4300375 - Física moderna I

Aula 11 – Física atômica: O átomo de hidrogênio

Parte 1

Nesta aula...

- Começaremos a resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio:
  - Separação de variáveis
  - A solução da parte angular
  - A quantização do momento angular

O átomo de Bohr

A relação com a função de onda de de Broglie

- O segundo postulado de Bohr impõem a quantização do momento angular

$$L = n\hbar \;\Rightarrow\; pr = n\hbar$$

As ondas dos elétrons formam condições estacionárias em cada órbita!

$$\left(\frac{h}{\lambda}\right) r = n\hbar \qquad \left(\frac{h}{\lambda}\right) r = n\frac{h}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \boxed{2\pi r = n\lambda}$$

O átomo de Bohr

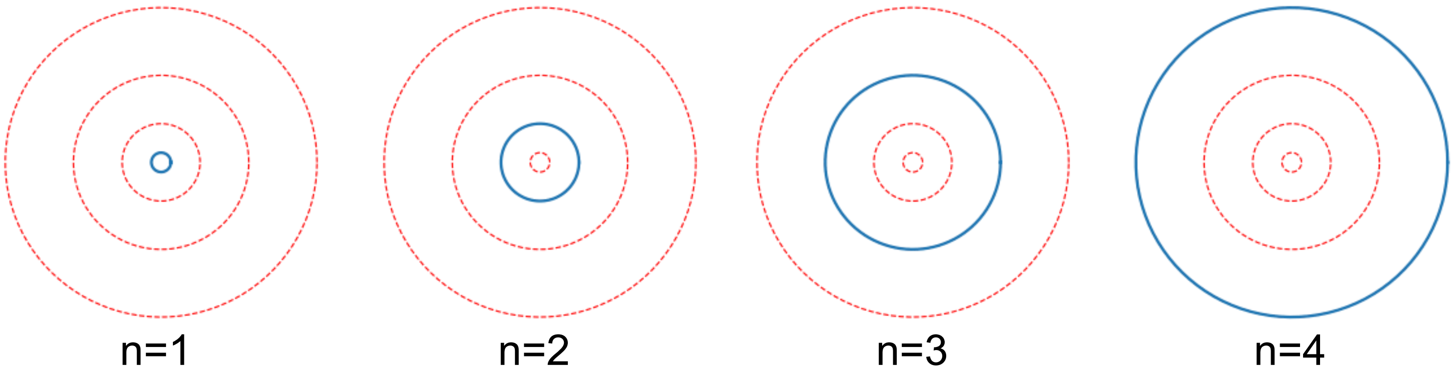
A relação com a função de onda de de Broglie

- O segundo postulado de Bohr impõem a quantização do momento angular

$$L = n\hbar \Rightarrow pr = n\hbar$$

As ondas dos elétrons formam condições estacionárias em cada órbita!

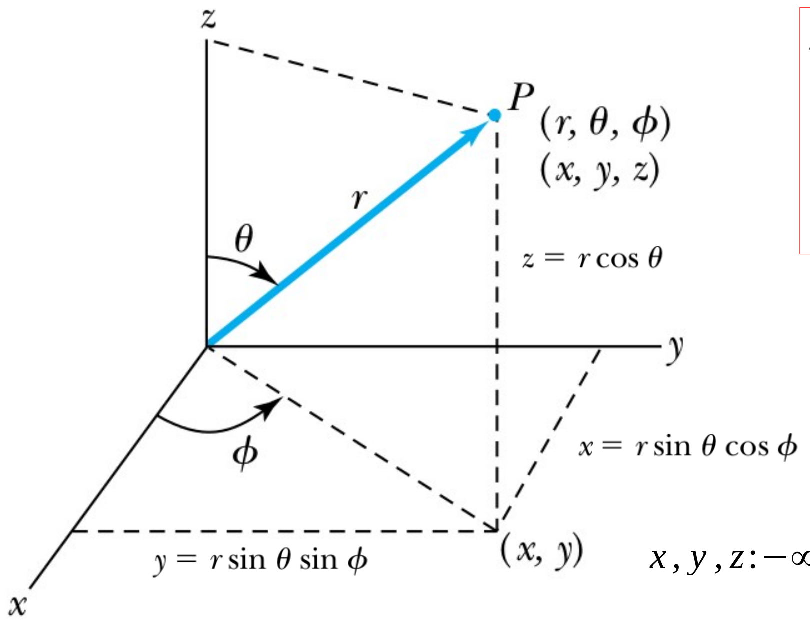
$$\left(\frac{h}{\lambda}\right) r = n\hbar \quad \left(\frac{h}{\lambda}\right) r = n\frac{h}{2\pi} \Rightarrow \boxed{2\pi r = n\lambda}$$



O átomo de hidrogênio

- **Agora vamos iniciar a solução para o potencial Coulombiano**

- A simetria exige um outro sistema de coordenadas
  - **Coordenadas esféricas**



$$r=\sqrt{x^2+y^2+x^2}$$
$$\theta=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$
$$\phi=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r:0\rightarrow+\infty$
$\theta:0\rightarrow\pi$
$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

$$V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}$$

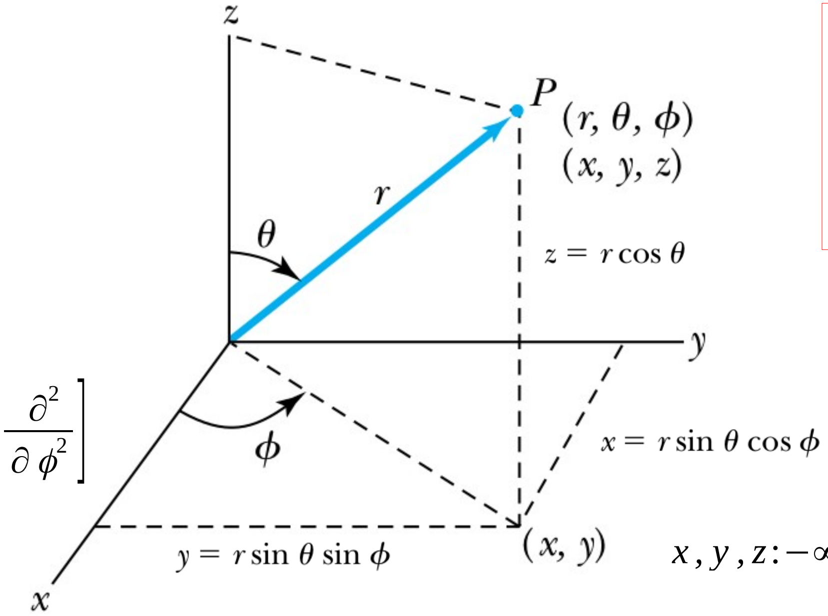
Potencial Coulombiano

O átomo de hidrogênio

- O operador diferencial em coordenadas esféricas tem a forma:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x,y,z)\psi=E\psi}$$

$$\nabla^2=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$



$$\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2}\\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)\\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)\end{aligned}}$$

$r: 0\rightarrow+\infty$
$\theta: 0\rightarrow\pi$
$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z: -\infty\rightarrow+\infty$

- E a equação de Schrödinger tem a forma:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]+V(r)\psi=E\psi}$$

O átomo de hidrogênio

- **A equação diferencial:**

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]+V(r)\psi=E\psi$$

- **Como resolver?**
  - Equação diferencial acoplada
  - Separação de variáveis
  - Funções especiais
  - Parte angular → Momento angular
  - Parte radial → energia mecânica
  - Estados degenerados?

