

Física Moderna II

Aula 02

Marcelo G Munhoz
Pellettron, 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:
$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Equação de Schroedinger em três dimensões

- Para alguns problemas, a solução é mais simples se a equação de Schroedinger for escrita em coordenadas esféricas
- Isso ocorre, por exemplo, para o caso do potencial Coulombiano, que depende apenas do raio r e não depende de φ ou θ

Equação de Schroedinger em três dimensões

- A solução da parte angular da equação de Schroedinger em três dimensões em coordenadas esféricas é dada pelos chamados **esféricos harmônicos**:

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \Theta_{lm_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\phi)$$

onde: $\Phi_{m_l}(\phi) = e^{im_l\phi}$

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = \text{sen}^{|m_l|}\theta \cdot F_{l|m_l|}(\cos\theta)$$

com $|m_l| = 0, 1, 2, 3, \dots$ e $l = |m_l|, |m_l|+1, |m_l|+2, \dots$

Átomo de um elétron

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

Harmônicos esféricos

Equação de Schroedinger em três dimensões

- A solução da parte radial da equação de Schroedinger em três dimensões em coordenadas esféricas é dada por:

$$R_{nl} = e^{-Zr/na_0} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^l G_{nl} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)$$

onde: $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$

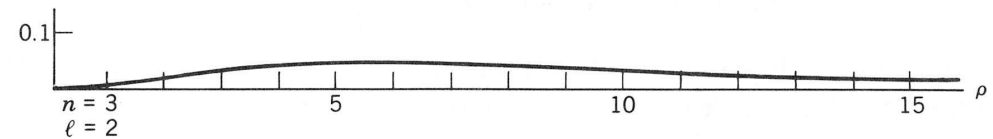
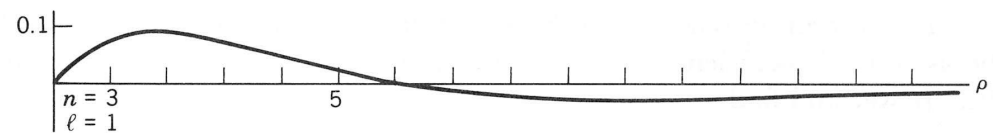
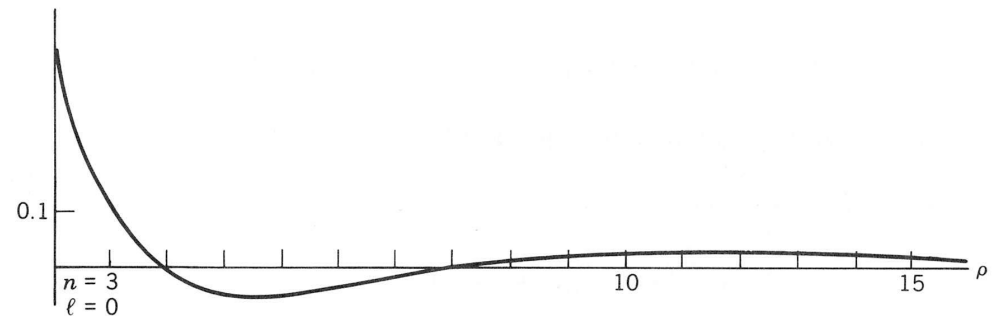
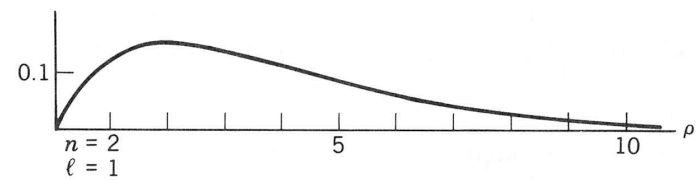
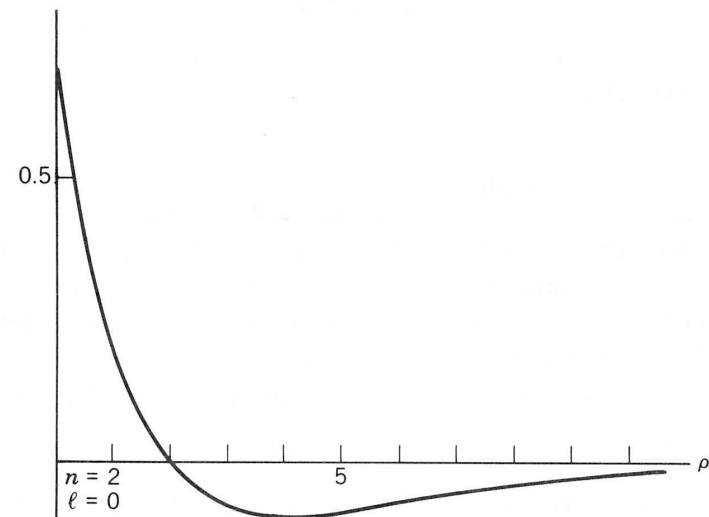
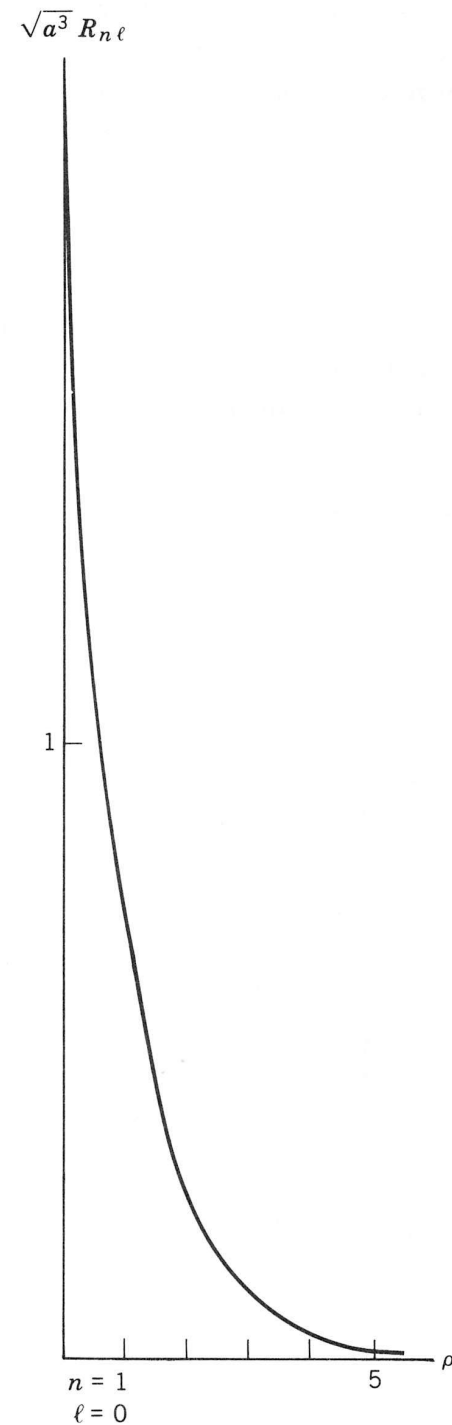
$$n = l+1, l+2, l+3, \dots$$

