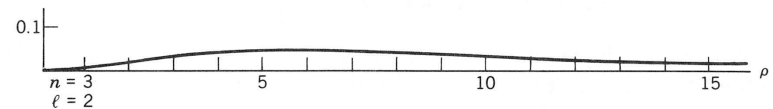
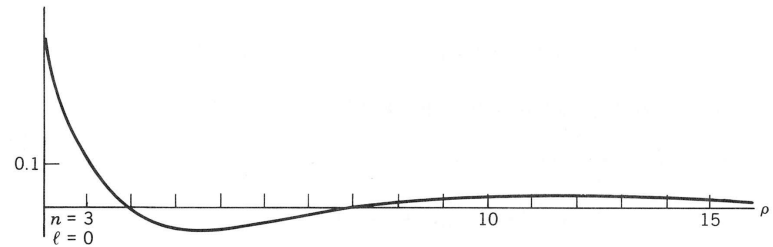
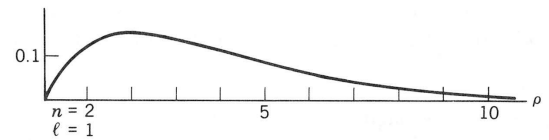
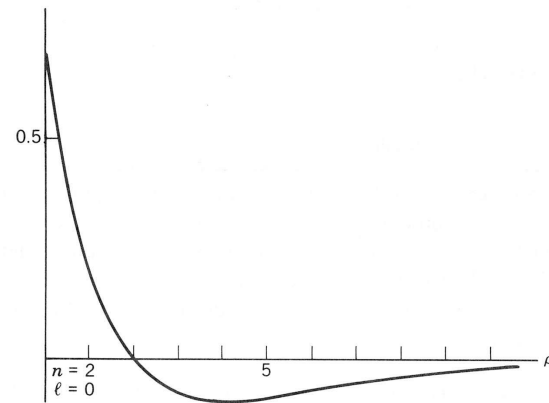
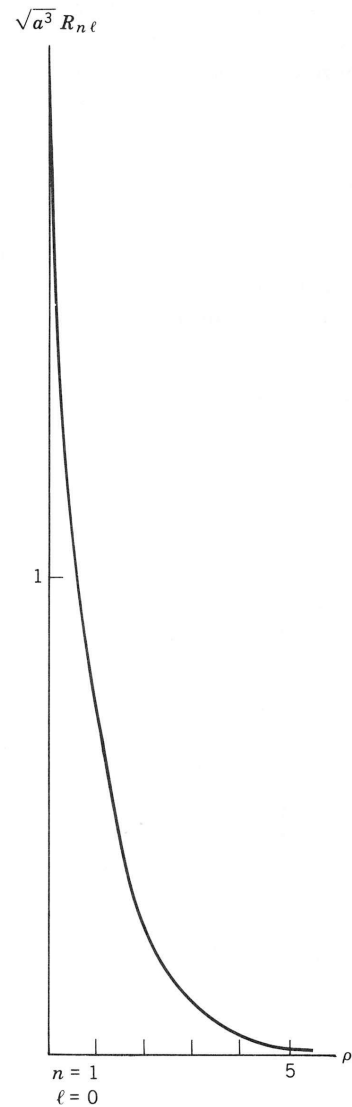
- Como podemos descrever um átomo que contenha apenas um elétron através da Teoria de Schroedinger?
- Como o resultado se compara com o Modelo de Bohr?
- Este é um sistema físico cujo potencial é dado por: $V(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Átomo de um elétron

- Função de onda radial

$n = 1$	$\ell = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\rho}$
$n = 2$	$\ell = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) e^{-\rho/2}$
	$\ell = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a^3}} \rho e^{-\rho/2}$
$n = 3$	$\ell = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a^3}} \left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2 \right) e^{-\rho/3}$
	$\ell = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a^3}} \rho \left(1 - \frac{\rho}{6} \right) e^{-\rho/3}$
	$\ell = 2$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a^3}} \rho^2 e^{-\rho/3}$

