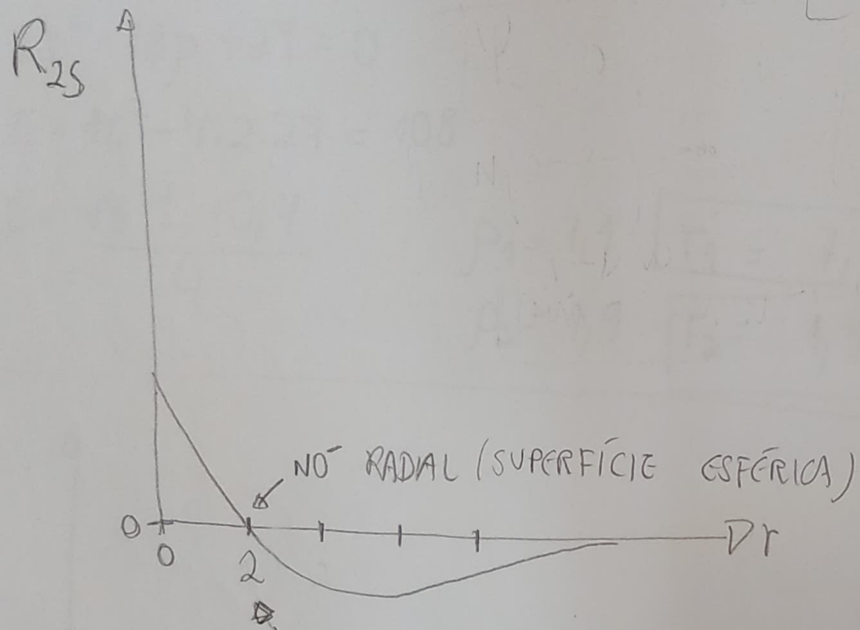
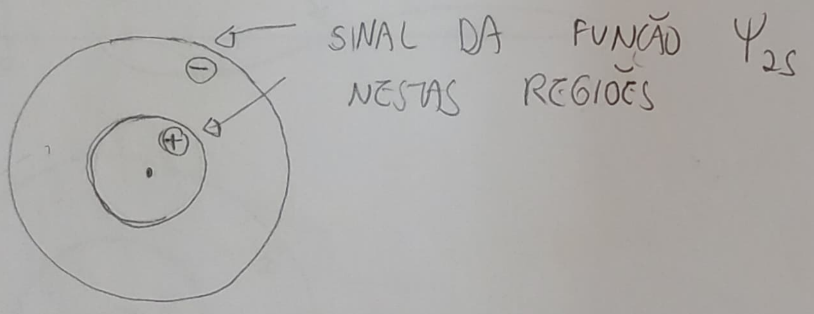
$$\Psi_{2S} = \boxed{R_{2S}}\ \boxed{Y(l=0; m_l=0)} = \boxed{\frac{1}{2\cdot 2^{1/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2-\rho)\, e^{-\rho/2}} \cdot \boxed{\frac{1}{(4\pi)^{1/2}}}$$

ONDE $\boxed{\rho = \frac{Zr}{a_0}}$



- $|\Psi_{2S}|^2 = \text{CTE}$



EX: QUAL É O VALOR DO RAIO DO NÓ RADIAL DO ORBITAL 2S?

$$R_{2S} = \Psi_{2S} = 0 = N(2-\rho)\, e^{-\rho/2} = 0$$

$\boxed{\rho = \infty}$ ⟹ NÃO É UM NÓ (A FUNÇÃO DE ONDA NÃO TROCA DE SINAL EM $r \to \infty$)

↓

$\boxed{r = \infty}$

OUTRA POSSIBILIDADE

$(2-\rho) = 0$ $\quad \rho = \frac{Zr}{a_0} = 2 \quad \boxed{r} = \frac{2a_0}{Z} = \boxed{2a_0}$