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:
 - $n = 1, 2, 3, \dots$
 - $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
 - $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

Átomo de um elétron

- Função de onda:

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

- Os números quânticos do átomo de um elétron, podem assumir os valores:

- $n = 1, 2, 3, \dots$
- $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
- $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

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	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

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:

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

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

$$\bar{L}_z = \hbar \cdot m_l$$

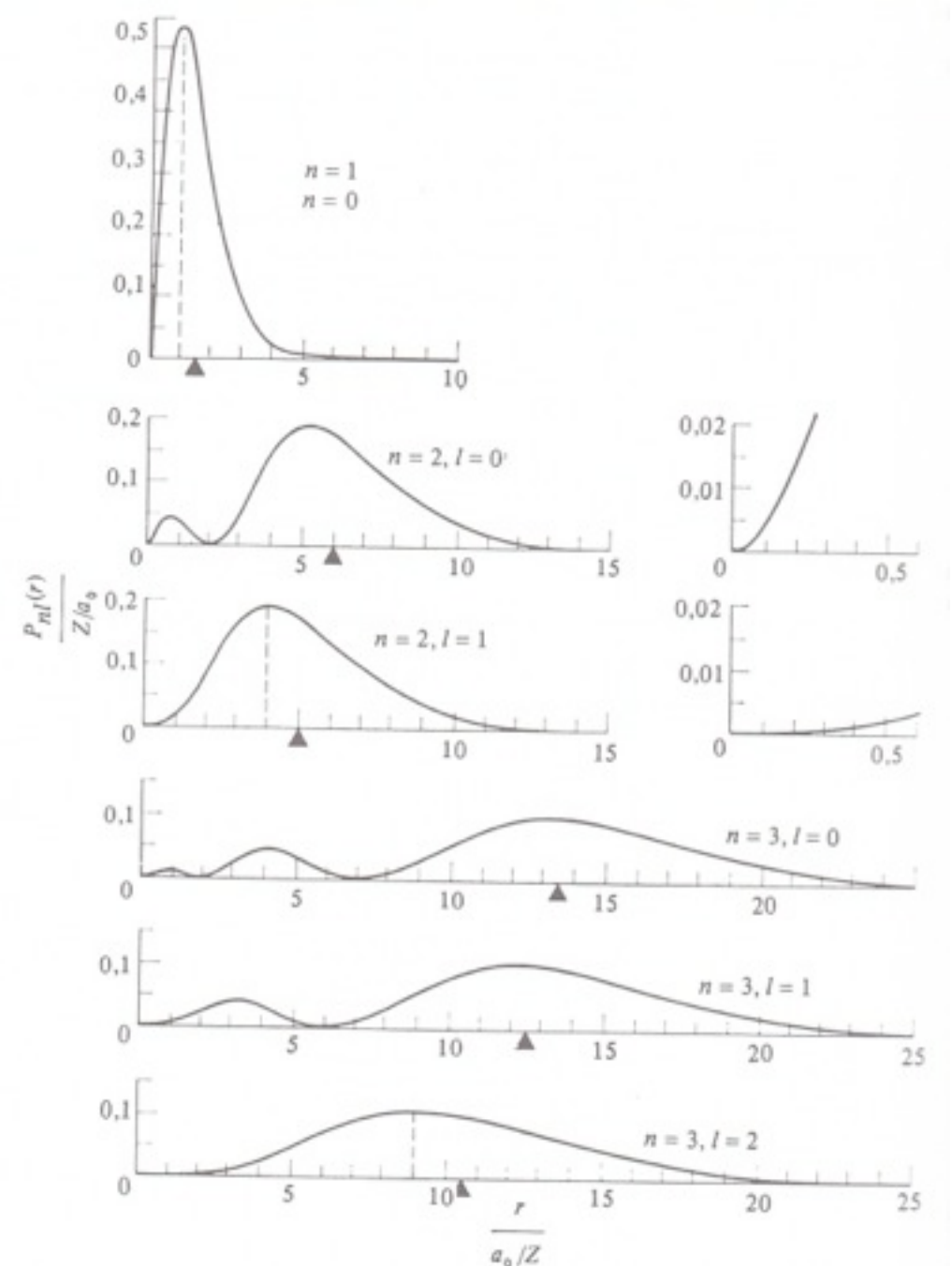
Densidades de Probabilidade

- A densidade de probabilidade radial é dada por:

$$P_{nl}(r)dr = R_{nl}^*(r)R_{nl}(r)r^2dr$$

- A partir dela, podemos, por exemplo, calcular o valor esperado para o raio da órbita de cada estado quântico:

$$\begin{aligned} \bar{r}_{nl} &= \int_0^\infty r P_{nl}(r) dr \\ &= \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\} \end{aligned}$$