Átomo de um elétron



Átomo de um elétron

- Portanto, a função de onda do átomo de um elétron é dada por:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

- Qual o significado dos índices n, l e m_l ?
- Esses índices, chamados de números quânticos do átomo de um elétron, podem assumir os valores:
 - $n = 1, 2, 3, \dots$
 - $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
 - $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

Número Quântico Principal

- Número quântico principal é o índice n
- Ele está associado à parte radial da função de onda e aparece devido às condições de contorno do problema
- Como o elétron está ligado ao átomo, a energia é quantizada e dada por:
$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right) \frac{1}{n^2}$$
- Esta expressão é idêntica à do modelo de Bohr!
- Portanto, a energia do elétron no átomo depende apenas do número quântico principal (degenerescência)

Número Quântico do Momento Angular Orbital

- O índice l é chamado de número quântico do momento angular orbital ou número quântico azimutal
- Ele representa o valor esperado para o módulo do momento angular do elétron no átomo, ou seja:

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

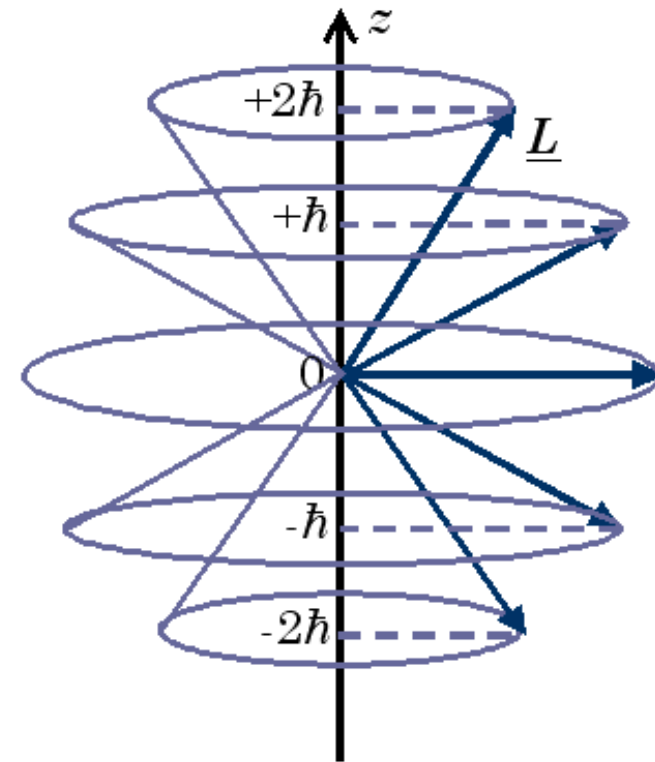
Número Quântico Magnético

- O índice m_l é de número quântico magnético
- Ele representa o valor esperado para uma das componentes do momento angular, normalmente atribuída ao eixo-z