Separação de variáveis

- Supomos uma função de onda do tipo: $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)f(\theta)g(\phi)$
- Substituindo na eq. de Schrödinger esférica:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}fg\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{Rg}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{df}{d\theta}\right)+\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{Rf}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{d^2g}{d\phi^2}+V(r)(Rfg)=E(Rfg)$$

- Vamos agora, dividir a equação por: $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)f(\theta)g(\phi)$
- Obtemos:

$$\underbrace{\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]}_{\text{só depende de } r\text{ !}}=\underbrace{-\left[\frac{1}{f(\theta)\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{g(\phi)\operatorname{sen}^2\theta}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right]}_{\text{só depende de } \theta \text{ e } \phi\text{ !}}$$

Separação de variáveis

Para que ambos os lados da equação sejam iguais independente de *r*, θ e ϕ, tempos de igualar os lados a uma constante!

$$\boxed{\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1}$$

Separada!

$$\boxed{-\left[\frac{1}{f(\theta)\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{g(\phi)\operatorname{sen}^2\theta}\,\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right]=C_1}$$

Acoplada!

Separação de variáveis

- Vamos trabalhar a segunda equação para desacoplar as variáveis:

$$-\left[\frac{1}{f(\theta)\,\text{sen}\,\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{g(\phi)\,\text{sen}^2\theta}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right]=C_1 \qquad \boxed{\times\ \text{sen}^2\theta}$$

- Resulta em:

$$-\left[\frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right]=C_1.\text{sen}^2\theta$$

- Reorganizando:

$$\underbrace{-C_1.\text{sen}^2\theta-\frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)}_{\text{só depende de }\theta\text{ !}}=\underbrace{\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}}_{\text{só depende de }\phi\text{ !}}$$

Separação de variáveis

Para que ambos os lados da equação sejam iguais independente de θ e ϕ, tempos de igualar os lados a uma constante!

$$-C_1.\,\mathrm{sen}^2\theta-\frac{\mathrm{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\,\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2$$

Separada!

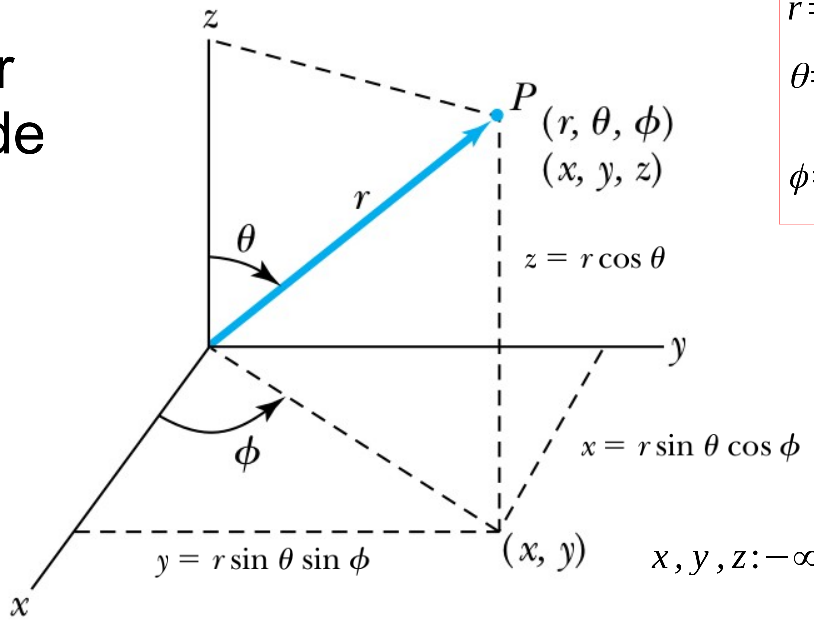
$$\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}=C_2$$

Separada!

As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{1}{R(r)}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR(r)}{dr}\right)+\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1 \\[2ex]
-C_1.\text{sen}^2\theta-\dfrac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\dfrac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\dfrac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2 \\[2ex]
\dfrac{1}{g(\phi)}\dfrac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}=C_2
\end{array}\right.$$



$$\boxed{\begin{array}{l} r=\sqrt{x^2+y^2+x^2} \\ \theta=\cos^{-1}\left(\dfrac{z}{r}\right) \\ \phi=\tan^{-1}\left(\dfrac{y}{x}\right) \end{array}}$$

$r:0\rightarrow+\infty$
$\theta:0\rightarrow\pi$
$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

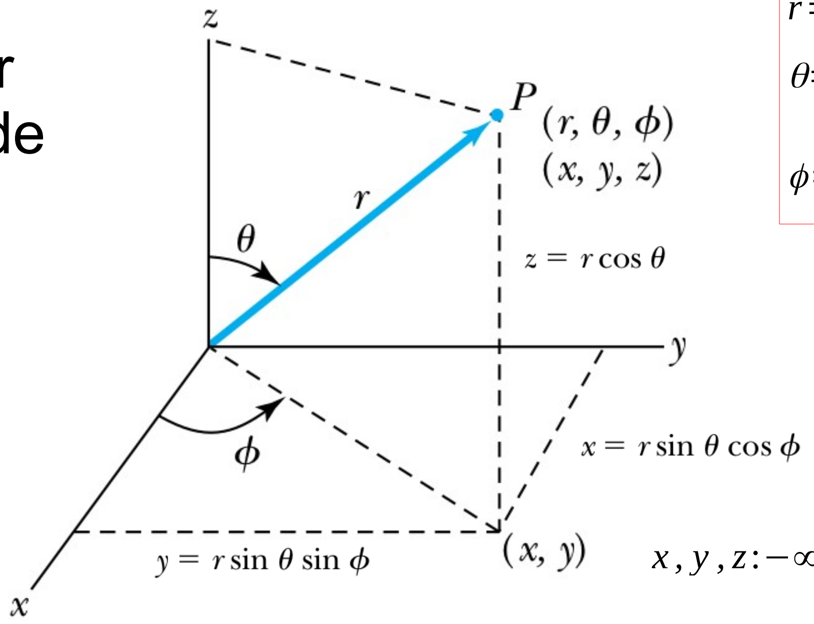
$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$\begin{cases} \dfrac{1}{R(r)}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR(r)}{dr}\right)+\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1 \\[2ex] -C_1.\text{sen}^2\theta-\dfrac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\dfrac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\dfrac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2 \\[2ex] \boxed{\dfrac{1}{g(\phi)}\dfrac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}=C_2} \end{cases}$$



$$\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2} \\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \end{aligned}}$$

