



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Escola de Engenharia de Lorena – EEL

“LOM3055 - FÍSICA PARA ENGENHARIA DE MATERIAIS II”

Prof. Dr. Durval Rodrigues Junior

Departamento de Engenharia de Materiais (DEMAR)

Escola de Engenharia de Lorena (EEL)

Universidade de São Paulo (USP)

Polo Urbo-Industrial, Gleba AI-6 - Lorena, SP 12600-970

durval@demar.eel.usp.br

Rodovia Itajubá-Lorena, Km 74,5 - Caixa Postal 116
CEP 12600-970 - Lorena - SP
Fax (12) 3153-3133
Tel. (Direto) (12) 3159-5007/3153-3209

USP Lorena
www.eel.usp.br

Polo Urbo-Industrial Gleba AI-6 - Caixa Postal 116
CEP 12600-970 - Lorena - SP
Fax (12) 3153-3006
Tel. (PABX) (12) 3159-9900

UNIDADE 9 -

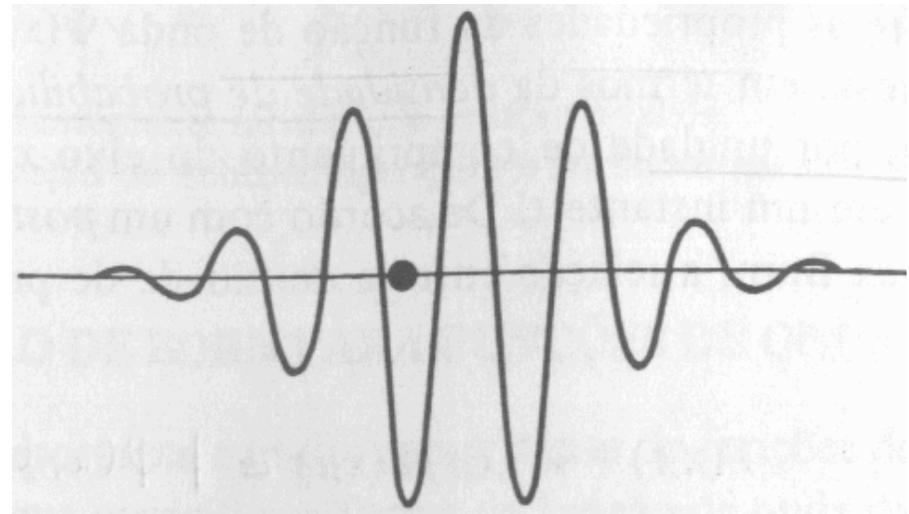
Mais Ondas de Matéria

Estados ligados

Vimos, até agora, 3 postulados da Mecânica Quântica:

- a) Toda partícula possui uma função de onda Ψ associada a ela.
- b) A forma e a evolução temporal desta Ψ é determinada pela **equação de Schrödinger**.
- c) Dada a função $\Psi(x,t)$, a densidade de probabilidade da partícula ser encontrada em um ponto x , num dado instante t , é dada por:

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$



A Equação de Schrödinger e a Quantização de Energia

Quando a relação entre a **energia total** de uma partícula e sua **energia potencial** é tal que *classicamente a partícula estaria confinada* a uma região limitada do espaço, pois senão a energia cinética excederia a energia total fora da região, a teoria de Schrödinger prevê que a **energia total da partícula é quantizada**.

Quando a partícula *não estiver confinada* em uma região limitada, então a teoria prevê que *a sua energia total pode apresentar qualquer valor*.

Elétron confinado

O **confinamento** de uma onda leva à **quantização**, ou seja, à existência de **estados discretos**, com **energias discretas**.

