

# AULA 5

# O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

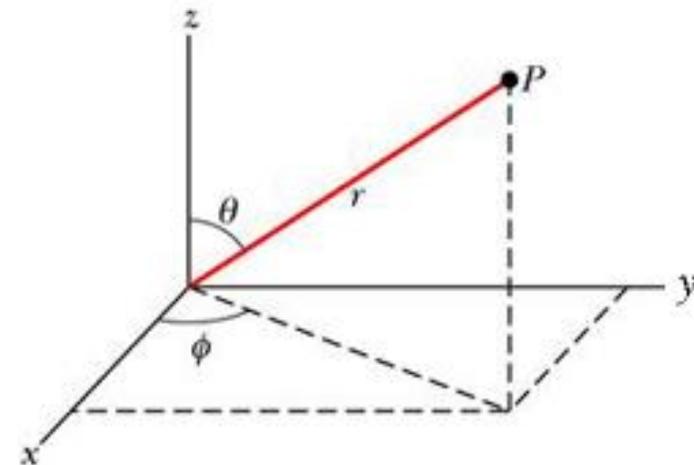
Problema: Analisar o átomo de Hidrogênio com base na equação de onda de Schrödinger.

Situação 3-Dimensional, na qual o termo potencial tem dependência com  $\frac{1}{r}$ . Neste caso, utiliza-se coordenadas esféricas. Após algumas manipulações matemáticas chega-se a

$$\frac{\hbar}{2M} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \Psi + \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0$$

Deseja-se calcular a  $\Psi(r, \theta, \phi)$  resolvendo-se a equação diferencial parcial acima.

Como ???



O método tradicional consiste em propor soluções da forma

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (1)$$

Substituindo a Eq. (1) na equação original resulta

$$\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin\theta}{\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} \quad (2)$$

Como é possível verificar, o lado direito da Eq. (2) depende somente de  $\phi$ . Analogamente, o lado esquerdo é função apenas de  $r$  e  $\theta$ .

$\Rightarrow$  Ambos os lados devem ser iguais a uma constante, por exemplo,  $m^2$ .

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2$$
$$\frac{\sin^2\theta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin\theta}{\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = m^2$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Phi \\ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} r^2 \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \end{array} \right. \quad (3)$$

Analogamente, o lado esquerdo da Eq. (3) é função apenas de  $r$ , e o lado direito, é função apenas de  $\theta$ . Logo, isto somente será verdadeiro, se e somente se, ambos os lados forem iguais a uma constante.

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} r^2 \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = l(l+1)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R = \frac{l(l+1)}{r^2} R$$

$$\frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta - \frac{1}{\theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \Rightarrow \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta = -l(l+1) \Theta$$

Temos agora três equações diferenciais ordinárias, uma para cada variável

Pergunta: Por que foram escolhidas as constantes de separação  $m^2$  e  $l(l+1)$ ???

Solução de (5):

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Rightarrow \Phi(\phi) = A \exp(\pm im\phi)$$

$$m = 1, 2, 3, \dots \Rightarrow \Phi(0) = \Phi(2\pi)$$

A equação (7) é conhecida em matemática como **Equação Associada de Legendre**. Se  $l$  é um número não-inteiro, obtém-se uma série infinita que diverge em  $\theta = 0$  e  $\theta = \pi$ . Todavia, se  $l$  é um inteiro tal que  $l = |m|, |m+1|, |m+2|, \dots$  a série é denominada **Polinômios de Legendre**

$$P_l^m(\cos \theta) = \Theta(\theta)$$

Exemplos:

$$\Theta_{0,0} = 1$$

$$\Theta_{1,0} = \cos \theta$$

$$\Theta_{2,0} = 3 \cos^2 \theta - 1$$

$$\Theta_{1,\pm 1} = \sin \theta$$

Também soluções para  $R(r)$  (equação (8)) são possíveis se

$$E = \frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2} \quad \Rightarrow \quad \text{Energia de Bohr !!!}$$

onde  $n$  é um inteiro, positivo,  $n \geq l + 1$ .

Resulta 
$$R(r) = \left(\frac{r}{na}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$$

onde  $a$  é o raio de Bohr e  $L$  representa os **polinômios associados de Laguerre**.

Resumo:

$$\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

Para um inteiro fixo  $n$ , os valores permitidos de  $l$  se tornam  $0, 1, 2, \dots, (n - 1)$

Para um valor fixo de  $l$ , os valores permitidos de  $m$  são dados por

$$-l \dots 0 \dots +l$$

$n$	Número quântico principal
$l$	Número quântico azimutal
$m$	Número quântico magnético

Convenção para o valor de  $l$  (espectroscopia)

$l$	0	1	2	3	4	5
	s	p	d	f	g	h

Portanto, um elétron 3d, por exemplo, é um elétron no estado  $n = 3$  e  $l = 2$ .

