

Física Moderna I

Aula 18

Marcelo G Munhoz
Pelletron, sala 245, ramal 6940
munhoz@if.usp.br

Átomo de um elétron

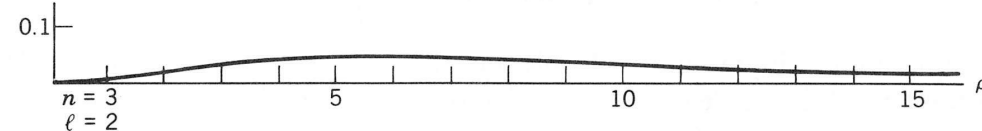
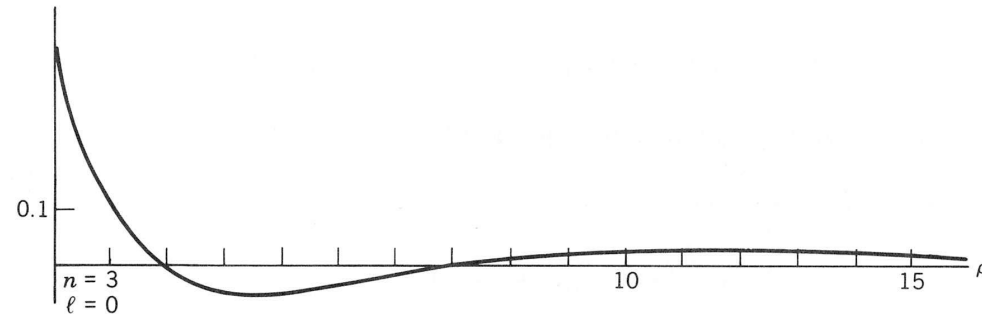
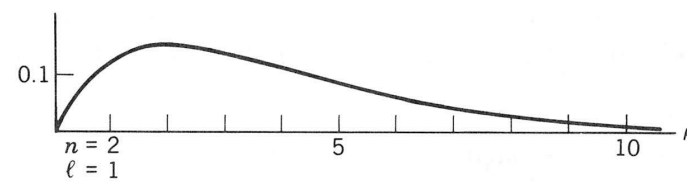
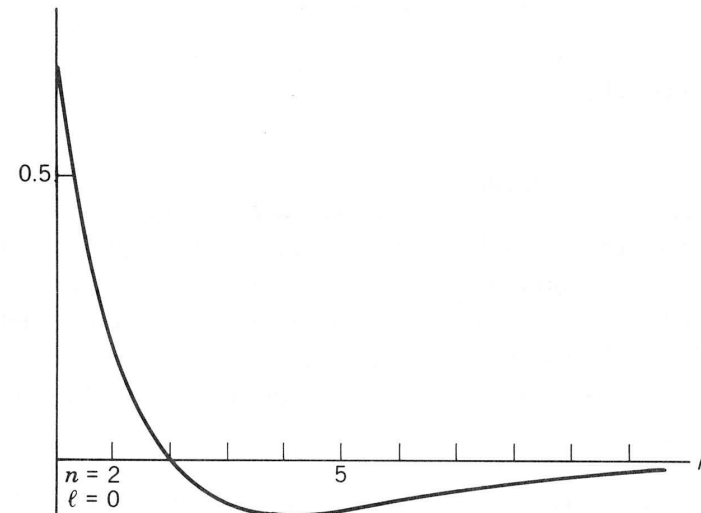
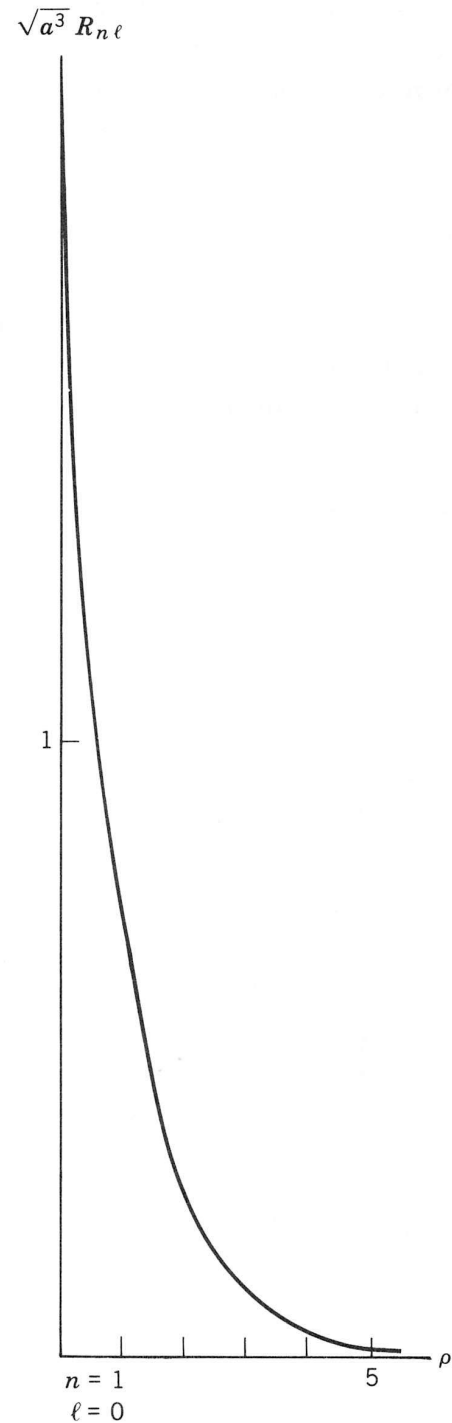
- Como podemos descrever um átomo que contenha apenas um elétron através da Teoria de Schroedinger?
- Como o resultado se compara com o Modelo de Bohr?
- Este é um sistema físico cujo potencial é dado por:
$$V(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