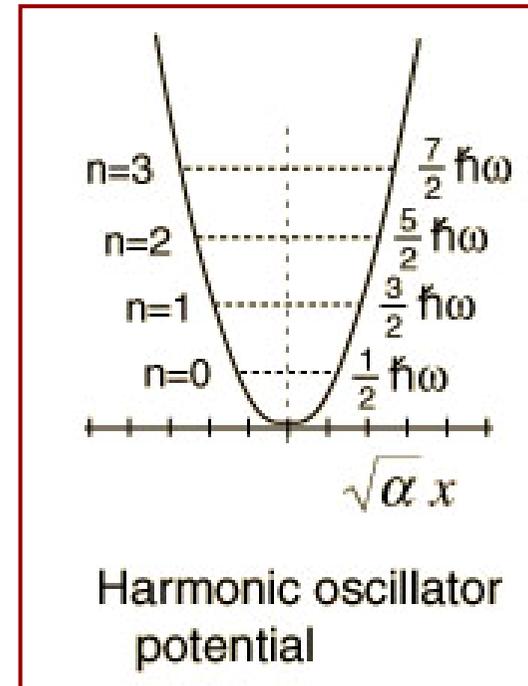
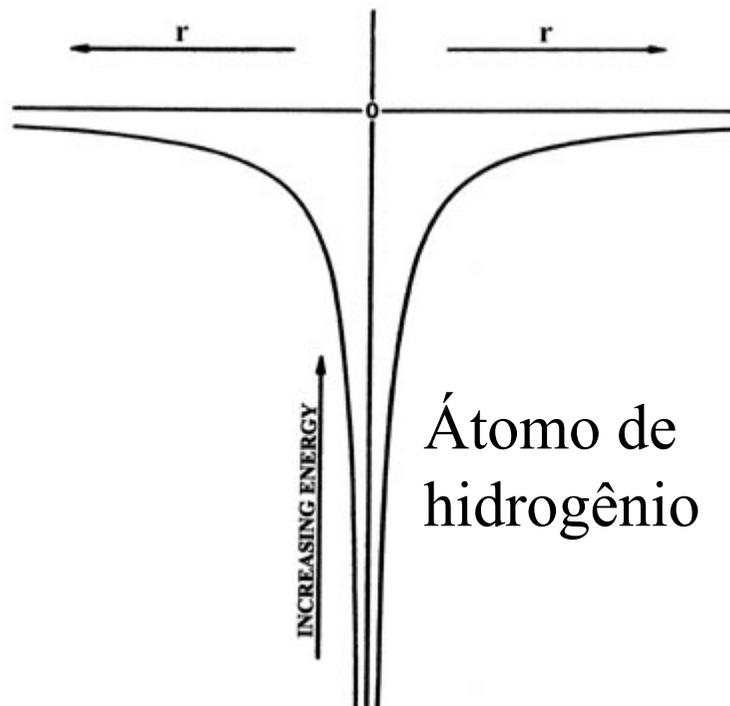
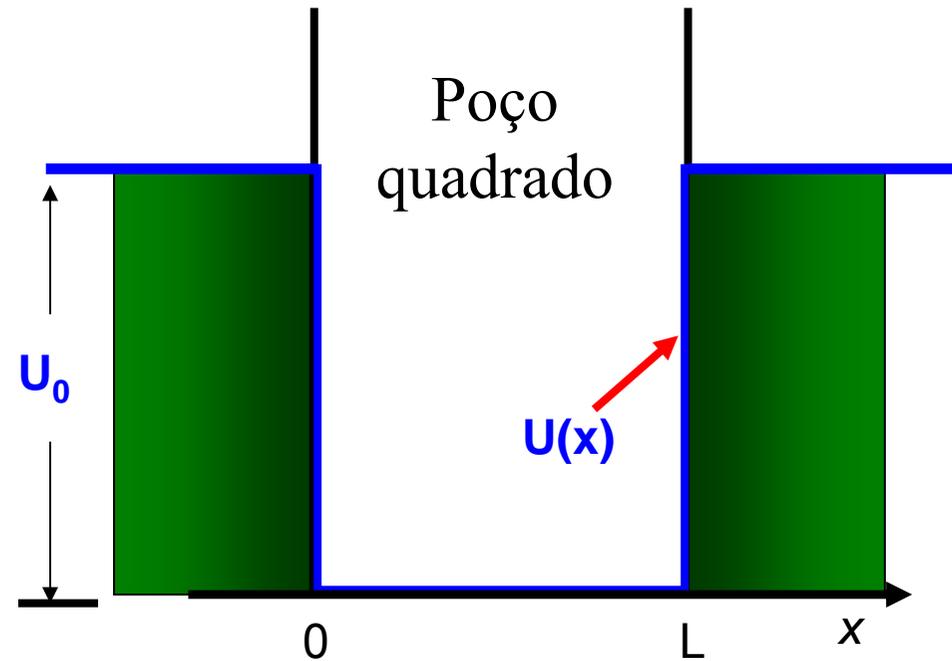
Analogia:

Ondas estacionárias em uma corda  estados estacionários

Exemplos: Armadilhas em 1, 2 e 3 dimensões;

Átomos

Exemplos de potenciais diversos:



Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

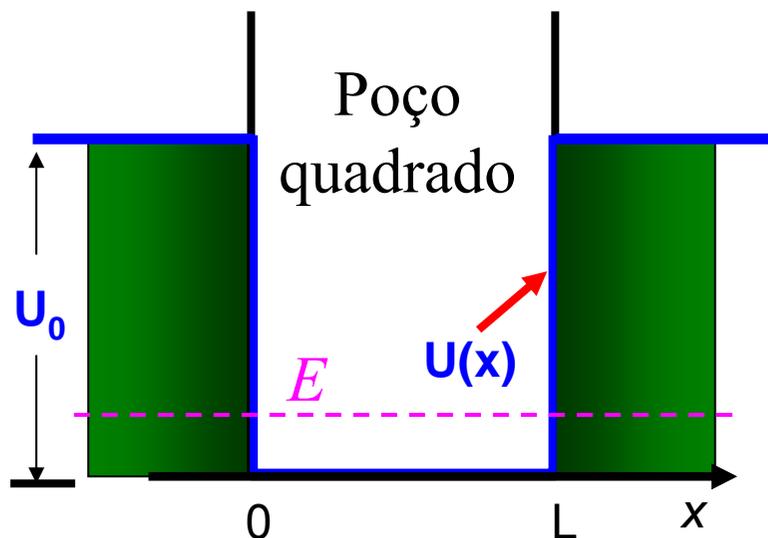
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Sempre que $E - V(\vec{r}) < 0$ teremos estados ligados;
que são quantizados.