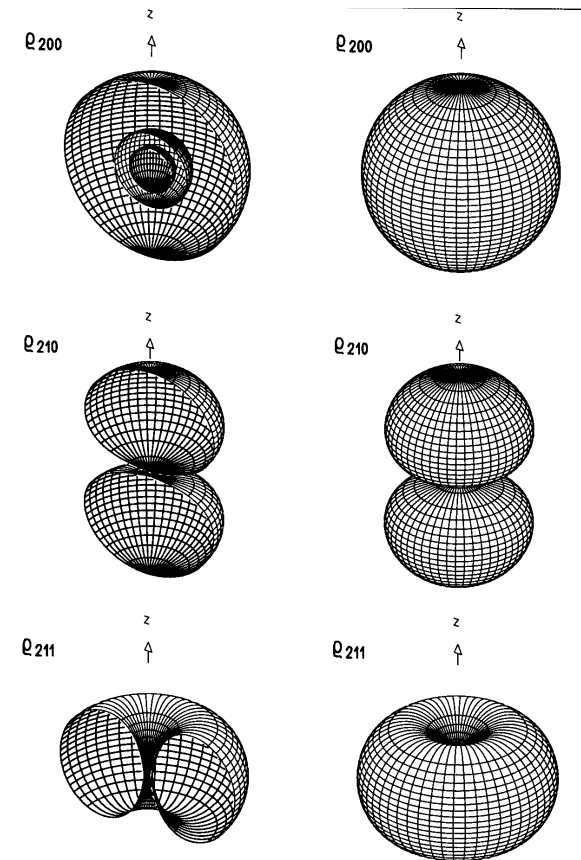
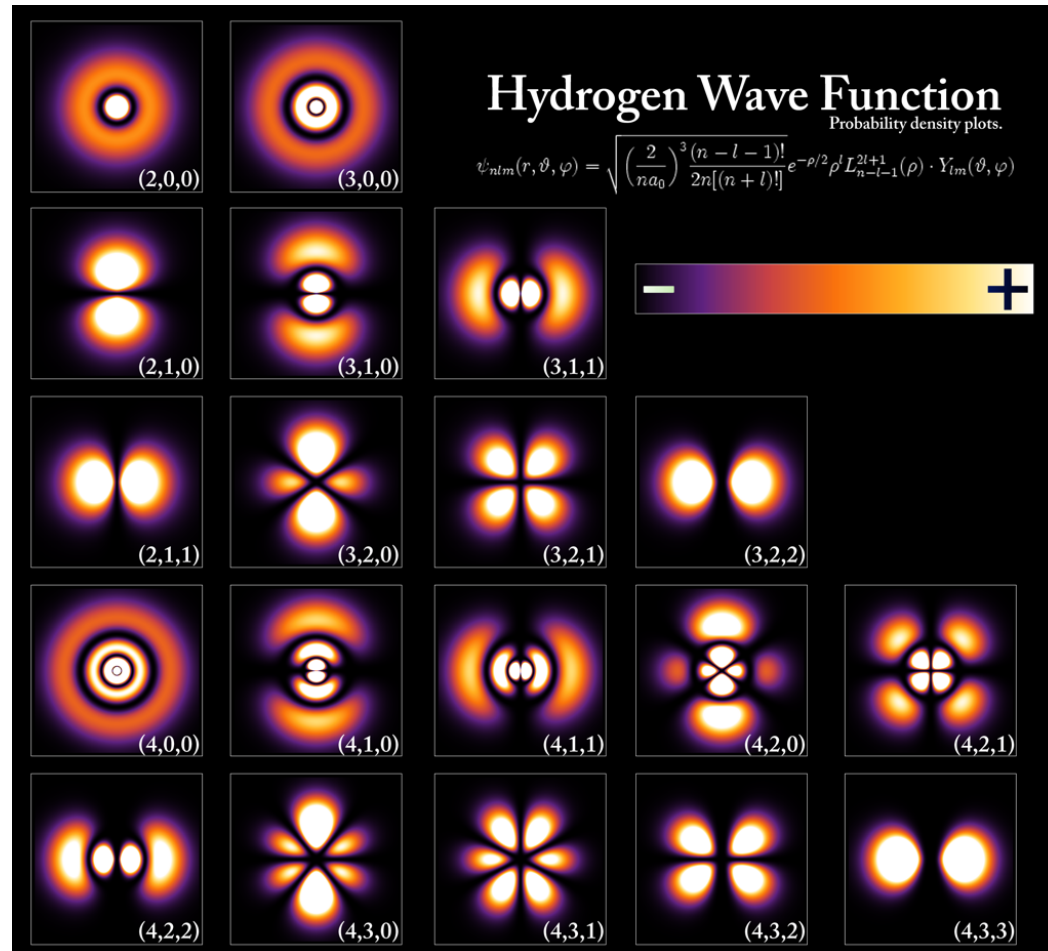
$$L_z = \hbar m_l$$