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:
$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$
- 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:

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

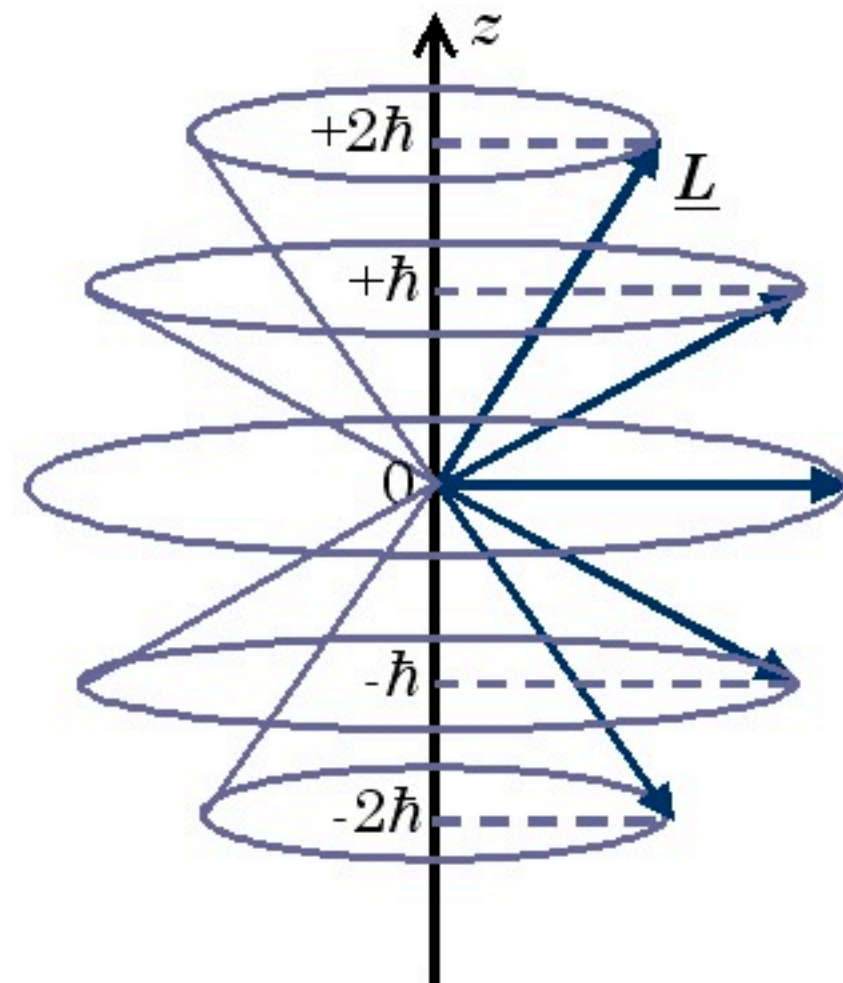
Número Quântico Magnético

- 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

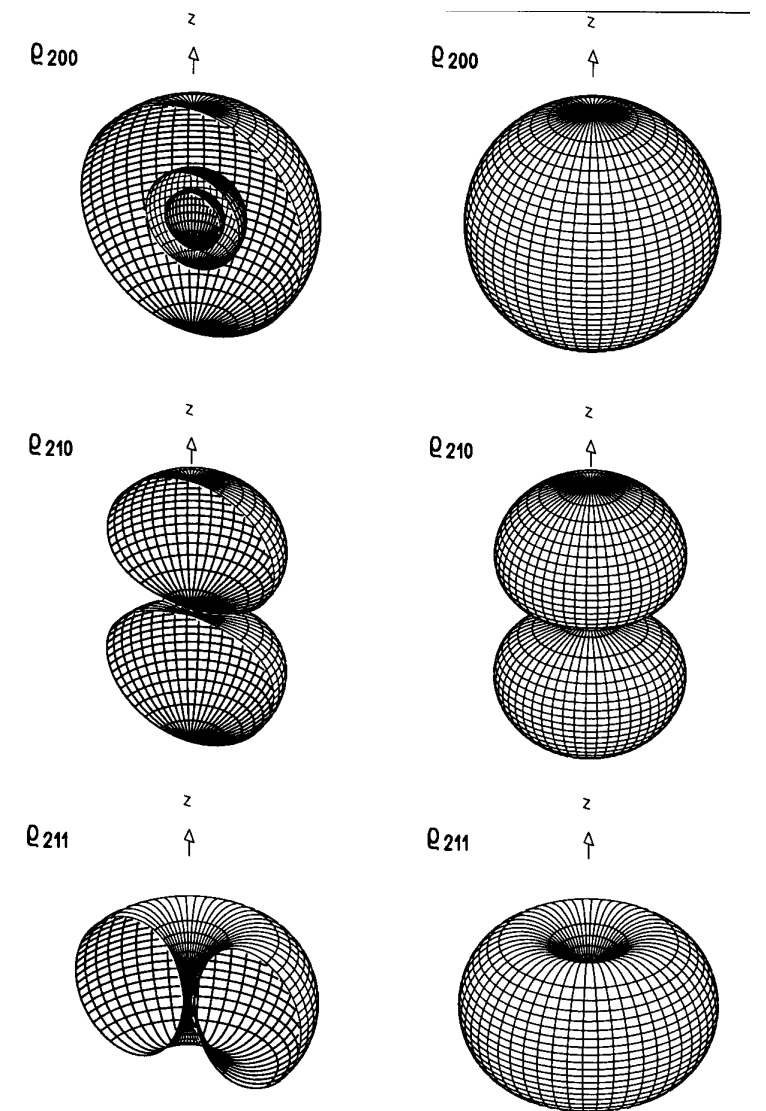
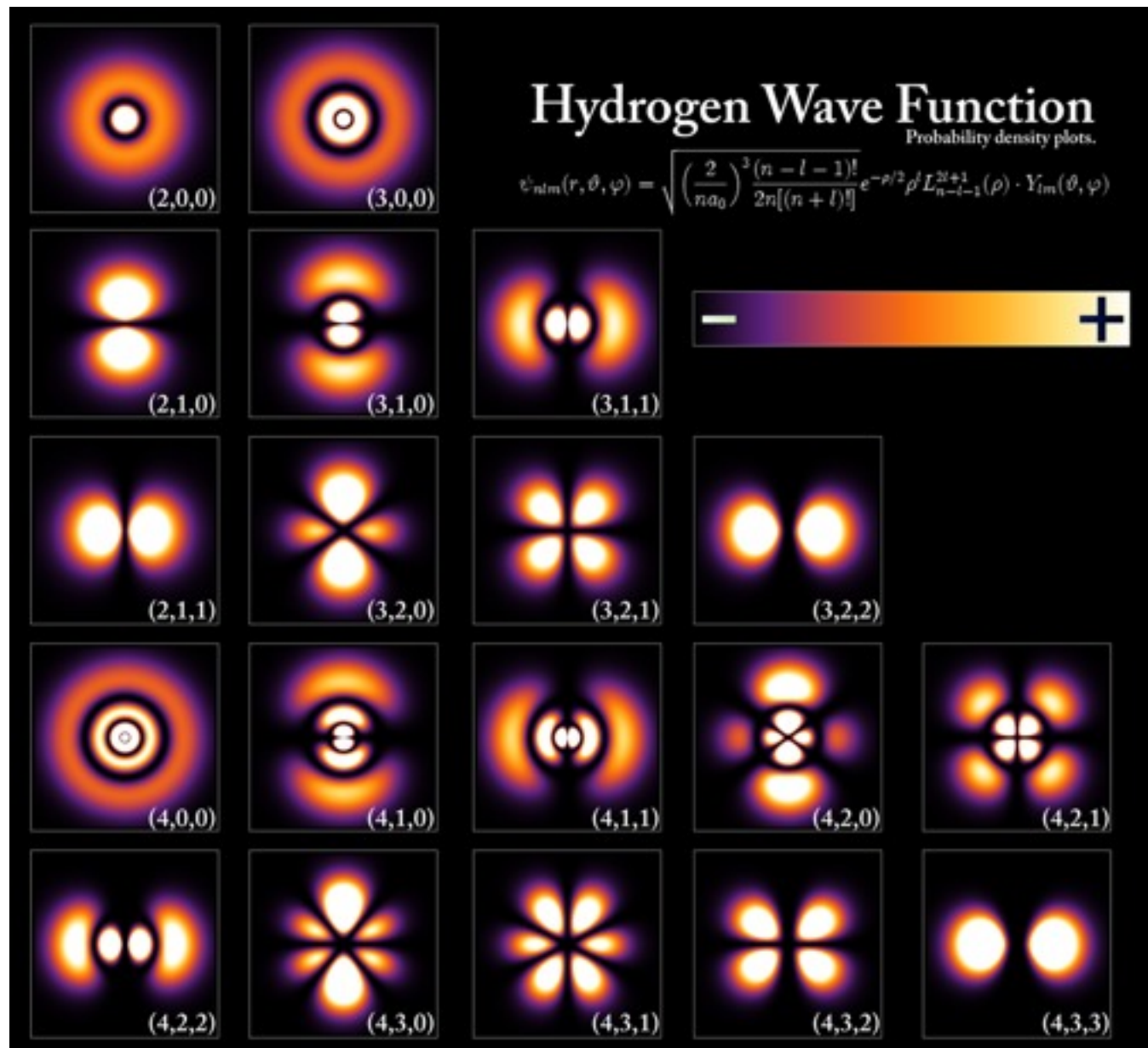
$$L_z = \hbar m_l$$