$$\text{ou } E < V(\vec{r})$$

Partícula confinada em um poço quadrado

Na região em que $E - U(x) < 0$ ou $E < U(x)$ a função de onda $\Psi(x)$ deve tender a zero, pois a probabilidade de encontrar a partícula nesta região é muito pequena. Esta imposição faz com que tenhamos um conjunto discreto $\Psi_n(x)$, de soluções para a **equação de Schrödinger**, cada uma delas associadas a uma energia E_n (similar aos modos normais em uma corda clássica):



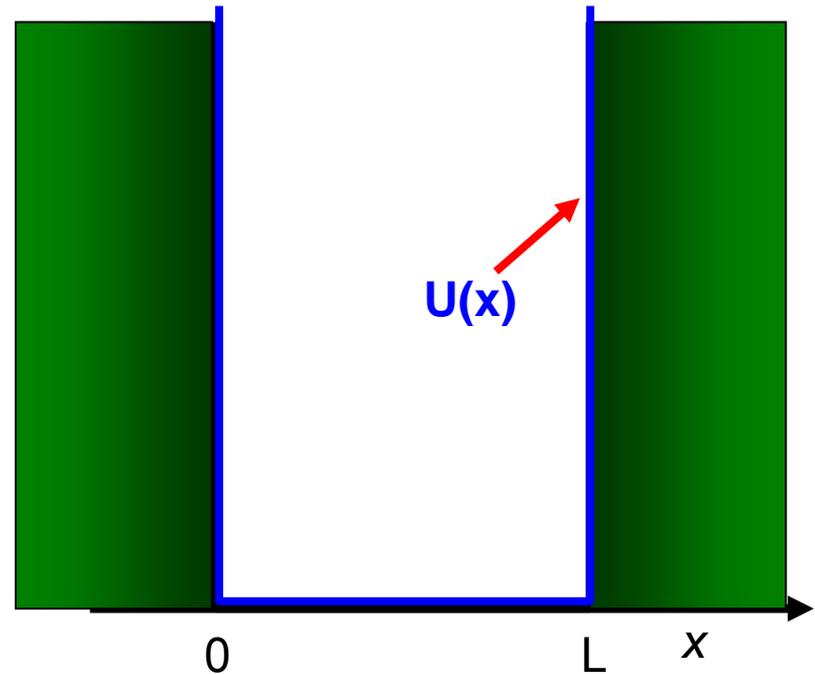
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

Partícula em uma Caixa

Vamos resolver a eq. de Schrödinger para uma partícula confinada a uma caixa de paredes “**impenetráveis**”. Isto é, partícula sujeita a um potencial de forma:

$$U(x) = 0, \text{ para } 0 < x < L$$

$$U(x) = \infty, \text{ para } x < 0 \text{ ou } x > L$$



- Como o **potencial é infinito**, a partícula deve encontrar-se rigorosamente no interior da caixa, portanto devemos ter $\Psi(x) = 0$, para $x = 0$ e $x = L$ (*condição de contorno*).

No interior da caixa, temos:

$$\text{ou} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A solução geral desta eq. pode ser escrita como:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

A condição de contorno $\psi(0) = 0$ leva à: $\psi(x) = A \sin kx$

A condição de contorno $\psi(L) = 0$ leva à:

$$\psi(L) = A \sin kL = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi \quad \Rightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Escrita em termos dos comprimentos de onda:

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = n \frac{\pi}{L} \quad \rightarrow \quad L = n \frac{\lambda_n}{2} \quad \left(L = \frac{\lambda_n}{2}, 2 \frac{\lambda_n}{2}, 3 \frac{\lambda_n}{2}, 4 \frac{\lambda_n}{2}, 5 \frac{\lambda_n}{2}, \dots \right)$$

que corresponde justamente à condição de formação de ondas estacionárias.

As funções de onda serão então dadas por:

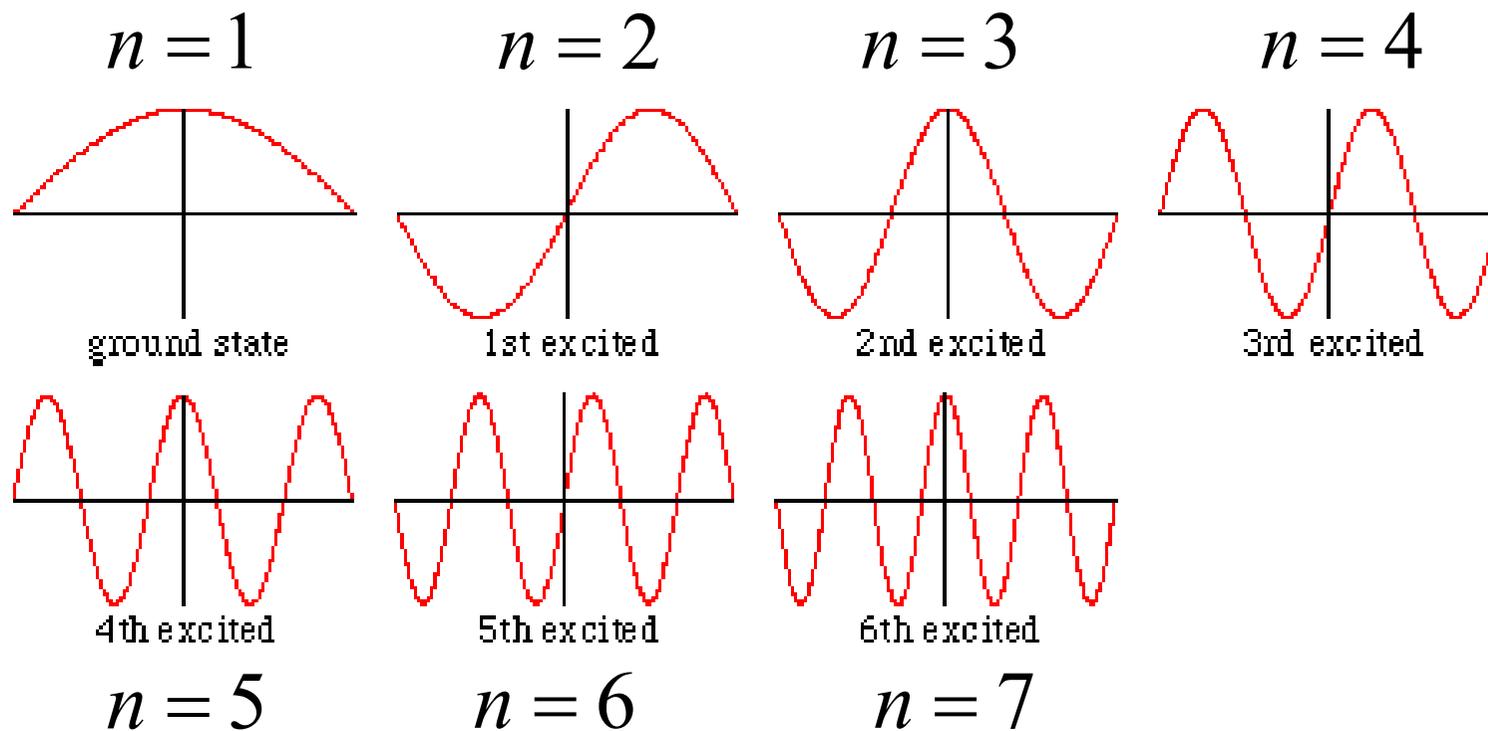
$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(k_n x) = A_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Para cada n temos uma $\psi_n(x)$; onde n é um *número quântico*.

Como temos um *sistema unidimensional*, $\psi(x)$ é completamente determinada por *apenas um número quântico*.

Funções de onda

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(k_n x) = A_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



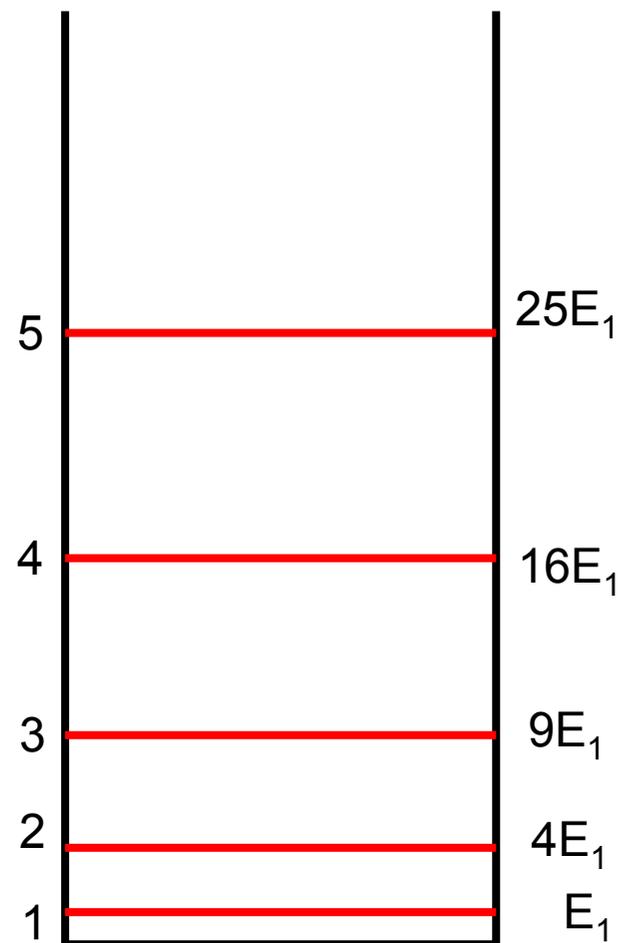
As energias associadas a estas funções são dadas por:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2$$