Densidades de Probabilidade

- A parte angular, que é dada por:

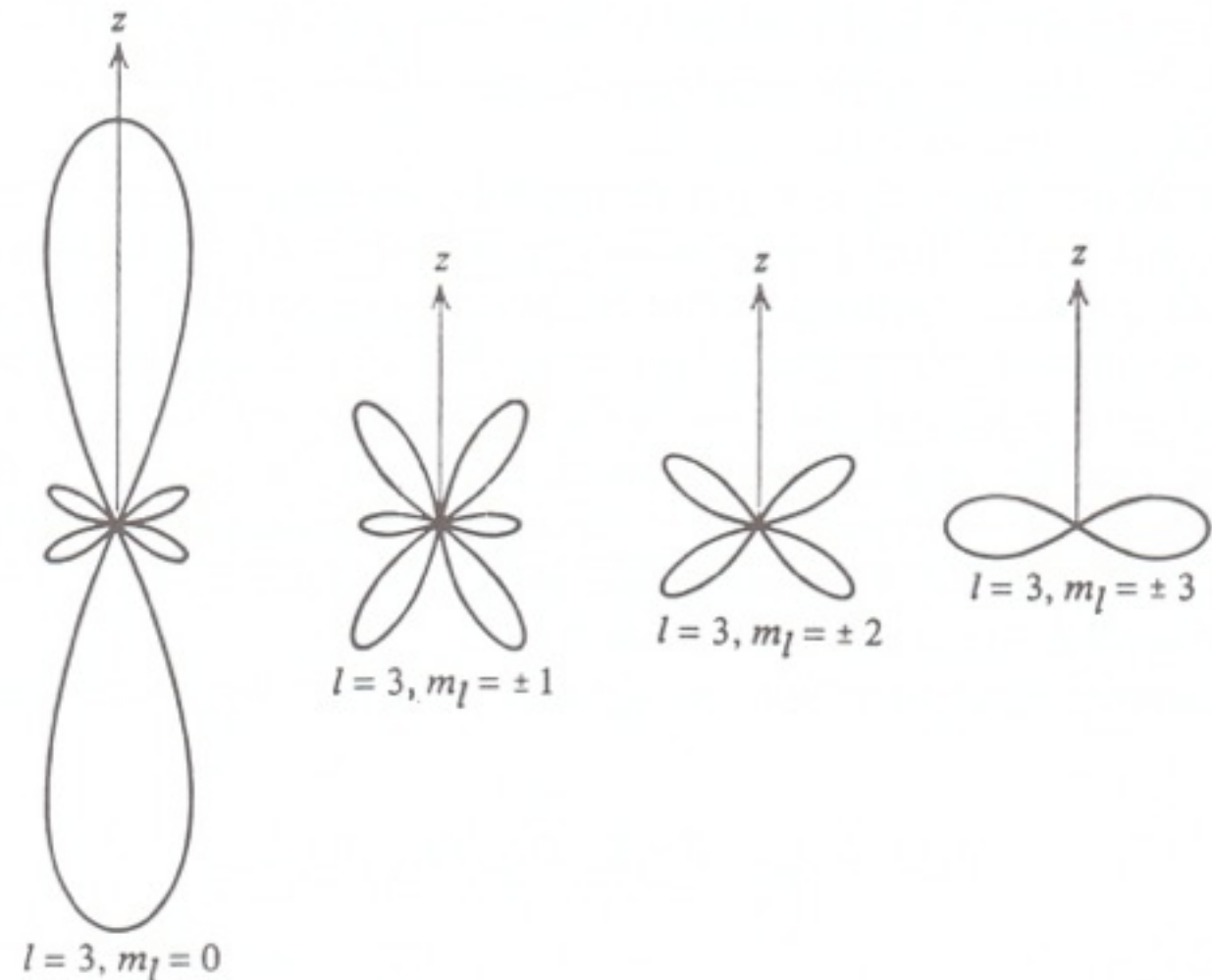
$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \Theta_{lm_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\phi)$$

- apresenta uma simetria azimutal, pois:

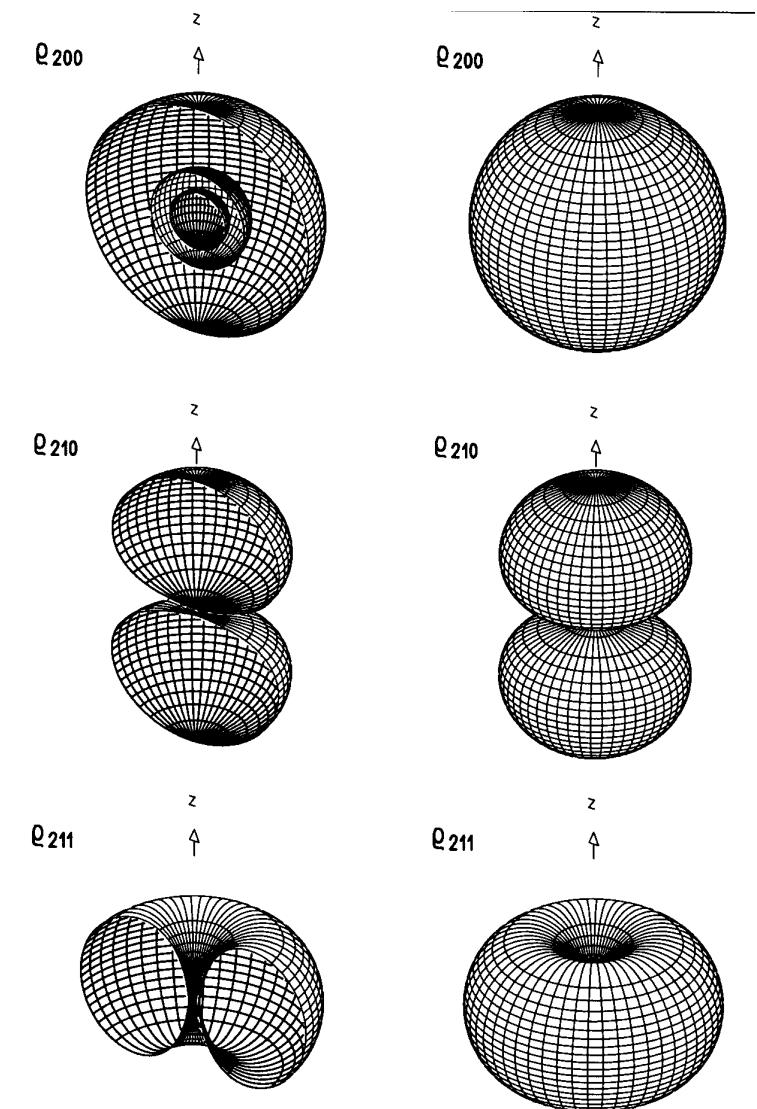
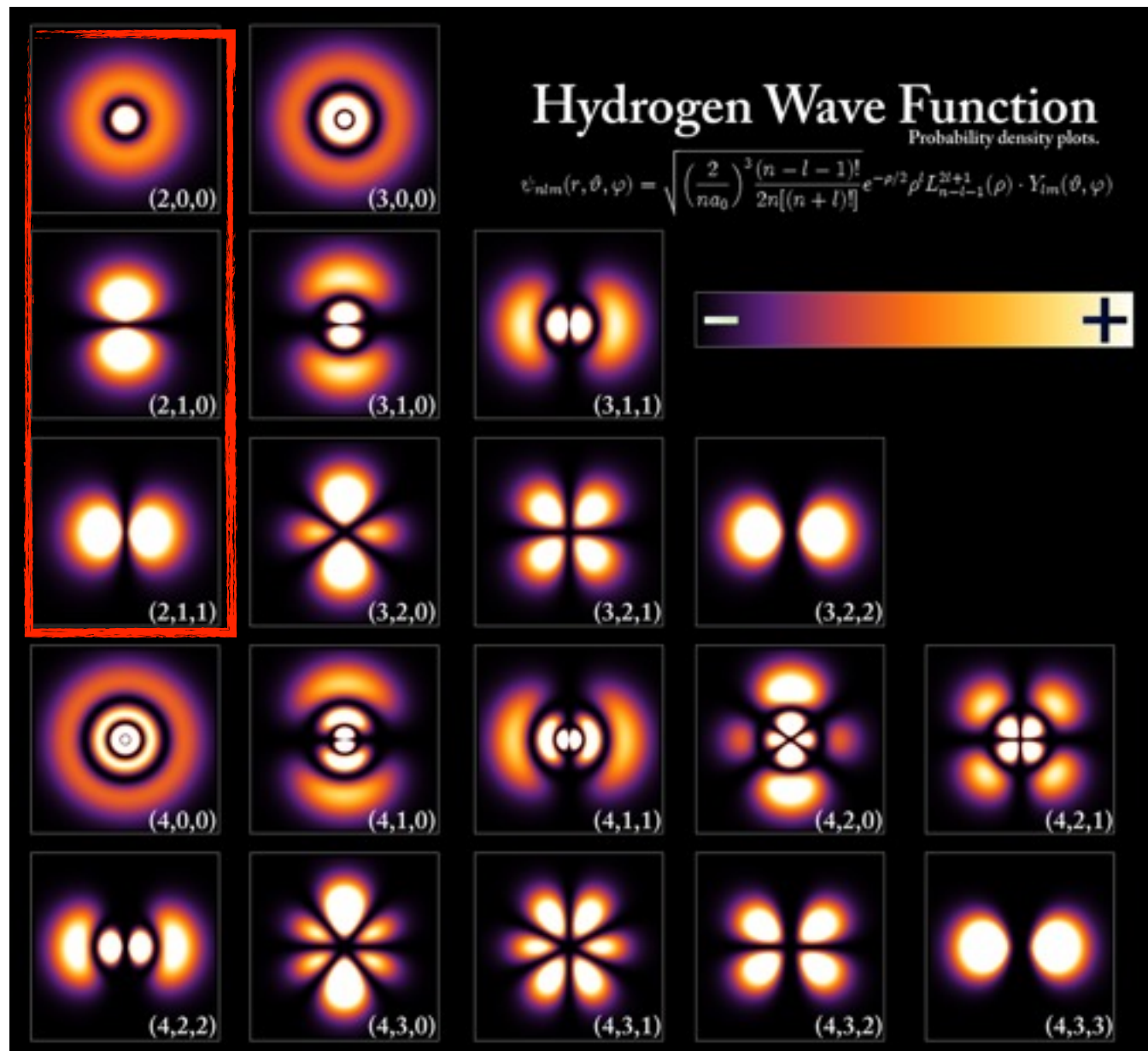
$$\Phi_{m_l}^*(\phi) \cdot \Phi_{m_l}(\phi) = 1$$