$\rho = 2$

$\boxed{3S}$

$$\Psi_{3S} = \boxed{R_{3S}}\ \boxed{Y(l=0;m_l=0)} = \boxed{\frac{2}{81\cdot 3^{1/2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}(27-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}}\ \boxed{\frac{1}{(4\pi)^{1/2}}}$$

$$\boxed{\rho = \frac{Zr}{a_0}}$$

EX: NÓS

$$2\rho^2 - 18\rho + 27 = 0$$

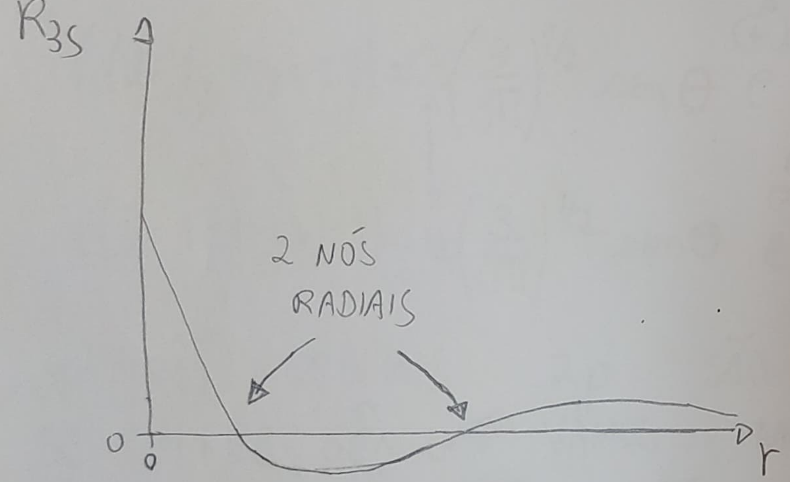
$$\Delta = 18^2 - 4\cdot 2\cdot 27 = 108$$

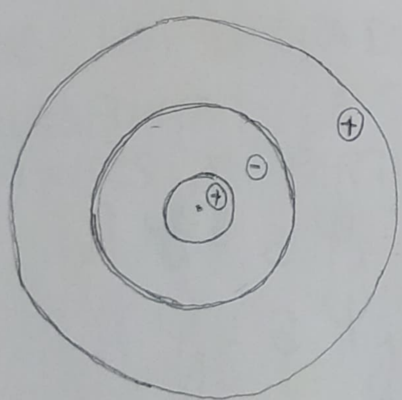
$$\rho = \frac{18 \pm 10{,}4}{4}$$

$\rho_1 = 7{,}1$ $\boxed{r_1 = 7{,}1\ a_0}$

$\rho_2 = 1{,}9$ $\boxed{r_2 = 1{,}9\ a_0}$

IGNORAR





ORBITAIS DO TIPO p

FUNÇÕES ~~IMAGINÁRIAS~~ COMPLEXAS E FUNÇÕES REAIS

- AS FUNÇÕES DO TIPO p QUE SURGEM COMO SOLUÇÃO DO ÁTOMO DO HIDROGÊNIO SÃO FUNÇÕES REAIS E COMPLEXAS:

$$\boxed{R_{2p} = \frac{1}{2 \cdot 6^{1/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2}}$$

PARA ORBITAIS p:

$$\boxed{m_\ell = -1, 0, 1}$$

$$\boxed{\rho = \frac{Zr}{a_0}}$$

HÁ 3 ORBITAIS p PARA UM DADO n

$$Y(\ell = 1; m_\ell = 0) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$$

$$Y(\ell = 1; m_\ell = +1) = - \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta \, e^{+i\phi}$$

$$Y(\ell = 1; m_\ell = -1) = + \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta \, e^{-i\phi}$$

$$\psi_{2p_0} = R_{2p} Y(\ell = 1; m_\ell = 0)$$

$$\psi_{2p_{+1}} = R_{2p} Y(\ell = 1; m_\ell = +1)$$

$$\psi_{2p_{-1}} = R_{2p} Y(\ell = 1; m_\ell = -1)$$

- OS TRÊS ORBITAIS 2p SÃO DEGENERADOS NO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO. VAMOS MOSTRAR QUE QUALQUER COMBINAÇÃO LINEAR DE AUTOFUNÇÕES DEGENERADAS DE UM OPERADOR $\hat{H}$ TAMBÉM VAI SER UMA AUTOFUNÇÃO DE $\hat{H}$ COM MESMO AUTOVALOR QUE AS FUNÇÕES DE PARTIDA:

$$\hat{H} \psi_i = a \psi_i$$

$$\hat{H} \psi_j = a \psi_j$$

VAMOS PROPOR UMA COMBINAÇÃO LINEAR GENÉRICA:

$$\psi = c_1 \psi_i + c_2 \psi_j$$

c_1 E c_2: CONSTANTES ARBITRÁRIAS

ENTÃO, COMO $\hat{H}$ É UM OPERADOR LINEAR:

$$\hat{H} \psi = c_1 \hat{H} \psi_i + c_2 \hat{H} \psi_j = c_1 a \psi_i + c_2 a \psi_j = a \underbrace{(c_1 \psi_i + c_2 \psi_j)}_{\psi}$$

- DESTA FORMA, PODEMOS COMBINAR AS FUNÇÕES DE ONDA IMAGINÁRIAS PARA OBTER FUNÇÕES DE ONDA REAIS:

$$\begin{cases} \psi_{px} = -\frac{1}{2^{1/2}}(p_{+1} - p_{-1}) = -\frac{R_{2p}}{2^{1/2}}(Y_{+1} - Y_{-1}) \\ \psi_{py} = -\frac{1}{i\,2^{1/2}}(p_{+1} + p_{-1}) = -\frac{R_{2p}}{i\,2^{1/2}}(Y_{+1} + Y_{-1}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_{+1} - Y_{-1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta\,(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \\ Y_{+1} + Y_{-1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta\,(e^{i\phi} - e^{-i\phi}) \end{cases}$$

- MAS $\left(e^{-i\phi} = (e^{i\phi})^*\right)$:

$$e^{i\phi} = \cos\phi + i\operatorname{sen}\phi$$

$$e^{-i\phi} = \cos\phi - i\operatorname{sen}\phi$$

- ENTÃO:

$$\begin{cases} e^{i\phi} + e^{-i\phi} = \cos\phi + \cancel{i\operatorname{sen}\phi} + \cos\phi - \cancel{i\operatorname{sen}\phi} = 2\cos\phi \\ e^{i\phi} - e^{-i\phi} = \cancel{\cos\phi} + i\operatorname{sen}\phi - \cancel{\cos\phi} + i\operatorname{sen}\phi = 2i\operatorname{sen}\phi \end{cases}$$

- DESTA FORMA:

$$\begin{cases} Y_{+1} - Y_{-1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta \cdot 2\cos\phi \\ Y_{+1} + Y_{-1} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta \cdot 2i\operatorname{sen}\phi \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_{px} = +\frac{R_{2p}}{2^{1/2}}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta \cdot 2\cos\phi = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho \cdot \operatorname{sen}\theta\cos\phi\, e^{-\rho/2} \\ \psi_{py} = +\frac{R_{2p}}{\cancel{i}\,2^{1/2}}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\theta \cdot 2\cancel{i}\operatorname{sen}\phi = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho\operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\phi\, e^{-\rho/2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Psi_{px} = \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \cdot \boxed{r \,\text{sen}\,\theta \cos\phi}\, e^{-\rho/2} = N x e^{-\rho/2} \\ \Psi_{py} = \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \cdot \boxed{r \,\text{sen}\,\theta \,\text{sen}\,\phi}\, e^{-\rho/2} = N y e^{-\rho/2} \end{cases}$$