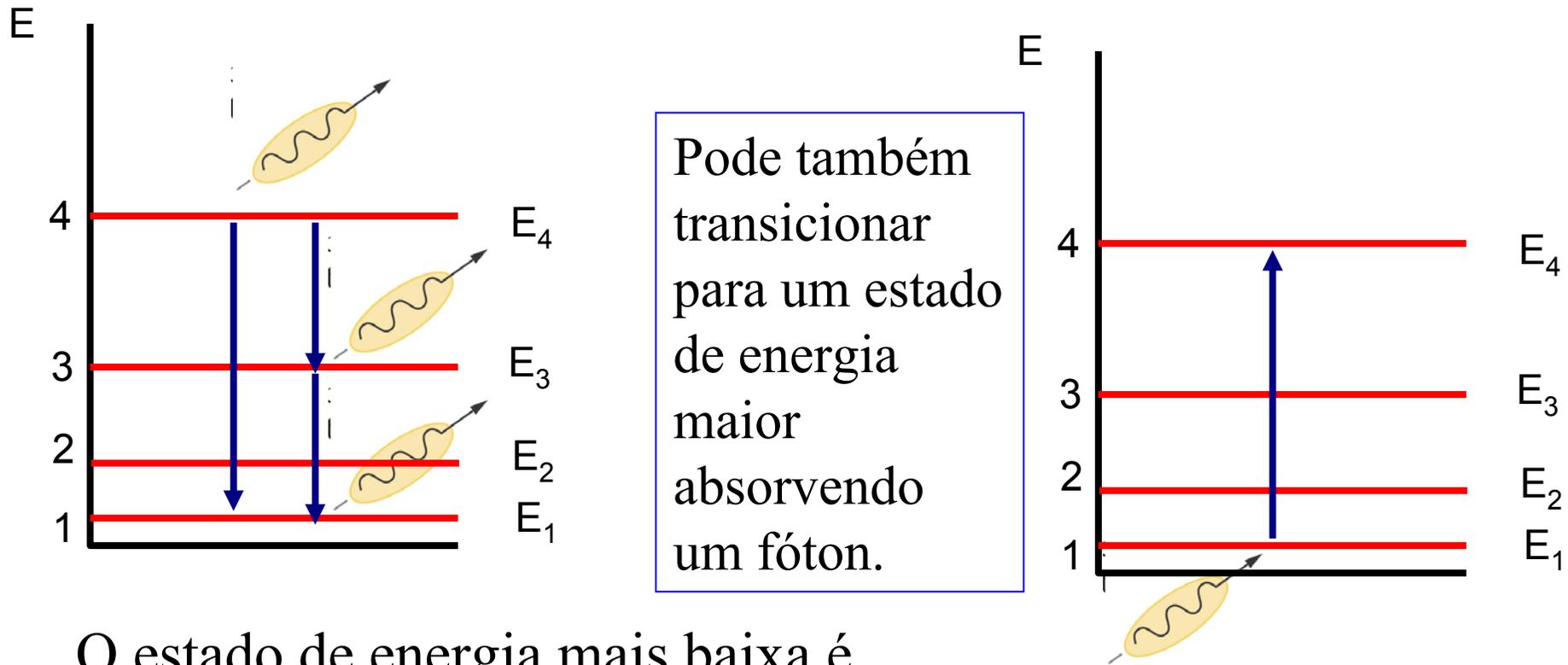
O sistema pode passar de um estado n para um n' , de energia menor, emitindo um fóton de frequência:

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$



O sistema pode passar de um estado n para um n' , de energia menor, emitindo um fóton de frequência:

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$



O estado de energia mais baixa é chamado de *estado fundamental*.

Normalização da Função de Onda

A probabilidade de encontrarmos uma partícula, descrita por $\Psi(x)$, em um ponto qualquer do espaço (com x entre $-\infty$ e $+\infty$) deve ser igual a um. Portanto, devemos ter:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$$

Esta é a condição de normalização da função de onda.

No caso de uma **partícula no interior de uma caixa**, por exemplo, obtivemos:

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(k_n x) = A_n \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

A condição de normalização é o que nos permite determinar A_n .

Devemos ter:

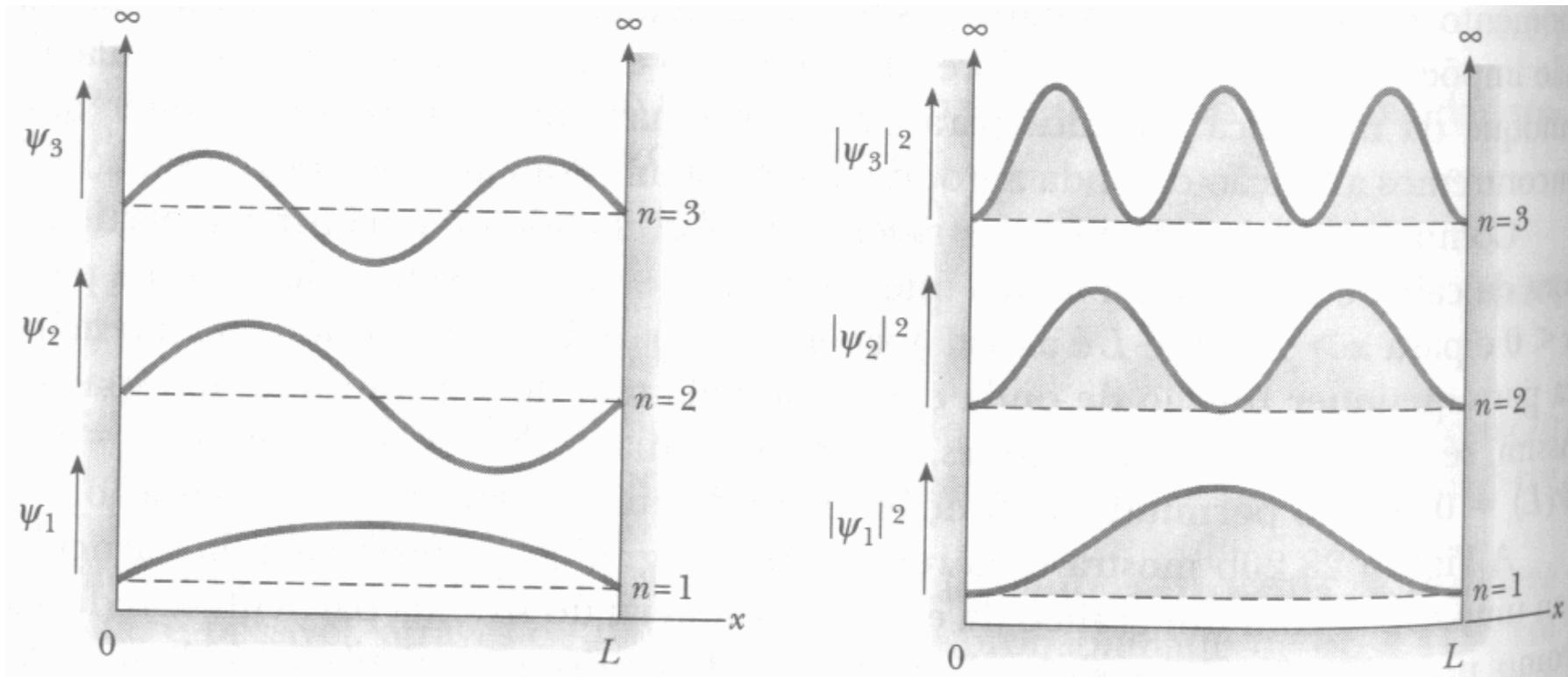
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = A_n^2 \int_0^L \left| \text{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \right|^2 dx = 1$$

Portanto, temos:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \rightarrow \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

Densidade de Probabilidade para o Potencial Infinito

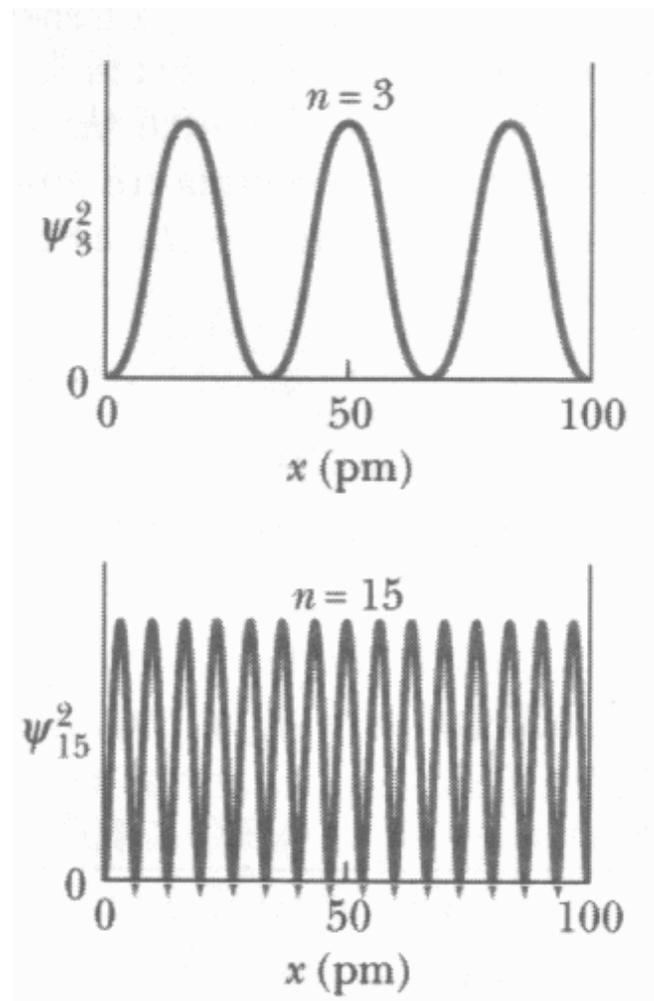
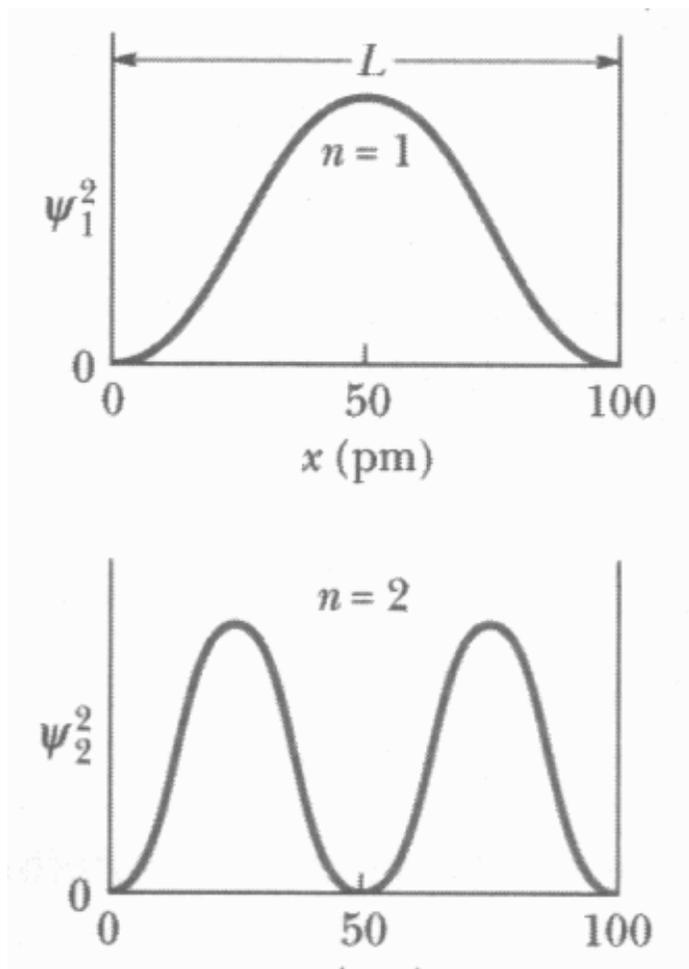
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



