



AULA 5

O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

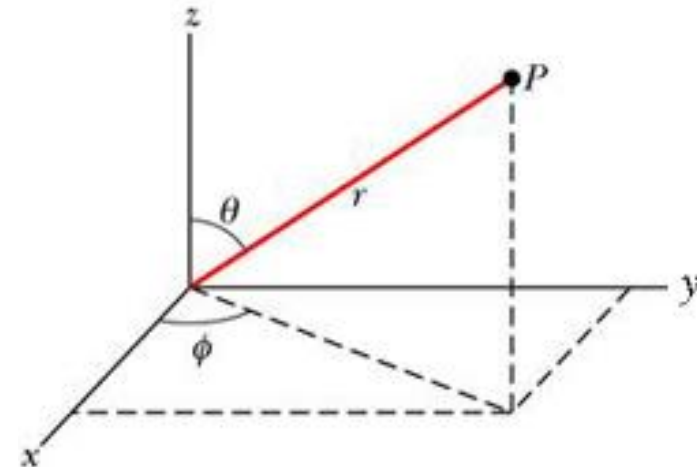
Problema: Analisar o átomo de Hidrogênio com base na equação de onda de Schrödinger.

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 ϕ . Analogamente, o lado esquerdo é função apenas de r e θ .

\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 θ . 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
1 second = 9 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of ¹³³Cs

speed of light in vacuum	<i>c</i>	299 792 458 m s ⁻¹ (exact)
Planck constant	<i>h</i>	6.6261 × 10 ⁻³⁴ J s (<i>h</i> = <i>h</i> /2π)
elementary charge	<i>e</i>	1.6022 × 10 ⁻¹⁹ C
electron mass	<i>m_e</i>	9.1094 × 10 ⁻³¹ kg
	<i>m_ec²</i>	0.5110 MeV
proton mass	<i>m_p</i>	1.6726 × 10 ⁻²⁷ kg
fine-structure constant	<i>α</i>	1/137.036
Rydberg constant	<i>R_∞</i>	10 973 732 m ⁻¹
	<i>R_∞c</i>	3.289 84 × 10 ¹⁵ Hz
	<i>R_∞hc</i>	13.6057 eV
Boltzmann constant	<i>k</i>	1.3807 × 10 ⁻²³ J K ⁻¹

- Solids
- Liquids
- Gases
- Artificially Prepared

Physics Laboratory physics.nist.gov										Standard Reference Data Program www.nist.gov/srd									
IIIB		IVB		VB		VIB		VIIB		VIII		VIII		VIII		VIII			
5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22		
B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	K	Ca	Sc	Ti		
Boron 10.811 1s ² 2s ² 2p ¹ 8.2980	Carbon 12.0107 1s ² 2s ² 2p ² 11.2603	Nitrogen 14.00674 1s ² 2s ² 2p ³ 14.5341	Oxygen 15.9994 1s ² 2s ² 2p ⁴ 13.6181	Fluorine 18.99840 1s ² 2s ² 2p ⁵ 17.4228	Neon 20.1797 1s ² 2s ² 2p ⁶ 21.5646	Sodium 22.98977 [Ne]3s ¹ 5.1391	Magnesium 24.3050 [Ne]3s ² 7.6462	Aluminum 26.98154 [Ne]3s ² 3p ¹ 5.9858	Silicon 28.0855 [Ne]3s ² 3p ² 8.1517	Phosphorus 30.97376 [Ne]3s ² 3p ³ 10.4867	Sulfur 32.066 [Ne]3s ² 3p ⁴ 10.3600	Chlorine 35.4527 [Ne]3s ² 3p ⁵ 12.9676	Argon 39.948 [Ne]3s ² 3p ⁶ 15.7596	Potassium 39.0983 [Ar]4s 4.3407	Calcium 40.078 [Ar]4s ² 6.1132	Scandium 44.95591 [Ar]3d ¹ 4s ² 6.5615	Titanium 47.867 [Ar]3d ² 4s ² 6.8281		

Atomic Number: 58
Ground-state Level: 1G₄
Symbol: Ce
Name: Cerium
Atomic Weight: 140.116
Ground-state Configuration: [Xe]4f5d6s²
Ionization Energy (eV): 5.5387

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Lanthanum 138.9055 [Xe]5d6s ² 5.5769	Cerium 140.116 [Xe]4f5d6s ² 5.5387	Praseodymium 140.90765 [Xe]4f5d6s ² 5.473	Neodymium 144.24 [Xe]4f6s ² 5.5250	Promethium (145) [Xe]4f6s ² 5.582	Samarium 150.36 [Xe]4f6s ² 5.6437	Europium 151.964 [Xe]4f6s ² 5.6704	Gadolinium 157.25 [Xe]4f7s ² 6.1498	Terbium 158.92534 [Xe]4f9s ² 5.8638	Dysprosium 162.50 [Xe]4f10s ² 5.9389	Holmium 164.93032 [Xe]4f11s ² 6.0215	Erbium 167.26 [Xe]4f12s ² 6.1077	Thulium 168.93421 [Xe]4f13s ² 6.1843	Ytterbium 173.04 [Xe]4f14s ² 6.2542	Lutetium 174.967 [Xe]4f14s ² 5.4259
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Actinium (227) [Rn]6d7s ² 5.17	Thorium 232.0381 [Rn]6d7s ² 6.3067	Protactinium 231.03688 [Rn]5f6d7s ² 5.89	Uranium 238.0289 [Rn]5f6d7s ² 6.1941	Neptunium (237) [Rn]5f6d7s ² 6.2657	Plutonium (244) [Rn]5f7s ² 6.0262	Americium (243) [Rn]5f7s ² 5.9738	Curium (247) [Rn]5f7s ² 5.9915	Berkelium (247) [Rn]5f7s ² 6.1979	Californium (251) [Rn]5f7s ² 6.2817	Einsteinium (252) [Rn]5f7s ² 6.42	Fermium (257) [Rn]5f7s ² 6.50	Mendelevium (258) [Rn]5f7s ² 6.58	Nobelium (259) [Rn]5f7s ² 6.65	Lawrencium (262) [Rn]5f14s ² 7p ¹ 4.9 ?

[†]Based upon ¹²C. () indicates the mass number of the most stable isotope.