$r:0\rightarrow+\infty$

$\theta:0\rightarrow\pi$

$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

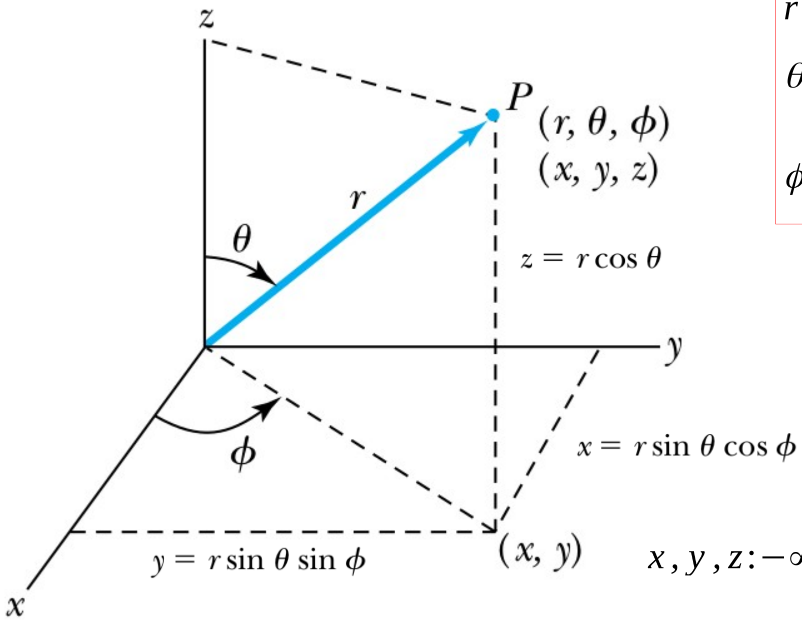
Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

$$\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 \qquad \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 . g(\phi)$$

Duas soluções possíveis:

$$\begin{cases} g(\phi)=e^{\pm\sqrt{|C_2|}\phi} & \text{se } C_2>0 \\ g(\phi)=e^{\pm i\sqrt{|C_2|}\phi} & \text{se } C_2<0 \end{cases}$$



$$r=\sqrt{x^2+y^2+x^2}$$
$$\theta=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$
$$\phi=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r:0\rightarrow+\infty$
$\theta:0\rightarrow\pi$
$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

$$V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}$$

Potencial Coulombiano

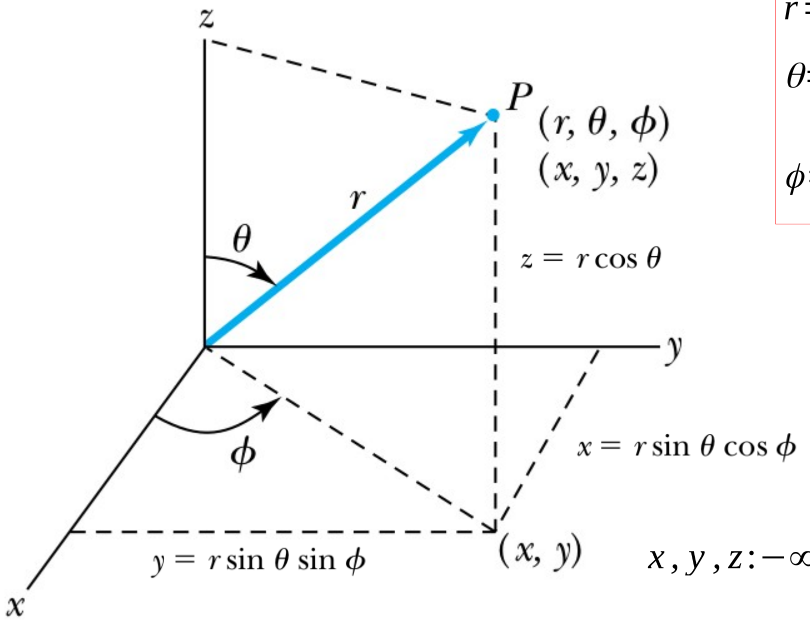
As equações desacopladas

$$\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 \qquad \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 . g(\phi)$$

Duas soluções possíveis:

$$\begin{cases} g(\phi)=e^{\pm\sqrt{|C_2|}\phi} \text{ se } C_2>0 \\ g(\phi)=e^{\pm i\sqrt{|C_2|}\phi} \text{ se } C_2<0 \end{cases}$$

Zoológico
das equações diferenciais



$$r=\sqrt{x^2+y^2+x^2}$$
$$\theta=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$
$$\phi=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r: 0 \rightarrow +\infty$
$\theta: 0 \rightarrow \pi$
$\phi = 0 \rightarrow 2\pi$

$x, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$

$$V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}$$

Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

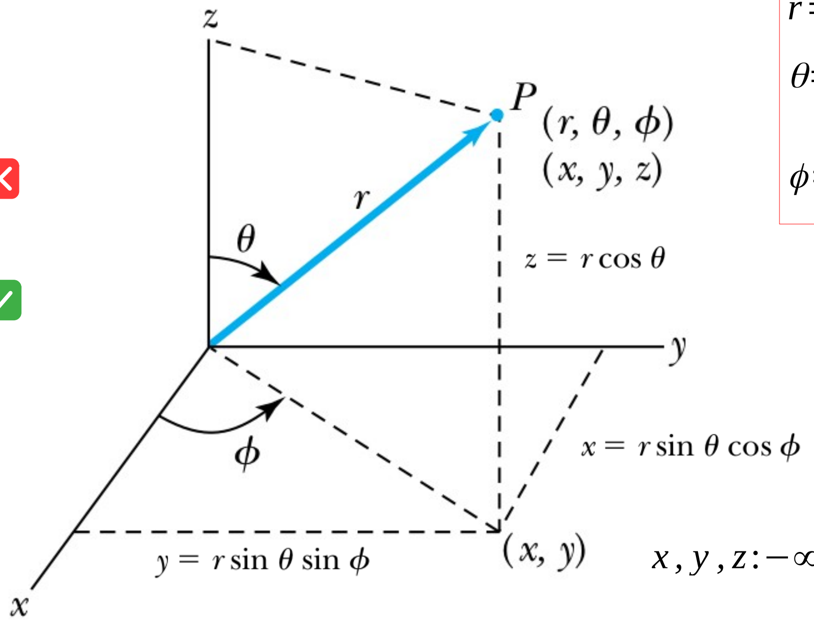
$$\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 \qquad \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 . g(\phi)$$

Duas soluções possíveis:

$$\begin{cases} g(\phi)=e^{\pm\sqrt{|C_2|}\phi} \text{ se } C_2>0 ❎ \\ g(\phi)=e^{\pm i\sqrt{|C_2|}\phi} \text{ se } C_2<0 ✅ \end{cases}$$

Somente uma delas oferece periodicidade!

$$\boxed{g(\phi)=e^{\pm i C_2 \phi} \text{ se } C_2<0}$$



$$r=\sqrt{x^2+y^2+x^2}$$
$$\theta=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$
$$\phi=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r: 0 \rightarrow +\infty$
$\theta: 0 \rightarrow \pi$
$\phi = 0 \rightarrow 2\pi$

$x, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$

$$V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}$$ Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

$$\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 \qquad \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2}=C_2 . g(\phi)$$