- restando apenas a dependência com o ângulo polar:

$$\Theta_{lm_l}^*(\theta) \cdot \Theta_{lm_l}(\theta)$$

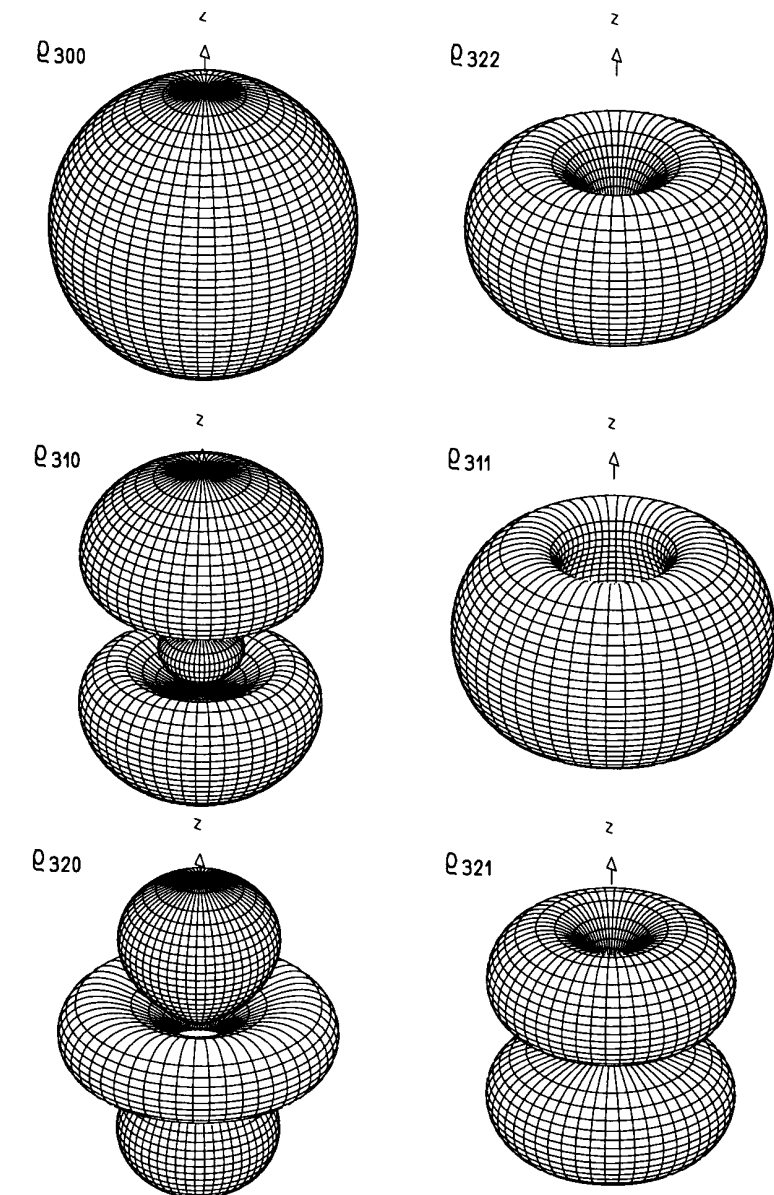
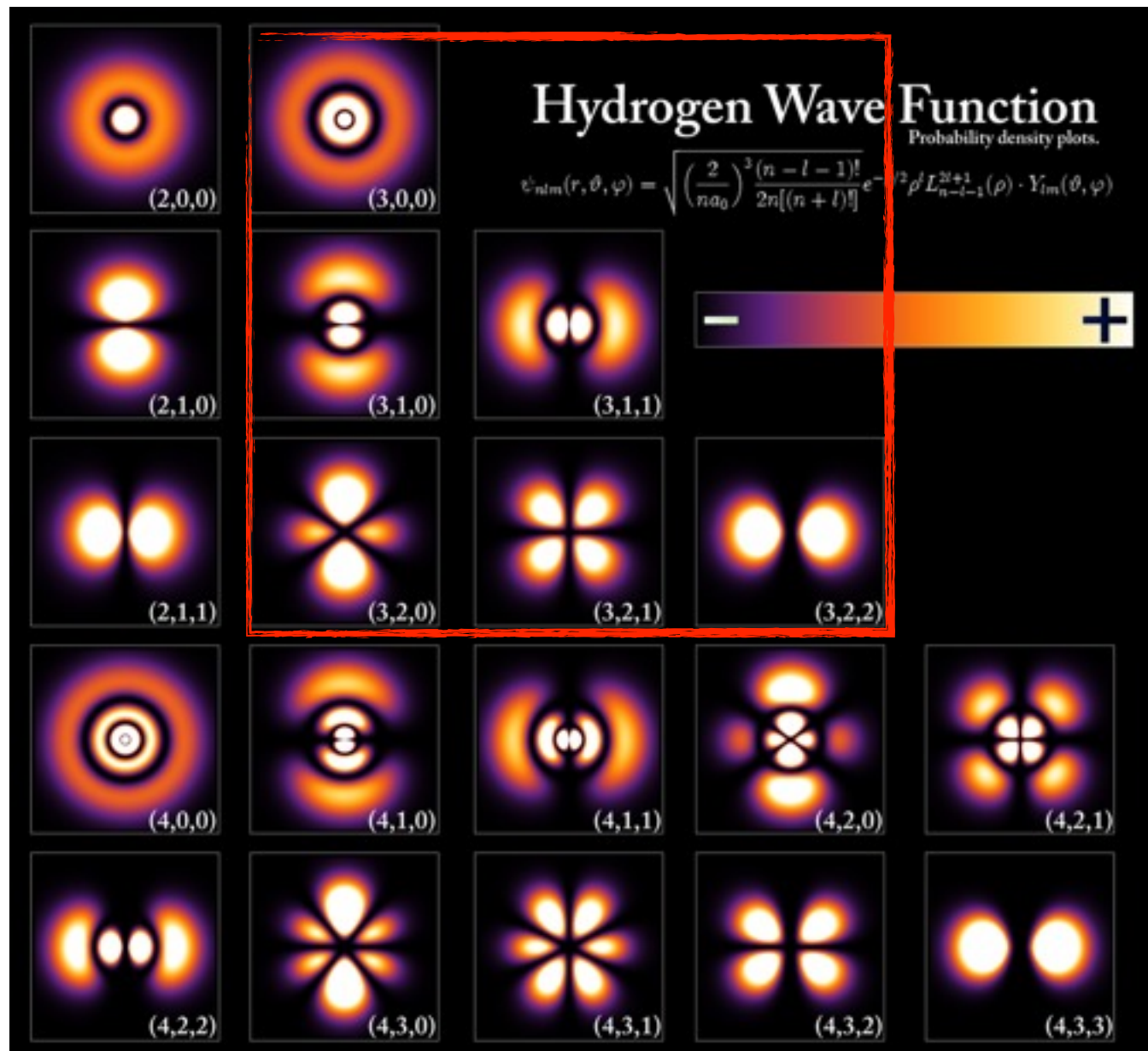