POIS

$x = r \,\text{sen}\,\theta \cos\phi$

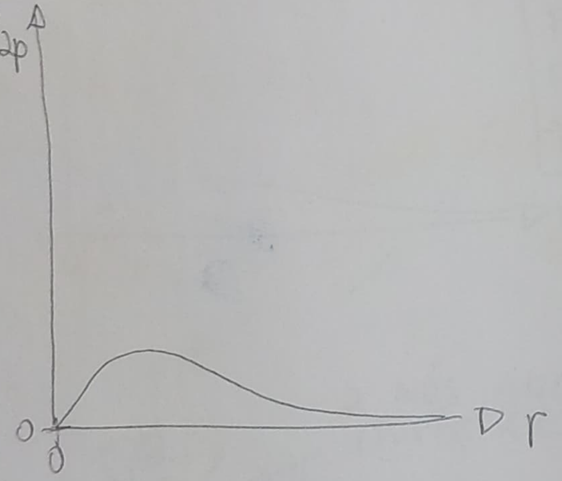
$y = r \,\text{sen}\,\theta \,\text{sen}\,\phi$

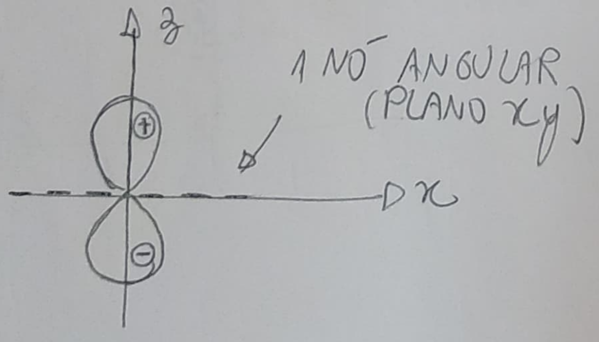
- ALÉM DISTO:

$$\Psi_{p_0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \boxed{r\cos\theta}\, e^{-\rho/2} = N z e^{-\rho/2} = \Psi_{p_z}$$