Quantização do momento angular

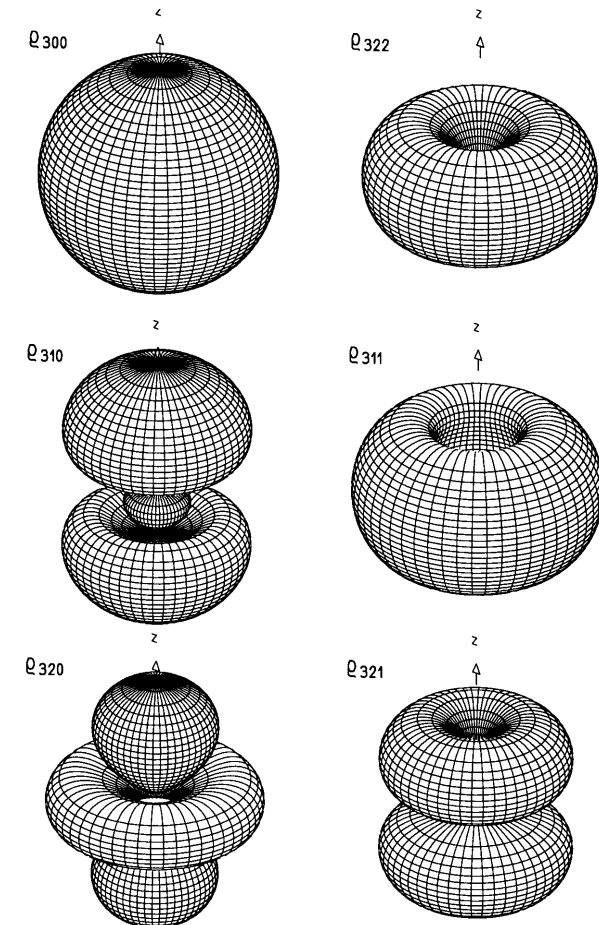
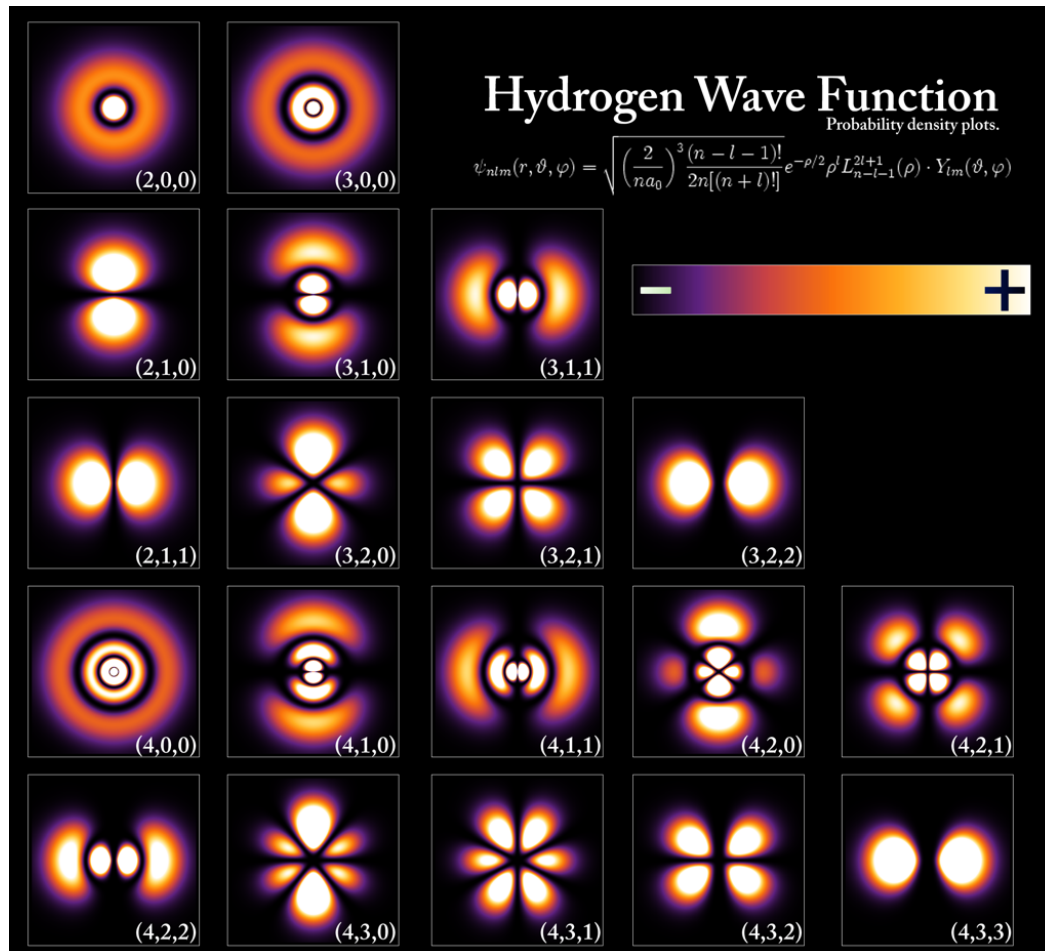
- Como $l(l+1)$ e m_l representam o momento angular, e esses números quânticos só podem assumir valores inteiros, concluimos que o momento angular também é quantizado
- Porém, essa quantização é diferente daquela proposta por Bohr