Densidades de Probabilidade



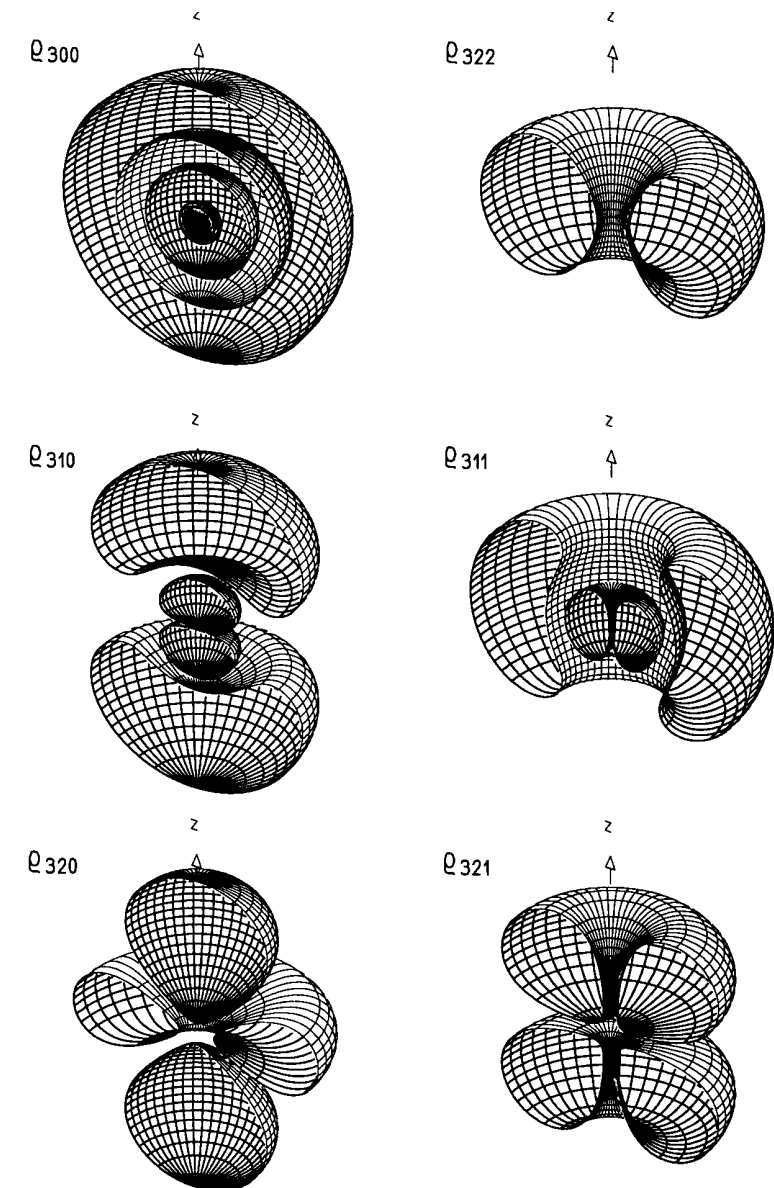
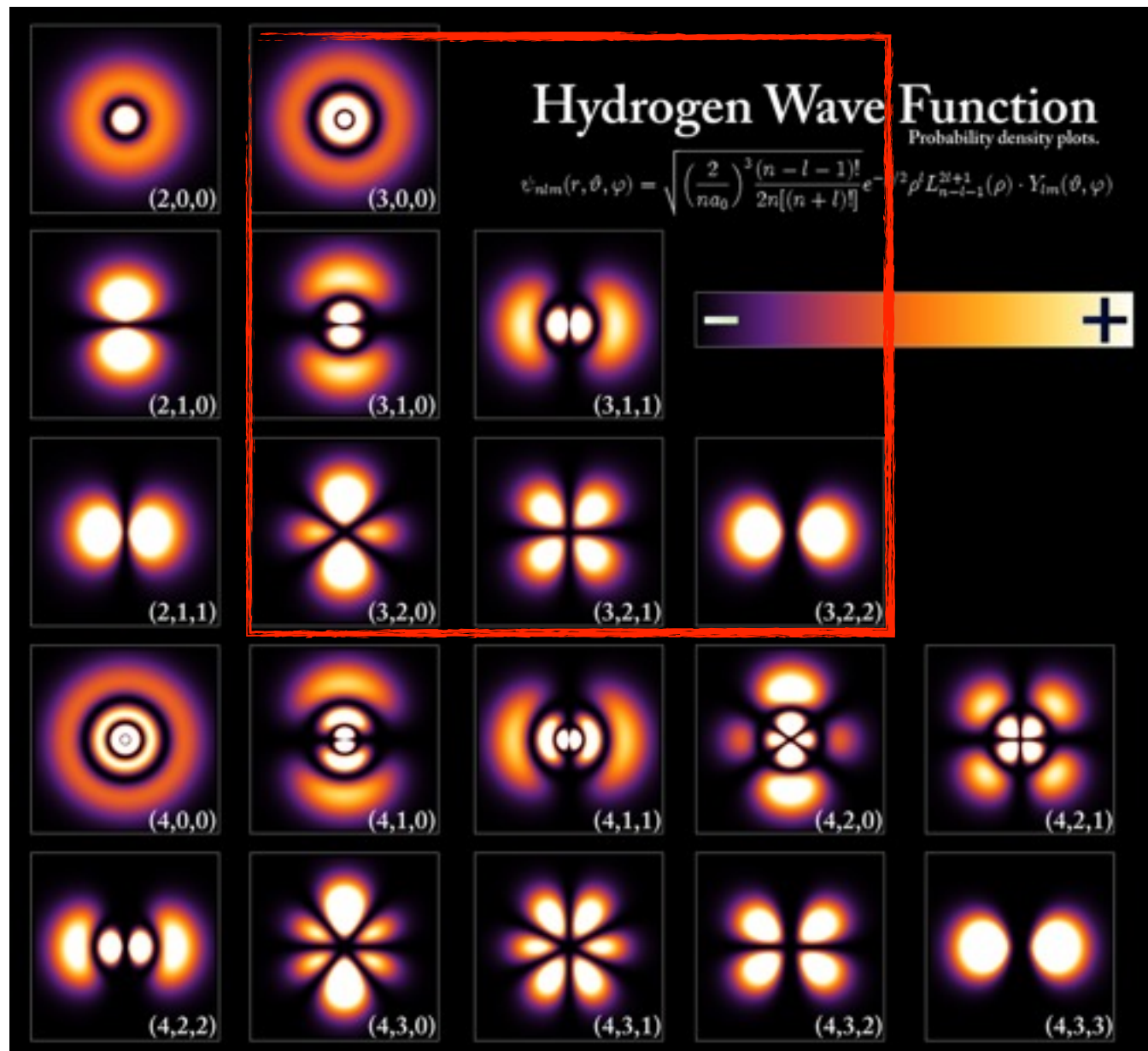
http://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function