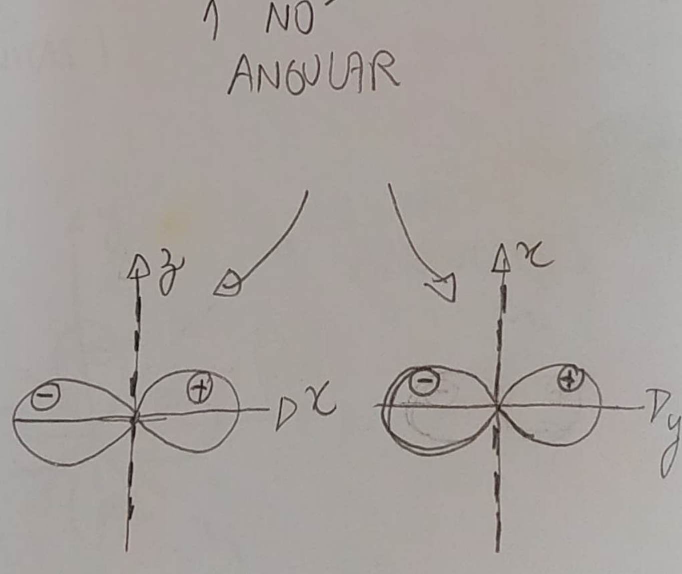
POIS $z = r\cos\theta$

$\boxed{2p}$



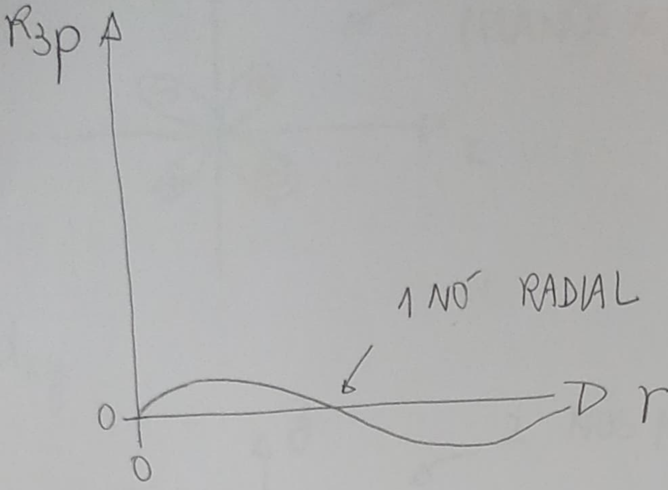


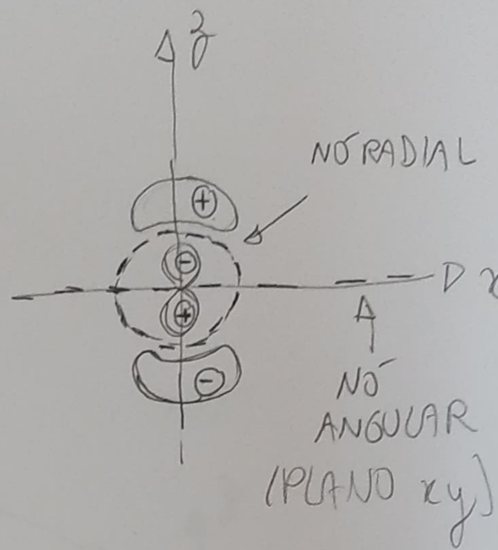
$2p_z$



$2p_x$

3p





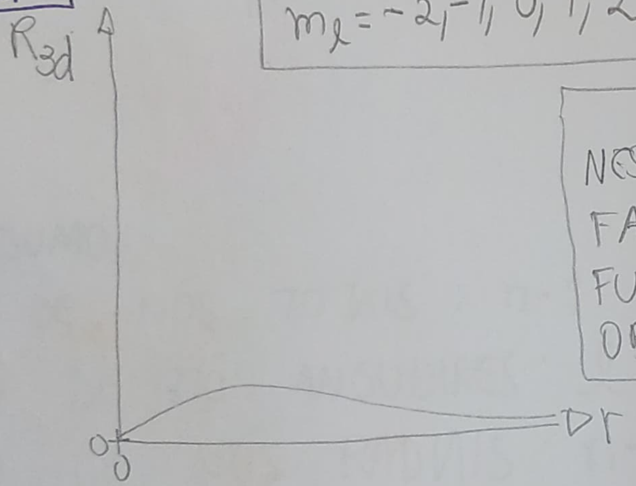
ORBITAIS DO TIPO d

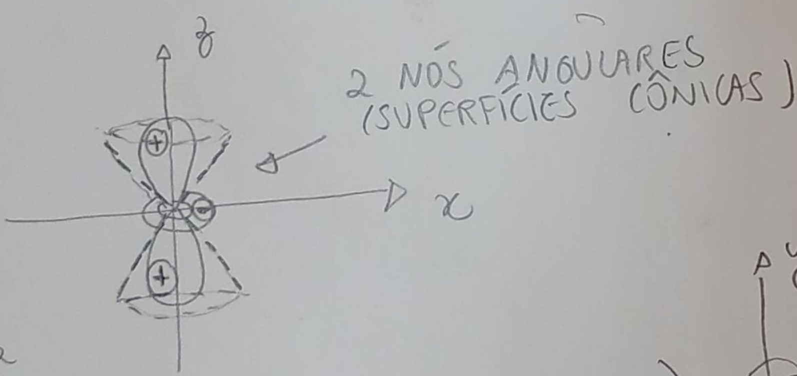
3d

NESTE CASO:

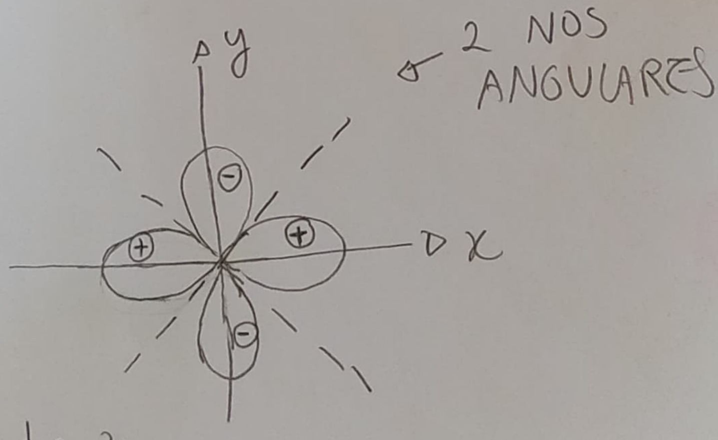
$\boxed{m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2}$ → HÁ 5 ORBITAIS d, PARA UM DADO n