Existe ainda um quarto número quântico  $s_z\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$

que caracteriza o spin, uma característica puramente relativística do elétron.

Princípio de Exclusão de Pauli:

"Dois elétrons em um mesmo sistema físico não podem possuir o mesmo conjunto de números quânticos "

Portanto, para um estado  $s, l = 1, m = 0 \Rightarrow$  são permitidos dois elétrons, spin "up" e "down".

Para um estado p:  $m = -1, 0, 1 \Rightarrow$  6 elétrons

Para um estado d: 10 elétrons

CONCLUSÃO: É possível entender as propriedades dos átomos com base neste princípio.

ESTRATÉGIA: Ordene os estados em ordem crescente de energia  $1s, 2s, 2p, 3s, \dots$

Pergunta final: Por que o átomo é estável ???

	$n$	$l$	$ml$	$s$
1s	1	0	0	$1/2, -1/2$
2s	2	0	0	$1/2, -1/2$
2p	2	1	1, 0, -1	$1/2, -1/2$
3s	3	0	0	$1/2, -1/2$
3p	3	1	1, 0, -1	$1/2, -1/2$
3d	3	2	2, 1, 0, -1, -2	$1/2, -1/2$
4s	4	0	0	$1/2, -1/2$
4p	4	1	1, 0, -1	$1/2, -1/2$
4d	4	2	2, 1, 0, -1, -2	$1/2, -1/2$
4f	4	3	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	$1/2, -1/2$

# Configuração eletrônica dos elementos

A configuração eletrônica dos elementos da tabela periódica pode ser construída usando-se os **números quânticos do átomo de hidrogênio** e o **princípio de exclusão de Pauli**, começando no elemento mais leve, o hidrogênio.

O **hidrogênio** contém apenas um próton e um elétron. O elétron ocupa o nível mais baixo de energia do átomo de hidrogênio, caracterizado pelo número quântico principal,  $n = 1$ . O número quântico orbital  $l$  é igual a zero e se refere a um orbital  $s$ . O orbital  $s$  pode acomodar dois elétrons de spins opostos, mas apenas um elétron é ocupado. A notação utilizada para representar a configuração eletrônica do átomo de hidrogênio é  $1s^1$ .

O **hélio** é o segundo elemento da tabela periódica. Para esse e todos os outros átomos, ainda se usa os mesmos números quânticos do átomo de hidrogênio. A aproximação é justificada, considerando que a parte central de todos os átomos, incluindo núcleo e camadas eletrônicas completamente preenchidas, pode ser tratada como uma única partícula carregada, a qual produz um potencial muito parecido com a do próton do átomo de hidrogênio. Enquanto as energias dos elétrons não são as mesmas do átomo de hidrogênio, as funções de onda dos elétrons são muito parecidas e podem ser classificadas da mesma forma. Uma vez que o hélio contém dois elétrons, ele pode acomodar seus dois elétrons no orbital  $1s$ , e conseqüentemente, a notação será  $1s^2$ , e este orbital encontra-se completamente preenchido. Os dois elétrons no átomo de hélio também completam todos os orbitais disponíveis associados com o primeiro número quântico principal, produzindo uma camada externa preenchida. Átomos com a camada externa completamente preenchida são chamados de gases nobres ou quimicamente inertes.

O **lítium** contém três elétrons, e portanto tem o orbital 1s completamente preenchido, e mais um elétrno no próximo orbital 2s. A configuração eletrônica é portanto  $1s^2 2s^1$

O **berílio** tem quatro elétrons, dois elétrons no orbital 1s e dois elétrons no orbital 2s

1	Hydrogen	H	$1s^1$						
2	Helium	He	$1s^2$						
3	Lithium	Li	$1s^2$	$2s^1$					
4	Beryllium	Be	$1s^2$	$2s^2$					
5	Boron	B	$1s^2$	$2s^2$	$2p^1$				
6	Carbon	C	$1s^2$	$2s^2$	$2p^2$				
7	Nitrogen	N	$1s^2$	$2s^2$	$2p^3$				
8	Oxygen	O	$1s^2$	$2s^2$	$2p^4$				
9	Fluorine	F	$1s^2$	$2s^2$	$2p^5$				
10	Neon	Ne	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$				
11	Sodium	Na	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^1$			
12	Magnesium	Mg	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$			
13	Aluminum	Al	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^1$		
14	Silicon	Si	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^2$		
15	Phosphorous	P	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^3$		
16	Sulfur	S	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^4$		
17	Chlorine	Cl	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^5$		