Densidades de Probabilidade



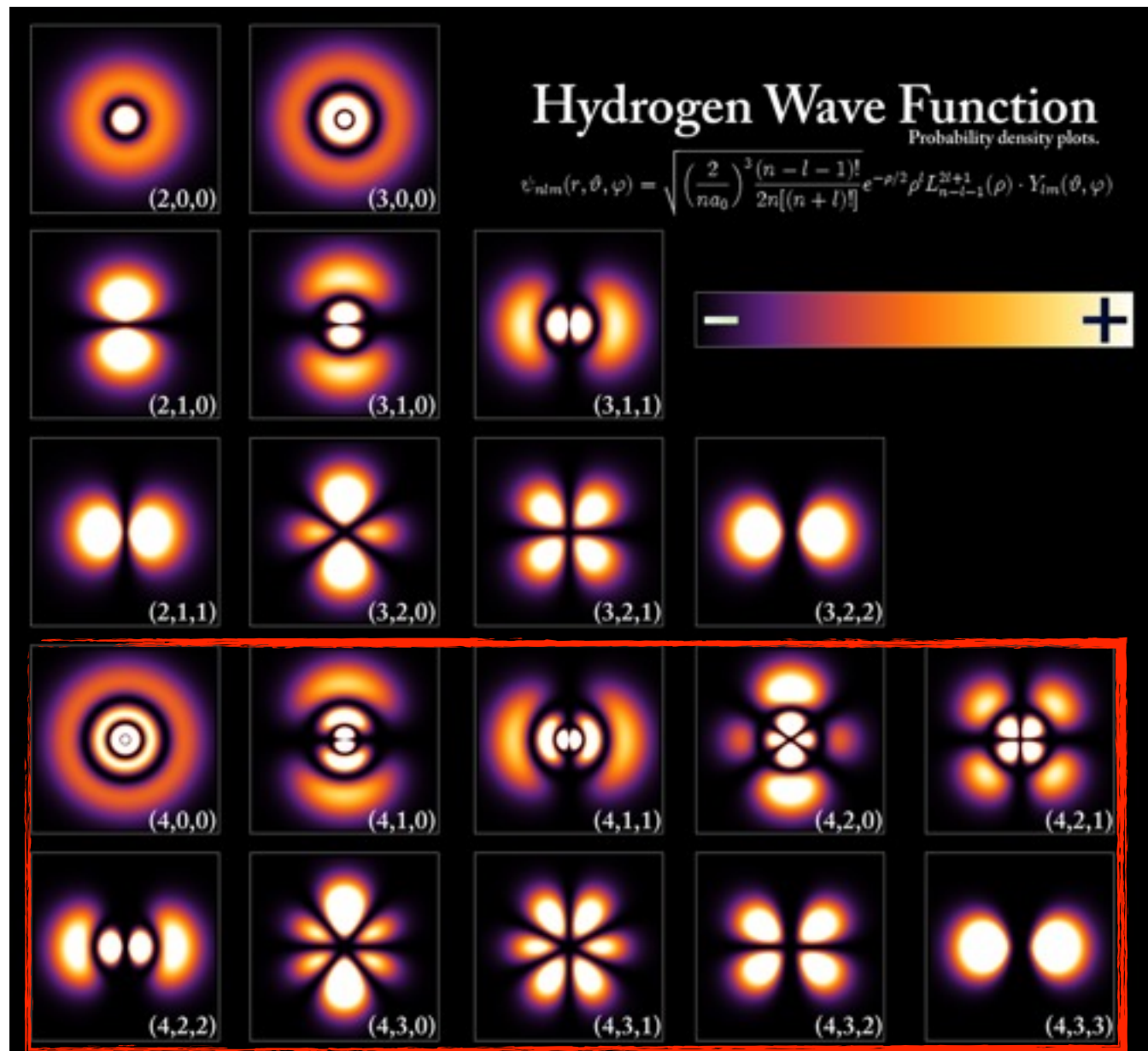
http://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function