Quantização do momento angular

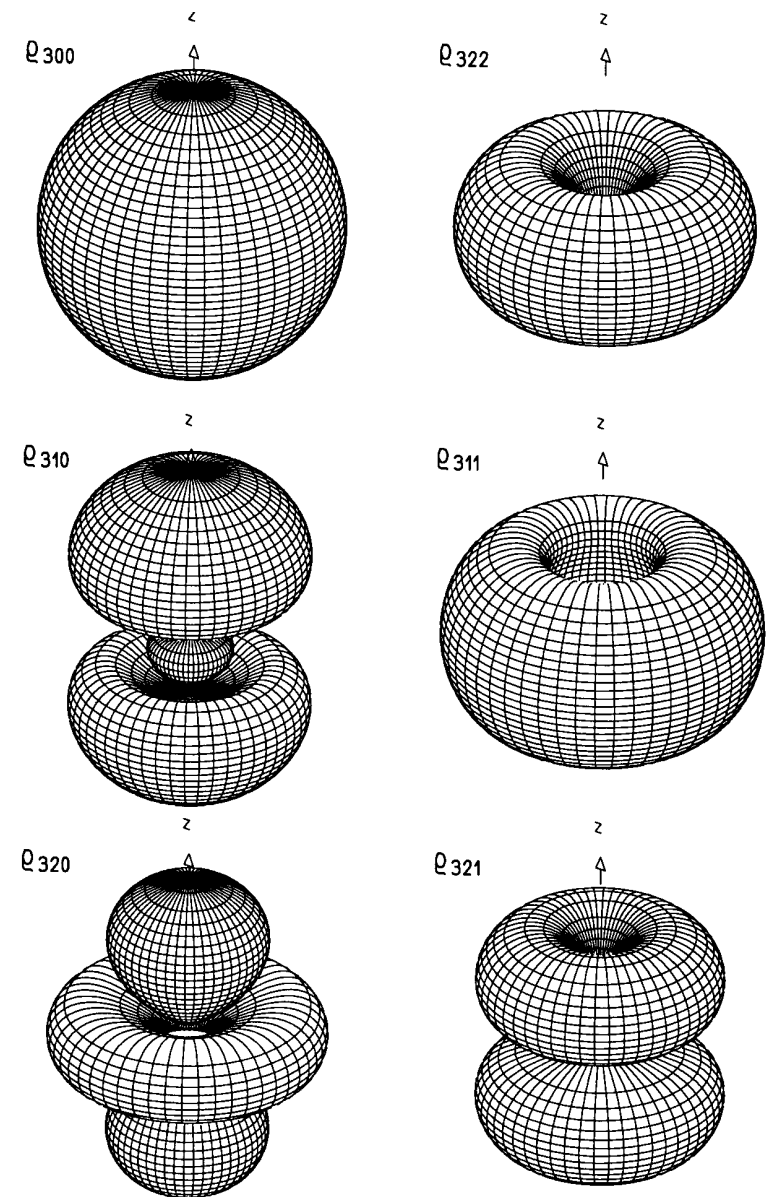
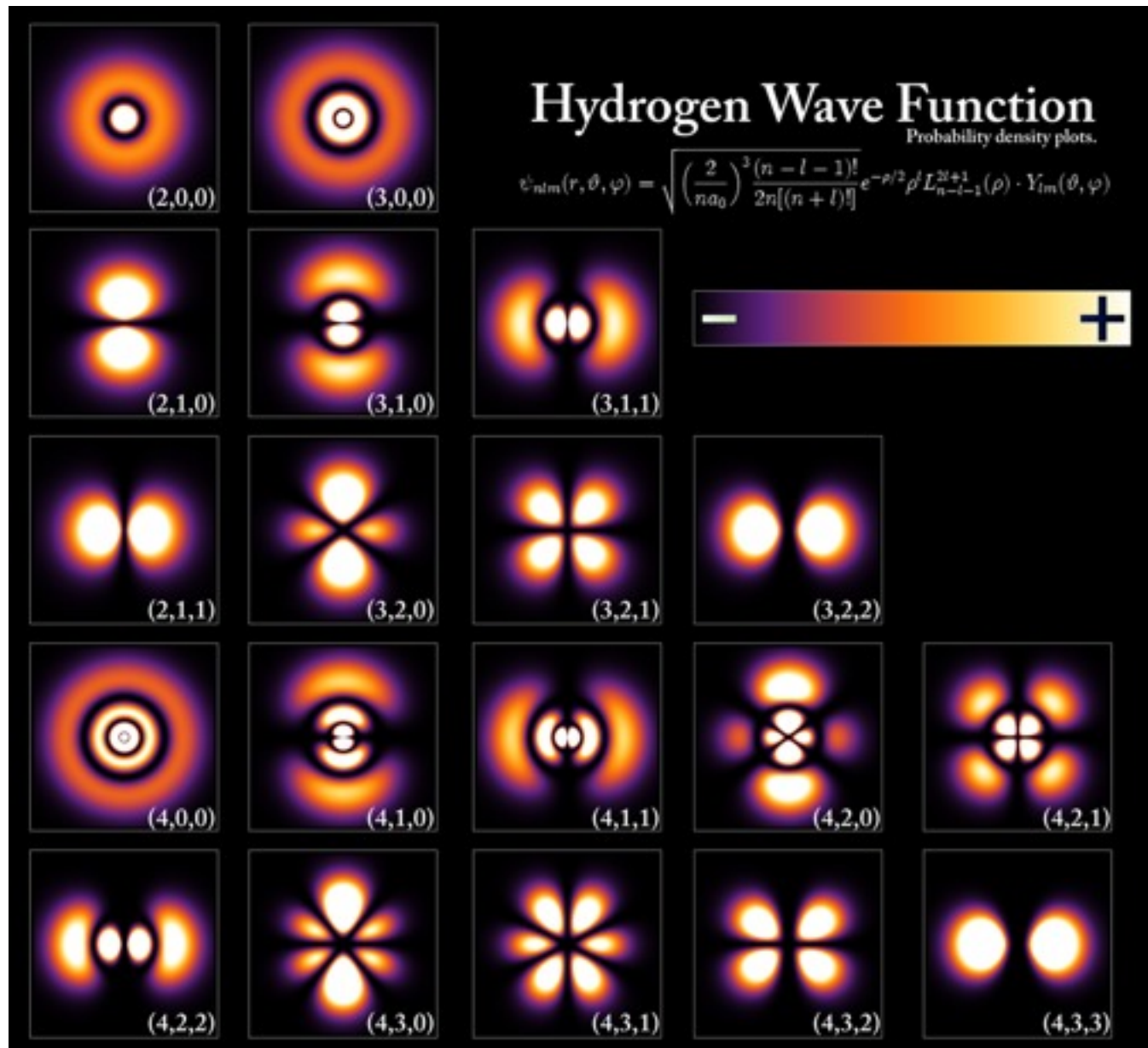
- Como $l(l+1)$ e m_l representam o momento angular, e esses números quânticos só podem assumir valores inteiros, concluímos que o momento angular também é quantizado
- Porém, essa quantização é diferente daquela proposta por Bohr