# PERIODIC TABLE Atomic Properties of the Elements

Period	1	1A	2	3	4
	2	1A	2A	3A	4A
	3	1A	2A	3A	4A
	4	1A	2A	3A	4A
	5	1A	2A	3A	4A
	6	1A	2A	3A	4A
	7	1A	2A	3A	4A

**Frequently used fundamental physical constants**  
For the most accurate values of these and other constants, visit [physics.nist.gov/constants](http://physics.nist.gov/constants)  
1 second = 9 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of <sup>133</sup>Cs

speed of light in vacuum	<i>c</i>	299 792 458 m s <sup>-1</sup> (exact)
Planck constant	<i>h</i>	6.6261 × 10 <sup>-34</sup> J s ( <i>h</i> = <i>h</i> /2π)
elementary charge	<i>e</i>	1.6022 × 10 <sup>-19</sup> C
electron mass	<i>m<sub>e</sub></i>	9.1094 × 10 <sup>-31</sup> kg
	<i>m<sub>e</sub>c<sup>2</sup></i>	0.5110 MeV
proton mass	<i>m<sub>p</sub></i>	1.6726 × 10 <sup>-27</sup> kg
fine-structure constant	<i>α</i>	1/137.036
Rydberg constant	<i>R<sub>∞</sub></i>	10 973 732 m <sup>-1</sup>
	<i>R<sub>∞</sub>c</i>	3.289 84 × 10 <sup>15</sup> Hz
	<i>R<sub>∞</sub>hc</i>	13.6057 eV
Boltzmann constant	<i>k</i>	1.3807 × 10 <sup>-23</sup> J K <sup>-1</sup>

- Solids
- Liquids
- Gases
- Artificially Prepared

Physics Laboratory <a href="http://physics.nist.gov">physics.nist.gov</a>										Standard Reference Data Program <a href="http://www.nist.gov/srd">www.nist.gov/srd</a>													
IIIB		IVB		VB		VIB		VIIB		VIII		VIII		VIII		VIII							
5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar
Boron	10.811	Carbon	12.0107	Nitrogen	14.00674	Oxygen	15.9994	Fluorine	18.99840	Neon	20.1797	Aluminum	26.98154	Silicon	28.0855	Phosphorus	30.97376	Sulfur	32.066	Chlorine	35.4527	Argon	39.948
1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	8.2980	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	11.2603	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	14.5341	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	13.6181	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	17.4228	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	21.5646	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	5.9858	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	8.1517	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	10.4867	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	10.3600	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	12.9676	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	15.7596

IIIA										IVA										VA										VIA										VIIA										VIII										IB										IIB									
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr																																												
Potassium	39.0983	Calcium	40.078	Scandium	44.95591	Titanium	47.867	Vanadium	50.9415	Chromium	51.9961	Manganese	54.93805	Iron	55.845	Cobalt	58.93320	Nickel	58.6934	Copper	63.546	Zinc	65.39	Gallium	69.723	Germanium	72.61	Arsenic	74.92160	Selenium	78.96	Bromine	79.904	Krypton	83.80																																												
[Ar]4s <sup>1</sup>	6.1132	[Ar]4s <sup>2</sup>	6.5615	[Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	6.7462	[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	6.7665	[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	7.4340	[Ar]3d <sup>4</sup> 4s <sup>2</sup>	7.9024	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	7.7264	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	7.7264	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	7.8810	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	7.6398	[Ar]3d <sup>9</sup> 4s <sup>1</sup>	7.7264	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	9.3942	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	5.9993	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	7.8994	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	9.7886	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	9.7524	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	11.8138	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>	13.9996																																												

Atomic Number: 58  
Ground-state Level: 1G<sub>4</sub>  
Symbol: Ce  
Name: Cerium  
Atomic Weight: 140.116  
Ground-state Configuration: [Xe]4f5d6s<sup>2</sup>  
Ionization Energy (eV): 5.5387

57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu
Lanthanum	138.9055	Cerium	140.116	Praseodymium	140.90765	Neodymium	144.24	Promethium	(145)	Samarium	150.36	Europium	151.964	Gadolinium	157.25	Terbium	158.92534	Dysprosium	162.50	Holmium	164.93032	Erbium	167.26	Thulium	168.93421	Ytterbium	173.04	Lutetium	174.967
[Xe]5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	5.5769	[Xe]4f5d6s <sup>2</sup>	5.5387	[Xe]4f5d6s <sup>2</sup>	5.473	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.5250	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.582	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.6437	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.6704	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	6.1498	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.8638	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.9389	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	6.0215	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	6.1077	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	6.1843	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	6.2542	[Xe]4f6s <sup>2</sup>	5.4259

<sup>†</sup>Based upon <sup>12</sup>C. ( ) indicates the mass number of the most stable isotope.