Densidades de Probabilidade

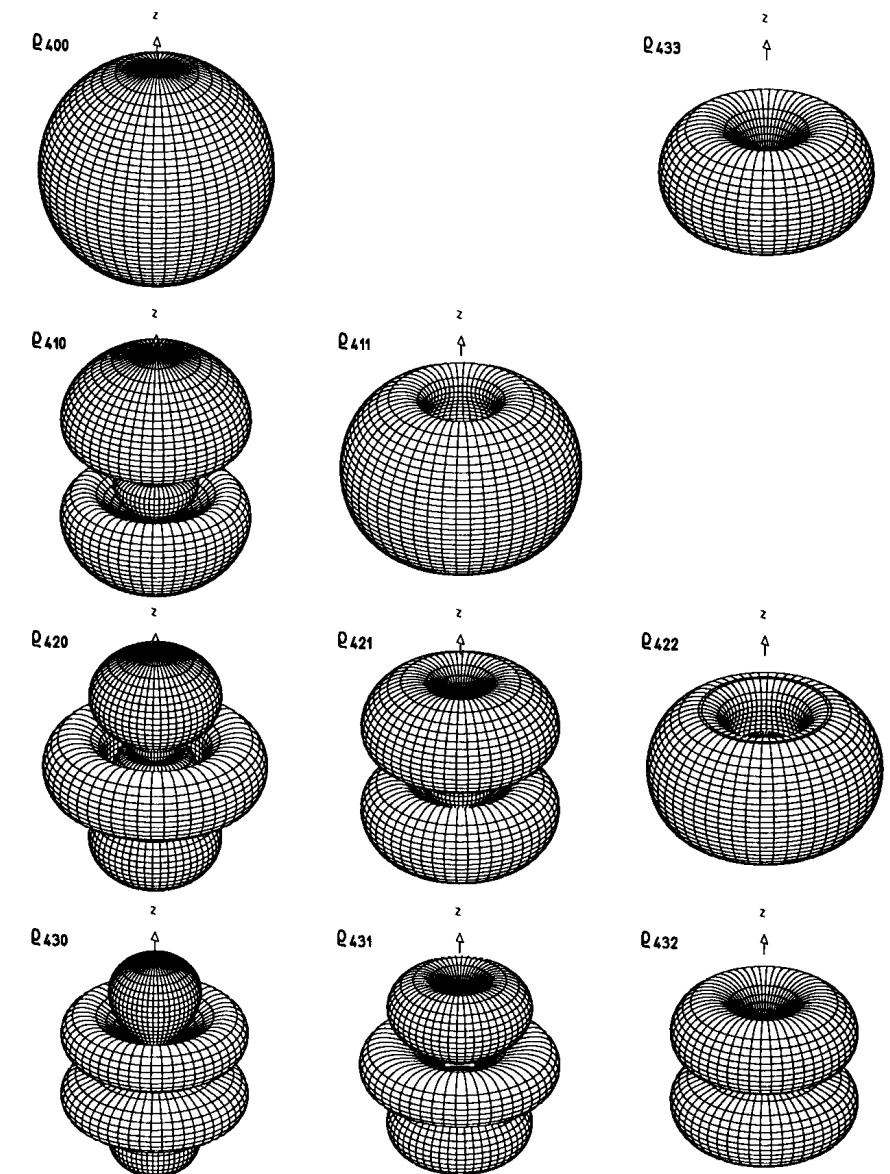


http://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function

Densidades de Probabilidade



http://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function



Schroedinger X Bohr

- Qual a vantagem da teoria de Schroedinger sobre a teoria de Bohr do ponto de vista da observação da natureza?
- A teoria de Schroedinger consegue descrever melhor os observáveis?

Schroedinger X Bohr

- Os níveis de energia previstos pela teoria de Schroedinger são equivalentes aos da teoria de Bohr e ambas teorias não conseguem prever todos os níveis observados!
- E agora?