NESTE CASO, TAMBÉM PODEMOS FAZER COMBINAÇÕES DAS FUNÇÕES IMAGINÁRIAS PARA OBTER FUNÇÕES REAIS



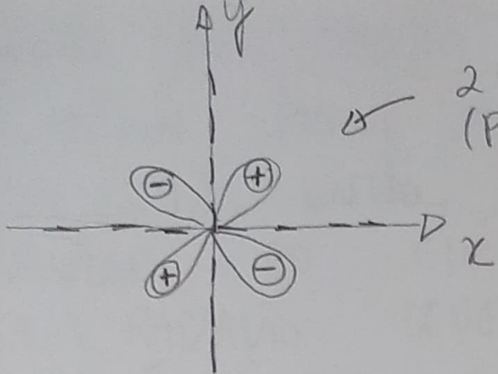


$3d_{z^2}$



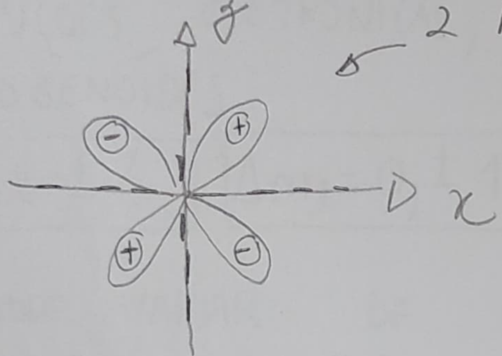
$3d_{x^2-y^2}$

2 NÓS ANGULARES
(PLANOS xz E yz)

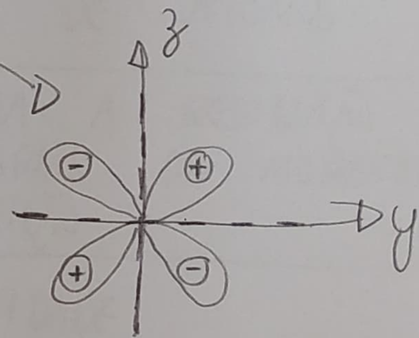


$3d_{xy}$

2 NÓS ANGULARES



$3d_{xz}$



$3d_{yz}$

RESUMO:

Nº DE NÓS TOTAIS : $n-1$

Nº DE NÓS ANGULARES : l

Nº DE NÓS RADIAIS : $n-l-1$

REGRAS DE SELEÇÃO DO ESPECTRO ELETRÔNICO

- O FÓTON POSSUI MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO DE SPIN (S=1). ENTÃO, A MUDANÇA NO MOMENTO ANGULAR DO ELÉTRON EM UMA TRANSIÇÃO VIA RADIAÇÃO DEVE COMPENSAR O MOMENTO ANGULAR DO FÓTON EMITIDO OU ABSORVIDO. ASSIM, TEMOS AS SEGUINTES REGRAS DE SELEÇÃO PARA TRANSIÇÕES ELETRÔNICAS, VIA RADIAÇÃO, DE ÁTOMOS HIDROGENÓIDES:

$\boxed{\Delta l = \pm 1}$ $\boxed{\Delta m_l = 0, \pm 1}$ ← OBTIDAS VIA A RESOLUÇÃO DAS INTEGRAIS DO MOMENTO DE TRANSIÇÃO

- n PODE VARIAR DE QUALQUER QUANTIDADE

EX: $\Delta n = \pm 1$ SOMENTE

$1s(0) \rightarrow 2p(-1,0,1)$

$2s(0) \rightarrow 3p(-1,0,1)$

$2p(0) \rightarrow 1s(0)$, $\rightarrow 3s(0)$

$\rightarrow 3d(0), 3d(-1), 3d(1)$