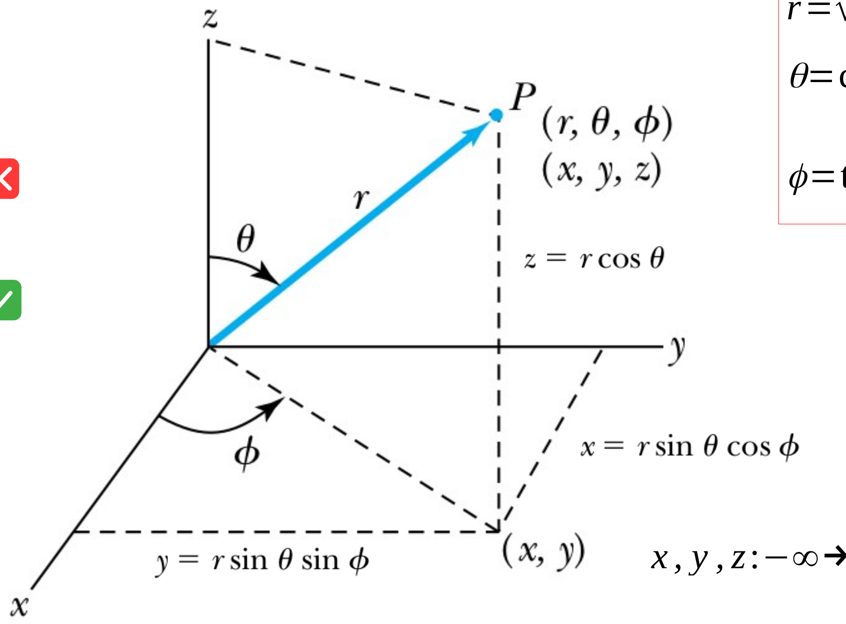
Duas soluções possíveis:

$$\begin{cases} g(\phi)=e^{\pm\sqrt{|C_2|}\phi} \text{ se } C_2>0 \text{ ❎} \\ g(\phi)=e^{\pm i\sqrt{|C_2|}\phi} \text{ se } C_2<0 \text{ ✅} \end{cases}$$

Vamos adotar: $C_2=-m^2$

Assim, a solução fica:

$$\boxed{g(\phi)=e^{\pm i m\phi}}$$



$$\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2} \\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \end{aligned}}$$

$r: 0 \rightarrow +\infty$

$\theta: 0 \rightarrow \pi$

$\phi = 0 \rightarrow 2\pi$

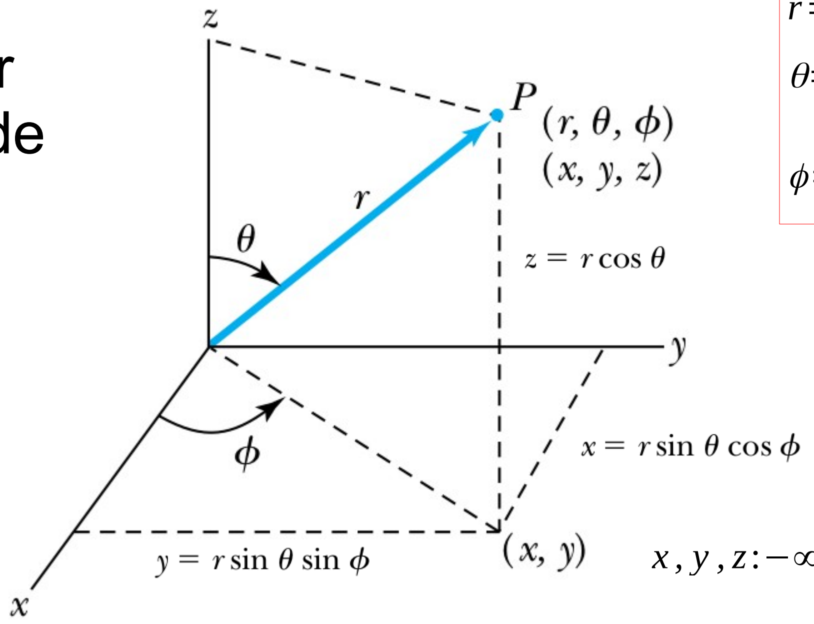
$x, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$

$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$ Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$\begin{cases} \frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1 \\ -C_1.\text{sen}^2\theta-\frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2 \\ \boxed{\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}=C_2} \end{cases}$$



$$\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2} \\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \end{aligned}}$$

$r: 0 \to +\infty$
$\theta: 0 \to \pi$
$\phi = 0 \to 2\pi$

$x, y, z: -\infty \to +\infty$

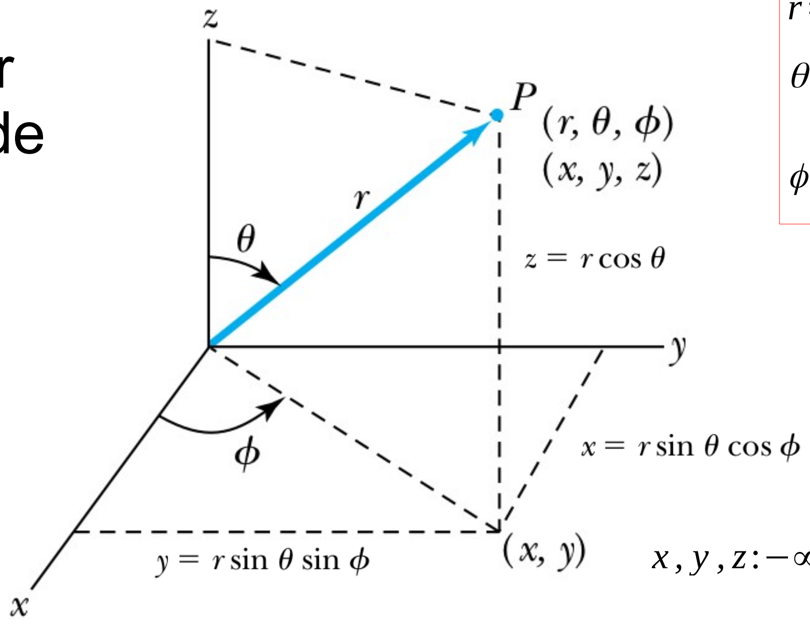
$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$
\begin{cases}
\dfrac{1}{R(r)}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR(r)}{dr}\right)+\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1 \\[2ex]
-C_1.\text{sen}^2\theta-\dfrac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\dfrac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\dfrac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2 \\[2ex]
\boxed{g(\phi)=e^{-im\phi}}
\end{cases}
$$



$$
\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2} \\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \end{aligned}}
$$

$r:0\rightarrow+\infty$

$\theta:0\rightarrow\pi$

$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

Potencial Coulombiano

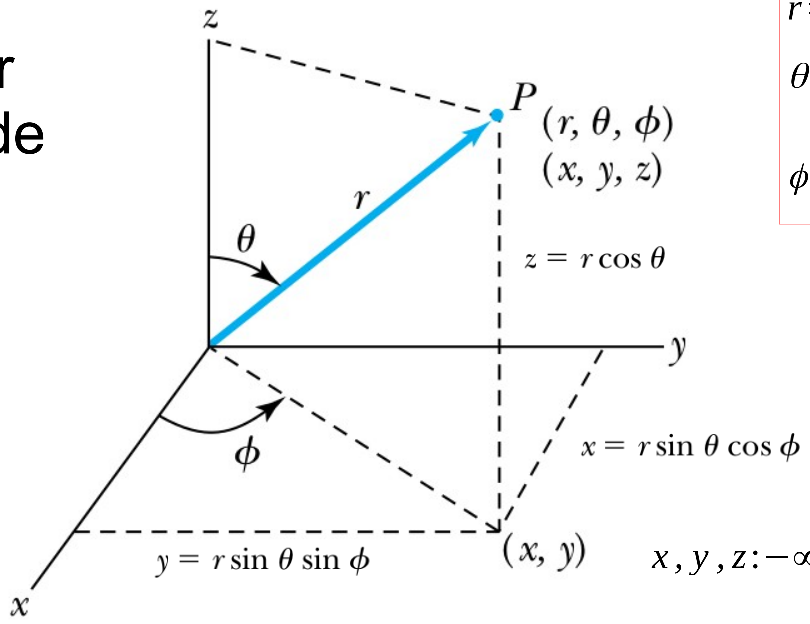
As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1$$

$$\boxed{-C_1.\mathrm{sen}^2\,\theta-\frac{\mathrm{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2}$$

$$\boxed{g(\phi)=e^{-im\phi}}$$



$$\boxed{\begin{array}{l} r=\sqrt{x^2+y^2+x^2} \\ \theta=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right) \\ \phi=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \end{array}}$$