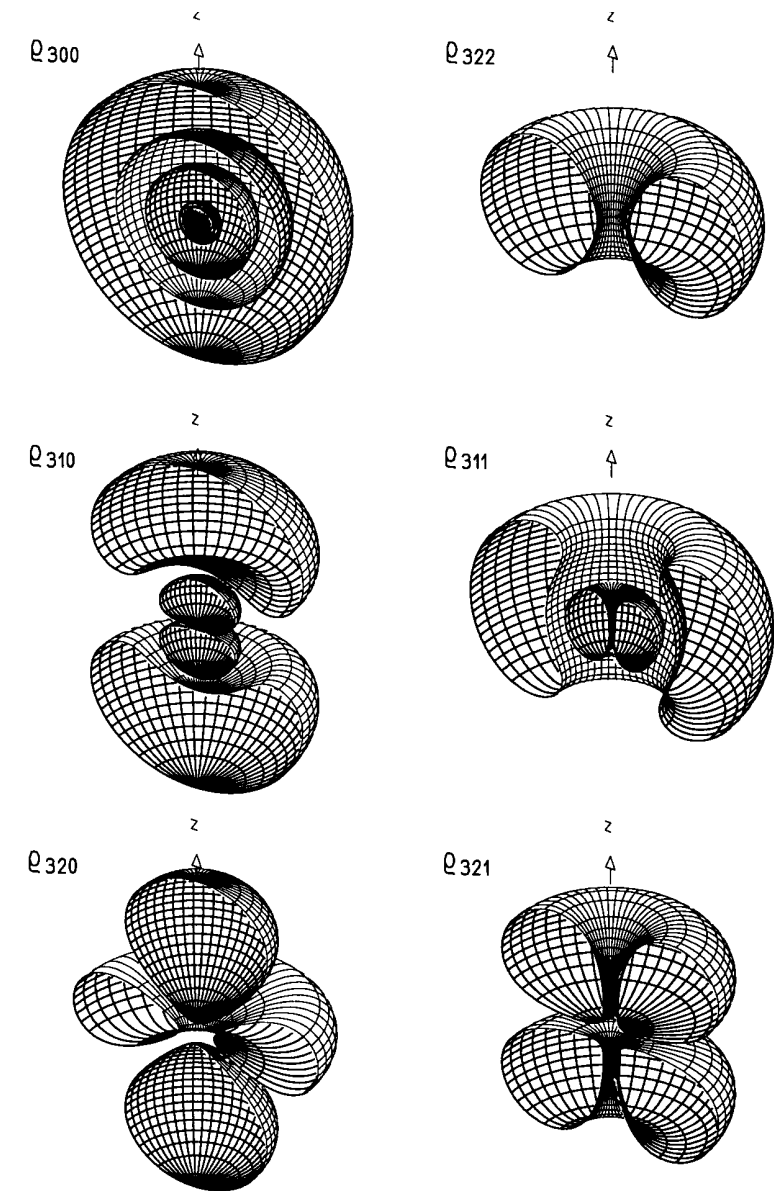
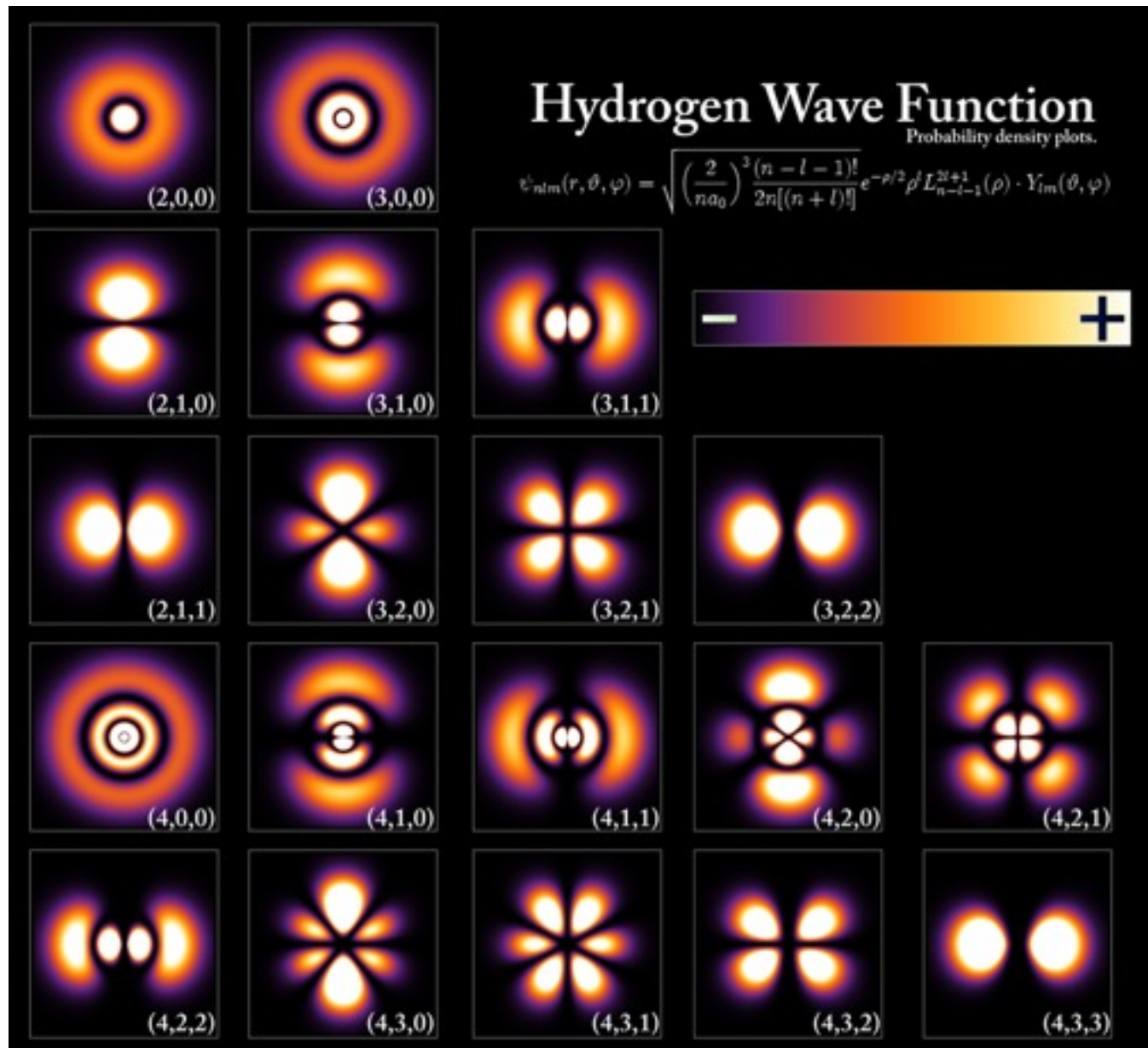
Densidades de Probabilidade



Densidades de Probabilidade



Densidades de Probabilidade



Densidades de Probabilidade