Poço quadrado

Princípio da Correspondência de Bohr:

No limite dos números quânticos muito elevados, os resultados da física quântica tendem para os resultados da física clássica.



Prob. 1:

(a) Achar a energia de um elétron, confinado numa caixa unidimensional, de comprimento $L = 0,1 \text{ nm}$, no seu estado fundamental. (Esta caixa tem, aproximadamente, o tamanho de um átomo.)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \qquad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

$$E_1 = \left(\frac{[6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}]^2}{8[9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}][10^{-10} \text{ m}]^2} \right) \approx \frac{4,39 \times 10^{-67}}{7,29 \times 10^{-50}}$$

$$E_1 \approx 6,02 \times 10^{-18} \text{ J} \approx 37,63 \text{ eV}$$

Prob. 1:

(b) Fazer um diagrama dos níveis de energia e achar os comprimentos de onda dos fótons emitidos em todas as transições, que principiam no estado $n = 3$, ou num estado mais baixo, e terminam em qualquer estado mais baixo.

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2$$

$$h\nu_{n \rightarrow n'} = (E_n - E_{n'}) \rightarrow \nu_{n \rightarrow n'} = \frac{E_n - E_{n'}}{h}$$

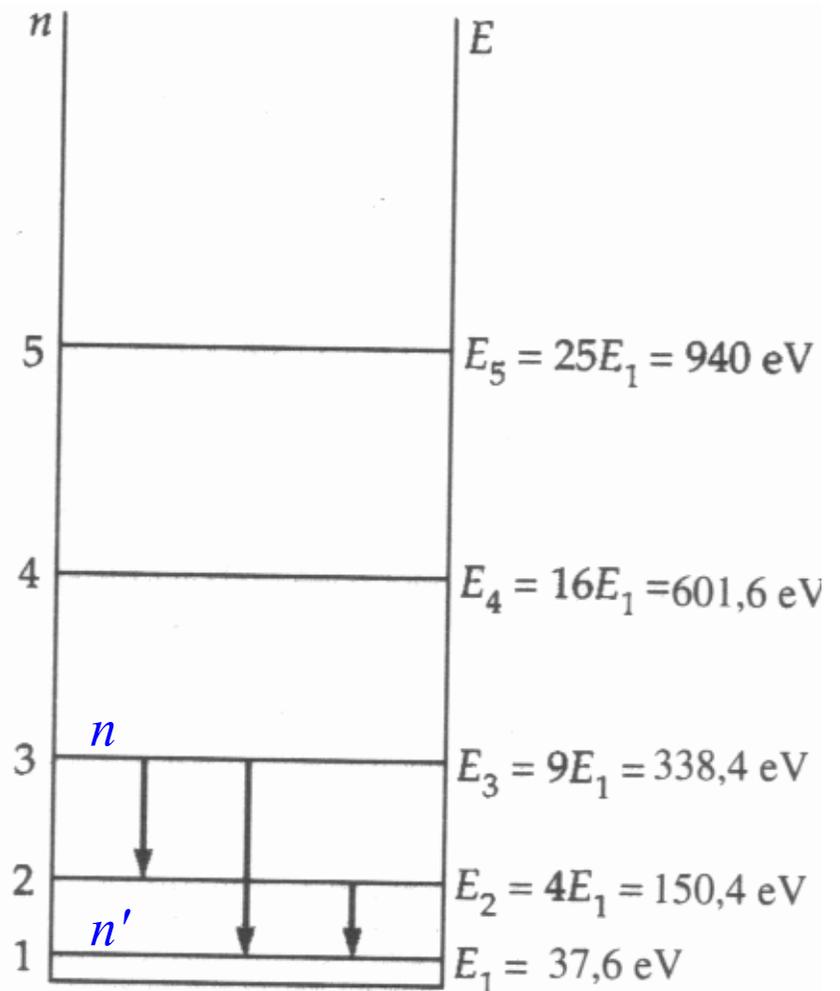
$$\frac{1}{\lambda_{n \rightarrow n'}} = \frac{E_n - E_{n'}}{hc} \rightarrow \lambda_{n \rightarrow n'} = \frac{hc}{(E_n - E_{n'})}$$