$r:0\rightarrow+\infty$
$\theta:0\rightarrow\pi$
$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

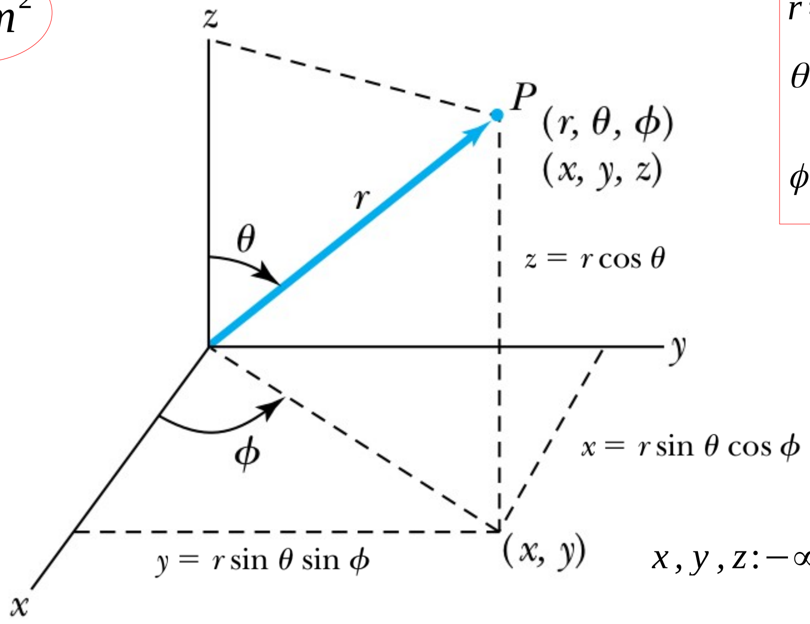
$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

$$-C_1.\text{sen}^2\theta-\frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2=-m^2$$

$$C_1.\text{sen}^2\theta+\frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)=m^2$$



$$r=\sqrt{x^2+y^2+x^2}$$

$$\theta=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\phi=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r:0\rightarrow+\infty$

$\theta:0\rightarrow\pi$

$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

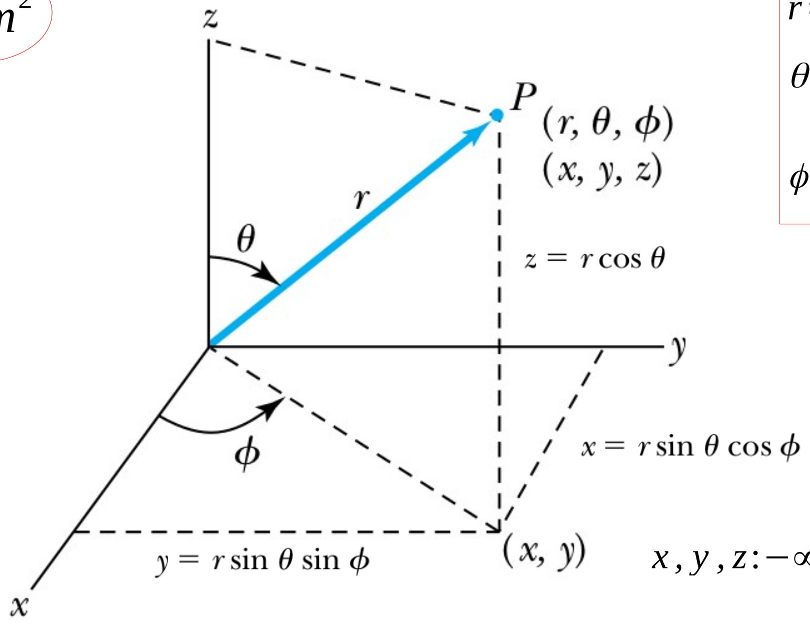
Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

$$-C_1 . \mathrm{sen}^2\theta - \frac{\mathrm{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\,\frac{d f(\theta)}{d\theta}\right) = C_2 = -m^2$$

$$C_1 . \mathrm{sen}^2\theta + \frac{\mathrm{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\,\frac{d f(\theta)}{d\theta}\right) = m^2$$

Zoológico
das equações diferenciais



$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + x^2}$$

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r : 0 \rightarrow +\infty$
$\theta : 0 \rightarrow \pi$
$\phi = 0 \rightarrow 2\pi$

$x, y, z : -\infty \rightarrow +\infty$

$$V(r, \theta, \phi) = -\frac{K}{r}$$

Potencial Coulombiano

As equações desacopladas

$$-C_1 . \text{sen}^2\theta - \frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right) = C_2$$

$$C_1 . \text{sen}^2\theta + \frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right) = m^2$$

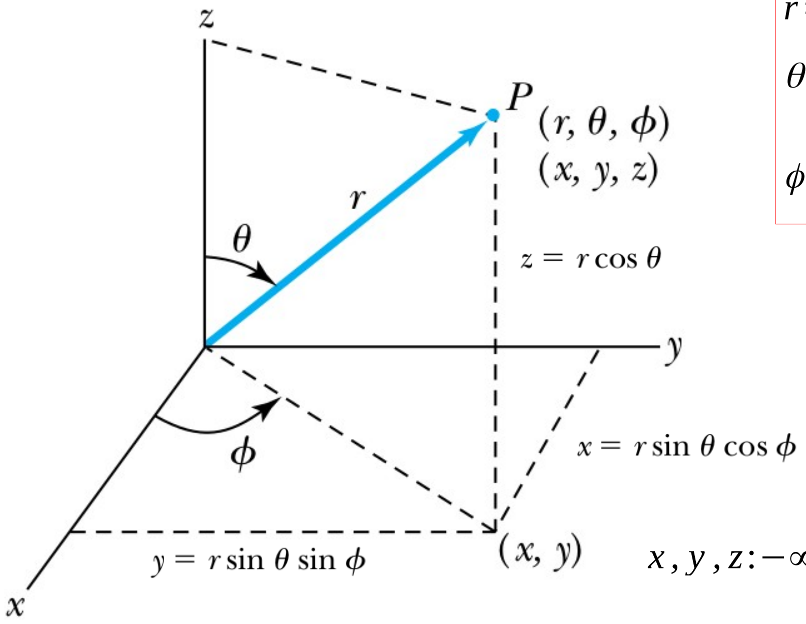
Vamos adotar: $C_1 = l(l+1)$

$$\frac{1}{\text{sen}\,\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\text{sen}^2\theta}\right]f(\theta) = 0$$

Assim, a solução fica:

funções de Legendre associadas

$$f_{lm}(\theta) = \frac{(\text{sen}\,\theta)^{|m|}}{2^l l!}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}\right]^{l+|m|}(\cos^2\theta - 1)^l$$