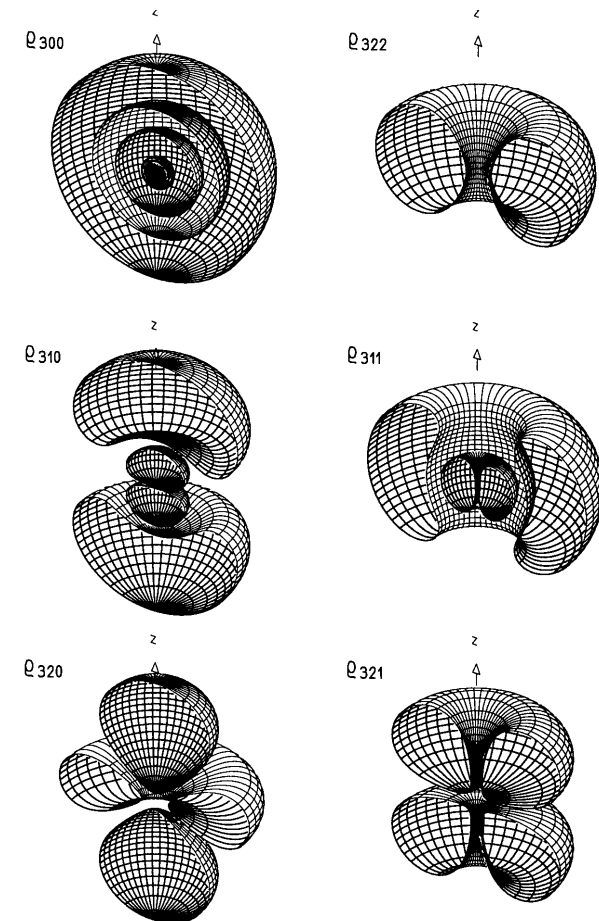
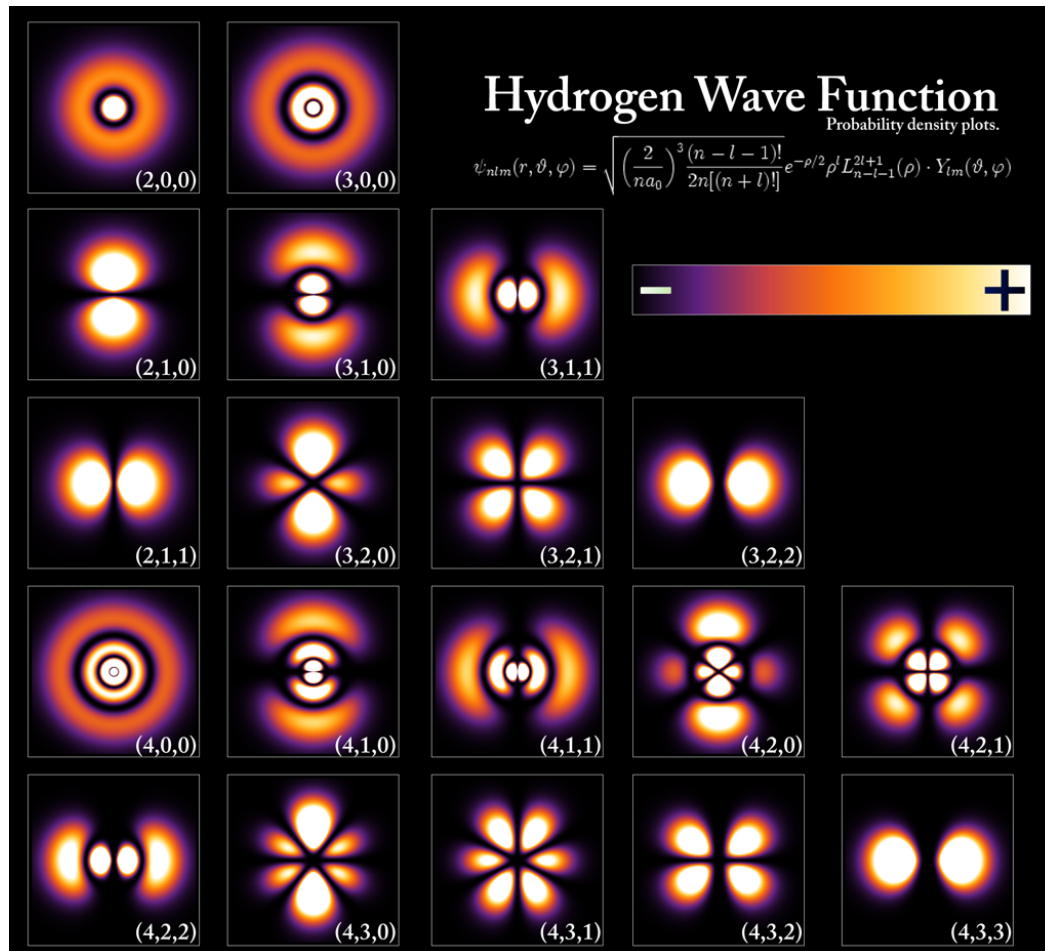
Densidades de Probabilidade