$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + x^2}$$

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

$r: 0 \rightarrow +\infty$

$\theta: 0 \rightarrow \pi$

$\phi = 0 \rightarrow 2\pi$

$x, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$

$$V(r, \theta, \phi) = -\frac{K}{r}$$

Potencial Coulombiano

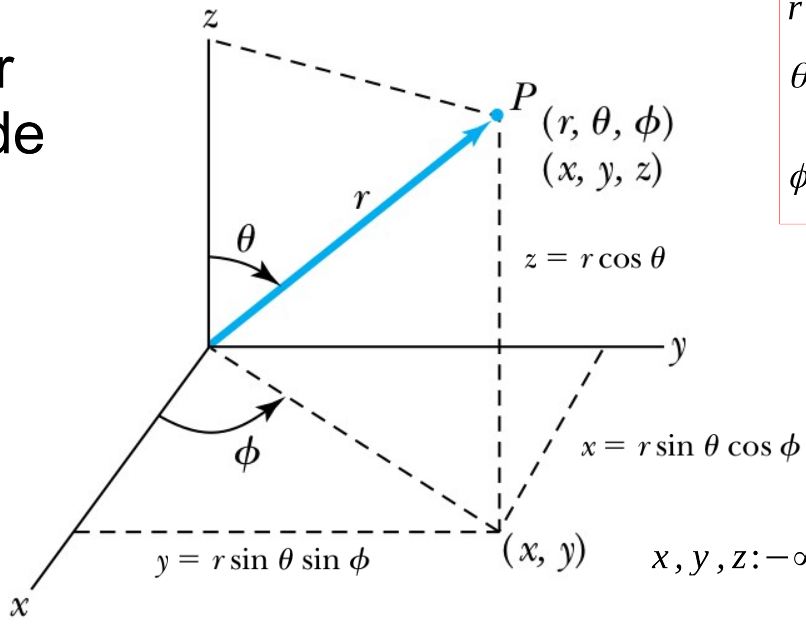
As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1$$

$$\boxed{-C_1.\text{sen}^2\theta-\frac{\text{sen}\,\theta}{f(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)=C_2}$$

$$\boxed{g(\phi)=e^{-im\phi}}$$



$$\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2}\\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)\\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)\end{aligned}}$$

$r:0\rightarrow+\infty$
$\theta:0\rightarrow\pi$
$\phi=0\rightarrow2\pi$

$x,y,z:-\infty\rightarrow+\infty$

$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$ Potencial Coulombiano

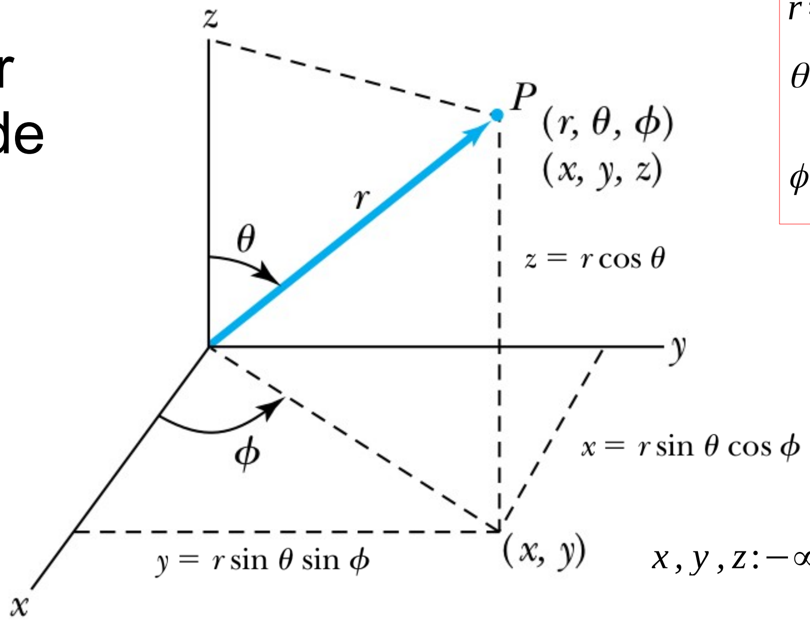
As equações desacopladas

- Temos agora, de abordar as equações desacopladas para obter a solução completa para o átomo de hidrogênio!

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1$$

$$\boxed{f_{lm}(\theta)=\frac{(\text{sen }\theta)^{|m|}}{2^l l!}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}\right]^{l+|m|}(\cos^2\theta-1)^l}$$

$$\boxed{g(\phi)=e^{-im\phi}}$$



$$\boxed{\begin{aligned} r&=\sqrt{x^2+y^2+x^2}\\ \theta&=\cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)\\ \phi&=\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)\end{aligned}}$$

$r: 0 \rightarrow +\infty$
$\theta: 0 \rightarrow \pi$
$\phi = 0 \rightarrow 2\pi$

$x, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$

$$\boxed{V(r,\theta,\phi)=-\frac{K}{r}}$$

Potencial Coulombiano

Os harmônicos esféricos

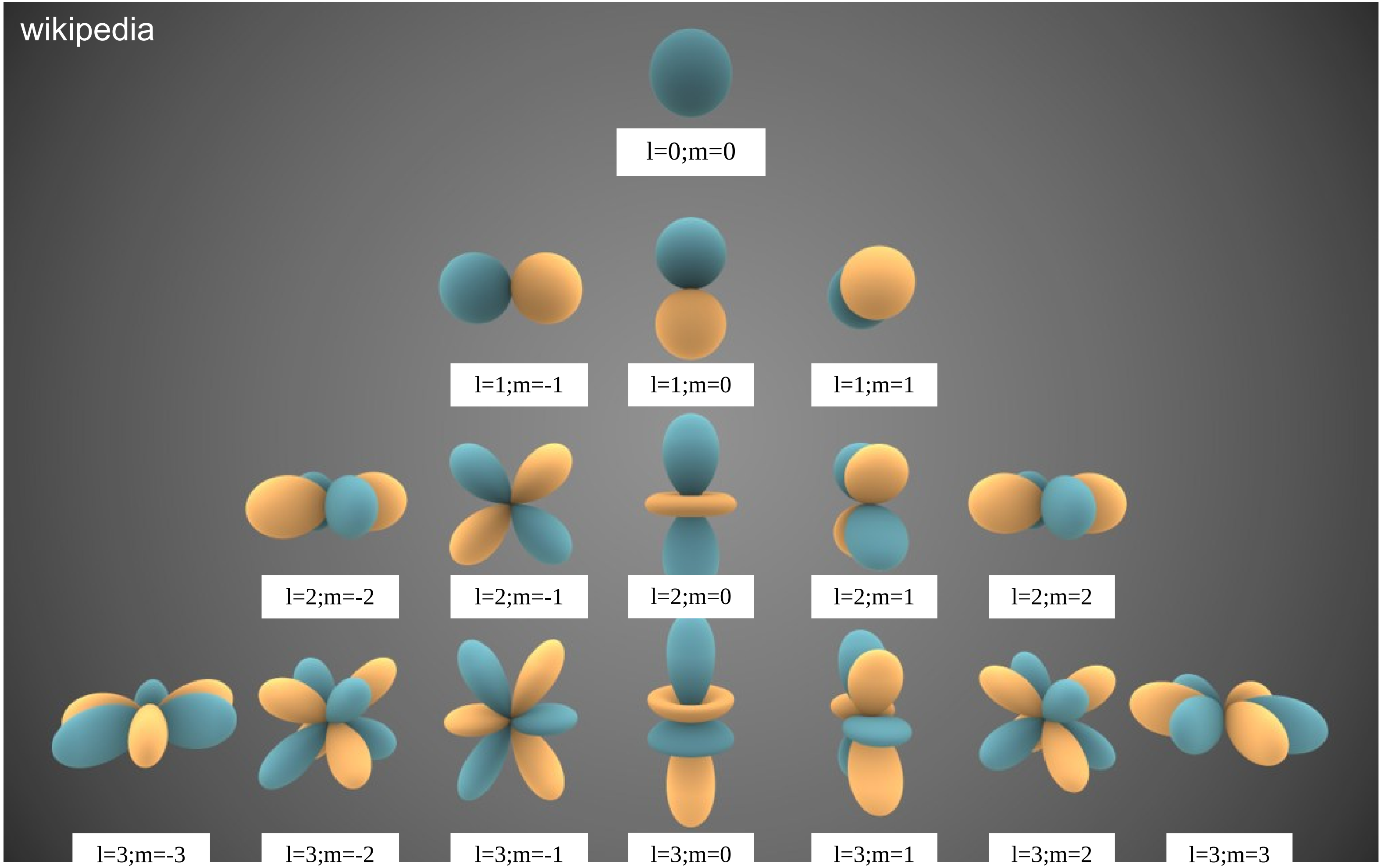
- Assim, a parte angular da função de onda é totalmente definida pela função: $Y_{lm}=f(\theta)g(\phi)$
- Onde $f(\theta)$ e $g(\phi)$ são soluções das equações diferenciais:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\text{sen}\,\theta}\dfrac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\dfrac{df(\theta)}{d\theta}\right)=\left[\dfrac{m^2}{\text{sen}^2\theta}-l(l+1)\right]f(\theta) \\ \dfrac{1}{g(\phi)}\dfrac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}=-m^2 \end{cases}$$

- As funções Y_{lm} recebem o nome de harmônicos esféricos

ℓ	m_ℓ	$Y_{\ell m_\ell}$
0	0	$\dfrac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	0	$\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{3}{\pi}}\cos\theta$
1	±1	$\mp\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{3}{2\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
2	0	$\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta-1)$
2	±1	$\mp\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$
2	±2	$\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm2i\phi}$
3	0	$\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{7}{\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$
3	±1	$\mp\dfrac{1}{8}\sqrt{\dfrac{21}{\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)\, e^{\pm i\phi}$
3	±2	$\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{105}{2\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\, e^{\pm2i\phi}$
3	±3	$\mp\dfrac{1}{8}\sqrt{\dfrac{35}{\pi}}\sin^3\theta\, e^{\pm3i\phi}$

Visualizando os harmônicos esféricos



O operador momento angular

Comparando a equação de Schrödinger com a da energia, podemos encontrar o operador momento angular :

A energia cinética:

$$K=\frac{p^2}{2m}=\frac{p_r^2+p_t^2}{2m}=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{p_t^2}{2m}=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{L^2}{2mr^2}$$

Em termos do momento angular:

$$\frac{p_r^2}{2m}+\frac{L^2}{2mr^2}+V(r)=E \qquad \frac{p_r^2}{2m}+V_{eff}(r)=E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]+V(r)\psi=E\psi$$

Note que, o operador momento angular é dado por:

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

Sendo: $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$, então: $\hat{L}^2\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\hat{L}^2Y_{lm}(\theta,\phi)$

O operador momento angular

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Do slide 8!

Em resumo: $\boxed{\hat{L}^2\,\psi(r,\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2\,\psi(r,\theta,\phi)}$

O momento angular é quantizado !!

$$\boxed{\begin{array}{c} |\hat{L}|=L=\sqrt{l(l+1)}\,\hbar \\ \text{para } l=0,1,2,3,\ldots \end{array}}$$

O operador momento angular

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Do slide 8!

Separação de variáveis

- Supomos uma função de onda do tipo: $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)f(\theta)g(\phi)$
- Substituindo na eq. de Schrödinger esférica:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}fg\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{Rg}{\text{sen}\,\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df}{d\theta}\right)+\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{Rf}{\text{sen}^2\theta}\frac{d^2g}{d\phi^2}+V(r)(Rfg)=E(Rfg)$$

- Vamos agora, dividir a equação por: $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)f(\theta)g(\phi)$
- Obtemos:

$$\underbrace{\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]}_{\text{só depende de } r\text{ !}}=\underbrace{-\left[\frac{1}{f(\theta)\,\text{sen}\,\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{g(\phi)\,\text{sen}^2\theta}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right]}_{\text{só depende de } \theta \text{ e } \phi\text{ !}}$$

25 de novembro de 2020 © Tiago F. Silva - Física Moderna I - Física atômica: O átomo de hidrogênio - Parte 1 8

$$)\hbar^2\,\psi(r,\theta,\phi)$$

tizado !!

O operador momento angular

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Do slide 8!

Separação de variáveis

Para que ambos os lados da equação sejam iguais independente de r, θ e ϕ, tempos de igualar os lados a uma constante!

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1$$ Separada!

$$-\left[\frac{1}{f(\theta)\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)+\frac{1}{g(\phi)\operatorname{sen}^2\theta}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right]=C_1$$ Acoplada!

25 de novembro de 2020 © Tiago F. Silva - Física Moderna I - Física atômica: O átomo de hidrogênio - Parte 1 9

$$)\hbar^2\,\psi(r,\theta,\phi)$$

tizado !!

O operador momento angular

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Do slide 8!

Em resumo: $\hat{L}^2\psi(r,\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2\psi(r,\theta,\phi)$

O momento angular é quantizado !!

$$\left|\hat{L}\right|=L=\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

$$\text{para } l=0,1,2,3,\ldots$$

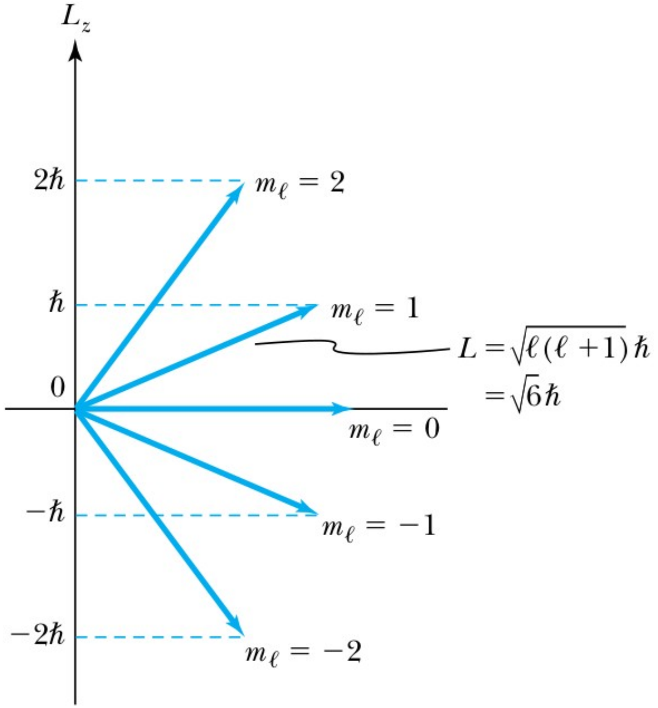
O operador projeção do momento angular

- A projeção do momento angular no eixo z: L_z

$$\boxed{\hat{L}_z\,\psi(r,\theta,\phi)=m\hbar\,\psi(r,\theta,\phi)}$$

$$\boxed{\begin{gathered}|\hat{L}_z|=L_z=m\hbar\\ \text{para}\ \ m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l\end{gathered}}$$