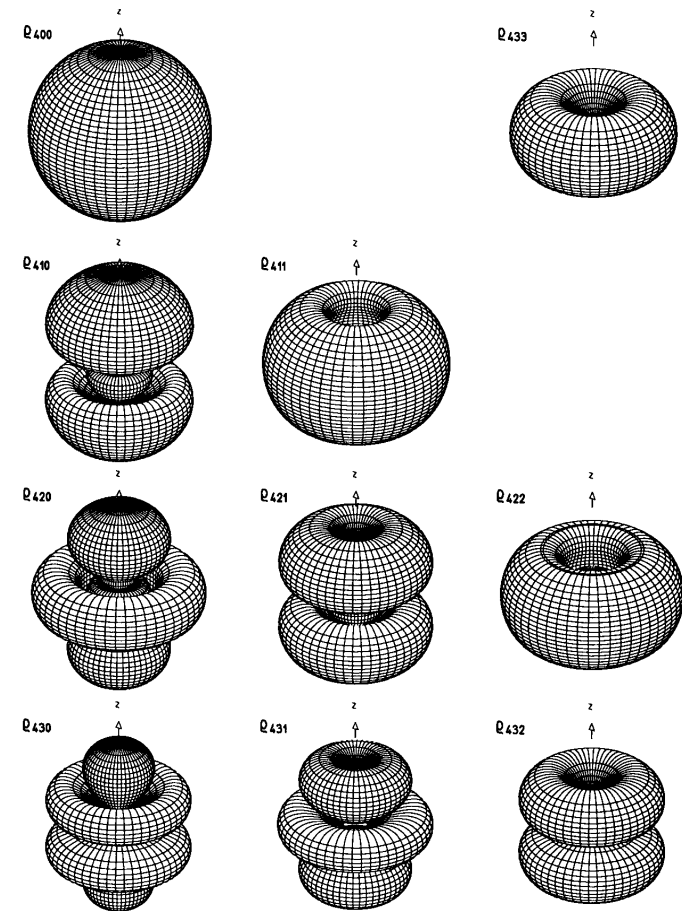
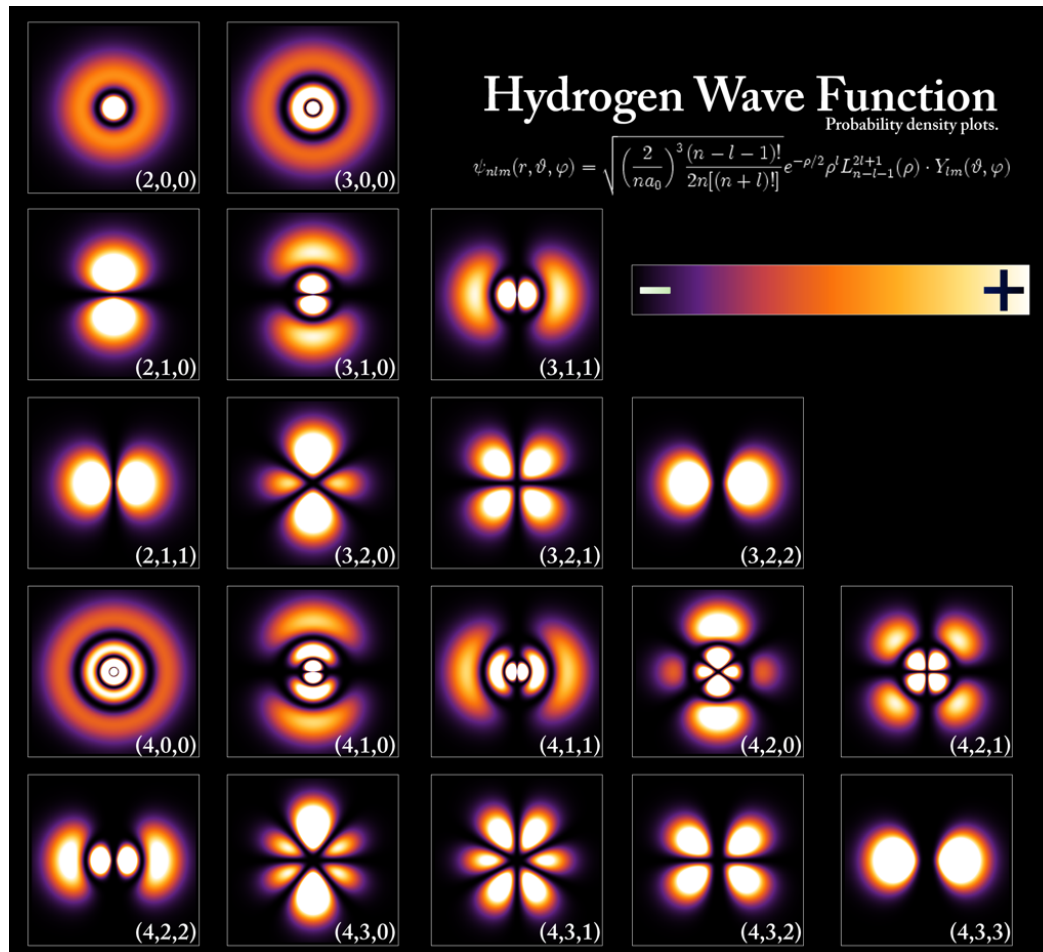
Densidades de Probabilidade



Densidades de Probabilidade



Densidades de Probabilidade



Átomo de um elétron

- Com isso, concluímos que o átomo de um elétron pode ser descrito segundo a Teoria de Schroedinger pelas funções de onda:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

- cujos números quânticos, podem assumir os valores:
 - $n = 1, 2, 3, \dots$
 - $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
 - $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

Números Quânticos			Autofunções
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	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$
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	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	± 1	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

Átomo de um elétron

- Com isso, obtém-se a descrição do átomo de um elétron a partir da Teoria de Schroedinger
- Diversas propriedades desse tipo de átomo podem ser descritas por essa teoria, mostrando a evolução no entendimento do mundo microscópico a partir dessa abordagem