- **A projeção no eixo z do momento angular também é quantizada !!**



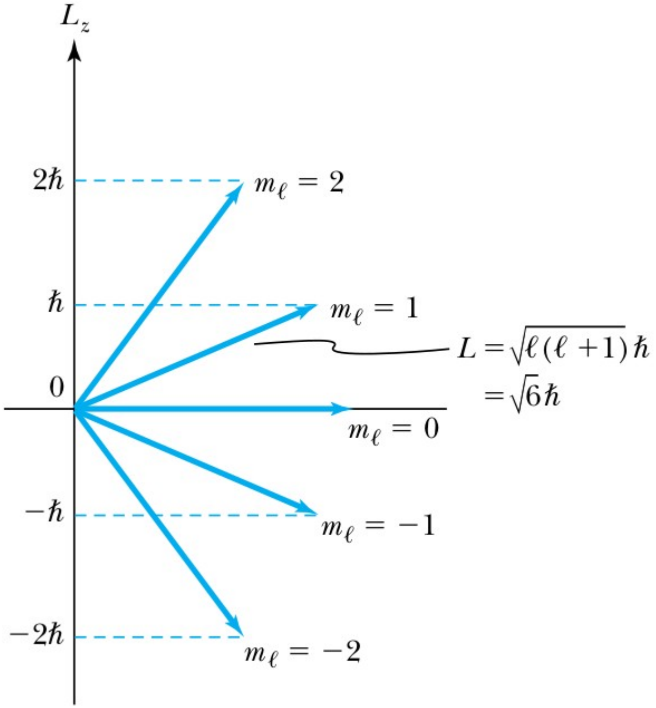
O operador projeção do momento angular

- A projeção do momento angular no eixo z: L_z

$$\hat{L}_z \psi(r,\theta,\phi) = m\hbar\, \psi(r,\theta,\phi)$$

$$\boxed{\begin{gathered}|\hat{L}_z| = L_z = m\hbar \\ \text{para } m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l\end{gathered}}$$

- **A projeção no eixo z do momento angular também é quantizada !!**



- **Princípio da incerteza de Heisemberg** para o momento angular: **só podemos conhecer o módulo e uma das projeções do momento angular ao mesmo tempo**

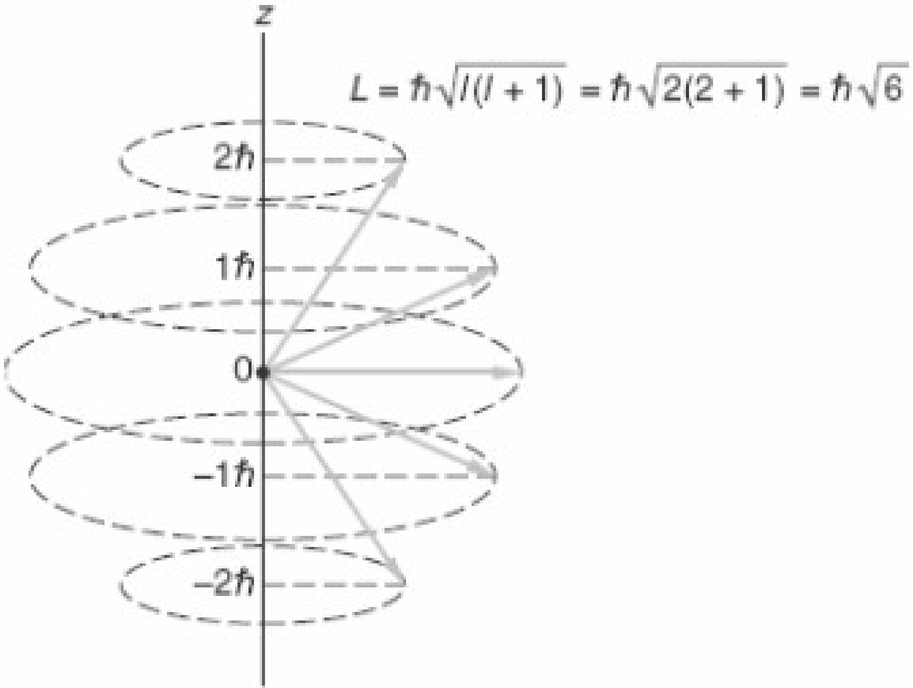
O operador projeção do momento angular

- A projeção do momento angular no eixo z: L_z

$$\boxed{\hat{L}_z\,\psi(r,\theta,\phi)=m\hbar\,\psi(r,\theta,\phi)}$$

$$\boxed{\begin{gathered}|\hat{L}_z|=L_z=m\hbar\\ \text{para}\ \ m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l\end{gathered}}$$

- **A projeção no eixo z do momento angular também é quantizada !!**



- **Princípio da incerteza de Heisemberg** para o momento angular: **só podemos conhecer o módulo e uma das projeções do momento angular ao mesmo tempo**

Resumo

- O desacoplamento da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas resulta em três equações diferenciais (assumindo):

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)f(\theta)g(\phi)$$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{R(r)}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR(r)}{dr}\right)+\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1 \\ \dfrac{1}{\operatorname{sen}\theta}\dfrac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\dfrac{df(\theta)}{d\theta}\right)=\left[\dfrac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta}-l(l+1)\right]f(\theta) \\ \dfrac{1}{g(\phi)}\dfrac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}=-m^2 \end{cases}$$

- Como o potencial Coulombiano só depende de r, fomos capazes de obter soluções para a parte angular sem depender do potencial

Resumo

- O desacoplamento da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas resulta em três equações diferenciais (assumindo):

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)f(\theta)g(\phi)$$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{R(r)}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR(r)}{dr}\right)+\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=C_1 \\ \boxed{f_{lm}(\theta)=\dfrac{(\text{sen }\theta)^{|m|}}{2^l l!}\left[\dfrac{d}{d(\cos\theta)}\right]^{l+|m|}(\cos^2\theta-1)^l} \\ \boxed{g(\phi)=e^{-im\phi}} \end{cases}$$

- Como o potencial Coulombiano só depende de r, fomos capazes de obter soluções para a parte angular sem depender do potencial

Resumo

- O momento angular é quantizado:

$$\boxed{\begin{gathered}|\hat{L}| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \\ \text{para } l = 0, 1, 2, 3, \ldots\end{gathered}}$$

- A projeção do momento angular no eixo z também é quantizada

$$\boxed{\begin{gathered}|\hat{L}_z| = L_z = m\hbar \\ \text{para } m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l\end{gathered}}$$

- Isso implica na discretização do vetor momento angular!
- Pelo princípio da incerteza de Heisemberg para o momento angular, só podemos conhecer ao mesmo tempo o módulo do momento angular e uma de suas projeções.

Na próxima aula...

- Terminaremos de resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio:
  - A solução da parte radial
  - A quantização da energia
  - Níveis de energia e linhas de emissão
  - O átomo de Schrödinger