Como: $hc \approx 2 \times 10^{-25} \text{ Jm} \approx 1,24 \text{ eV}\mu\text{m}$

$$\lambda_{3 \rightarrow 1} = 1,24/(300,8) \mu\text{m} \approx 4,12 \text{ nm}$$

$$\lambda_{3 \rightarrow 2} = 1,24/(188,0) \mu\text{m} \approx 6,60 \text{ nm}$$

$$\lambda_{2 \rightarrow 1} = 1,24/(112,8) \mu\text{m} \approx 11,0 \text{ nm}$$



Energia de ponto zero

A energia do estado fundamental acontece para $n = 1$

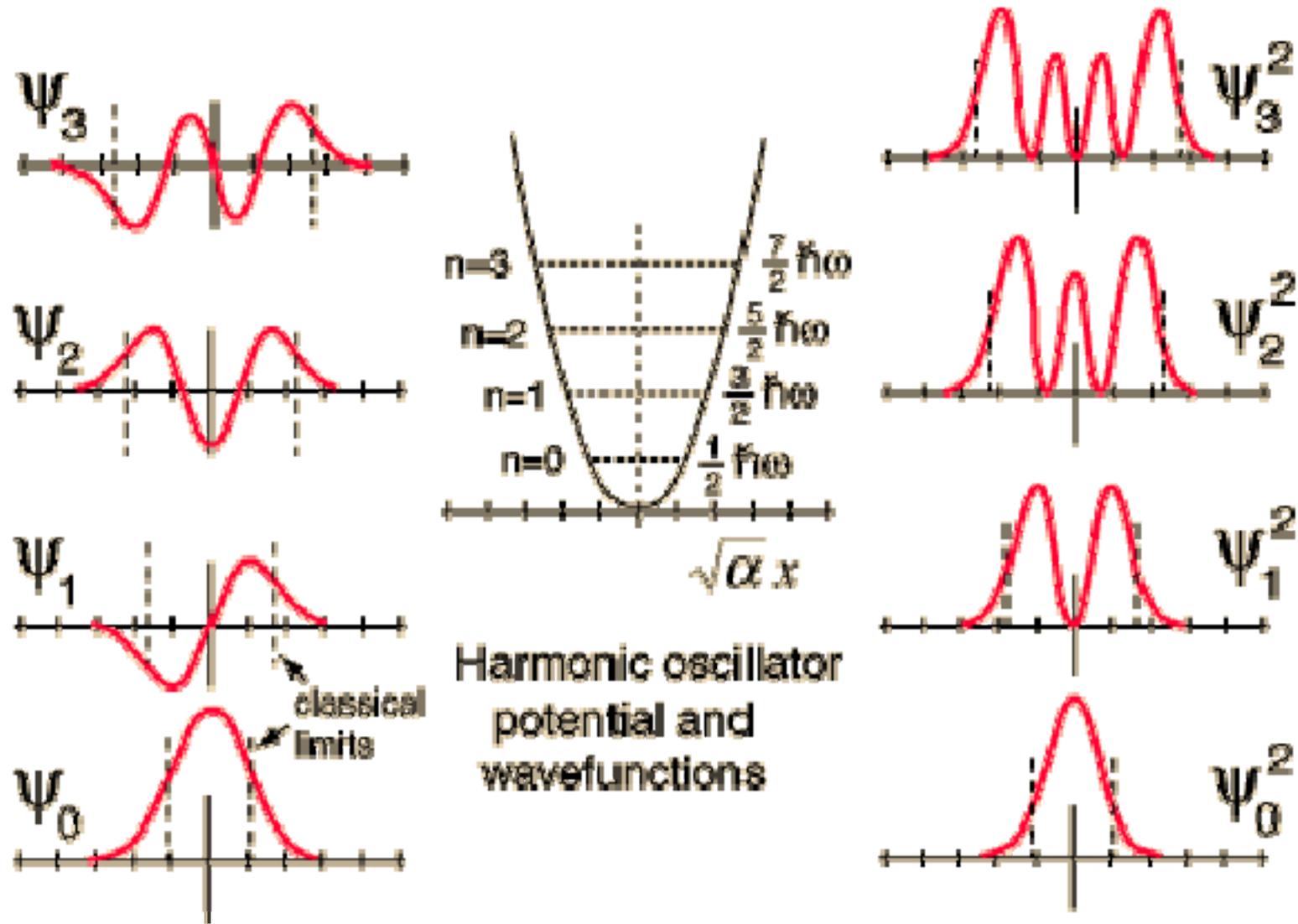
$$E_1 = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right)$$

Estados confinados não podem ter $n = 0$ pois isto daria $\Psi_n(\mathbf{x}) = 0$, ausência de elétrons no poço todo.

Sistemas confinados não podem ter energia zero, existe sempre uma energia mínima, chamada **energia de ponto zero**

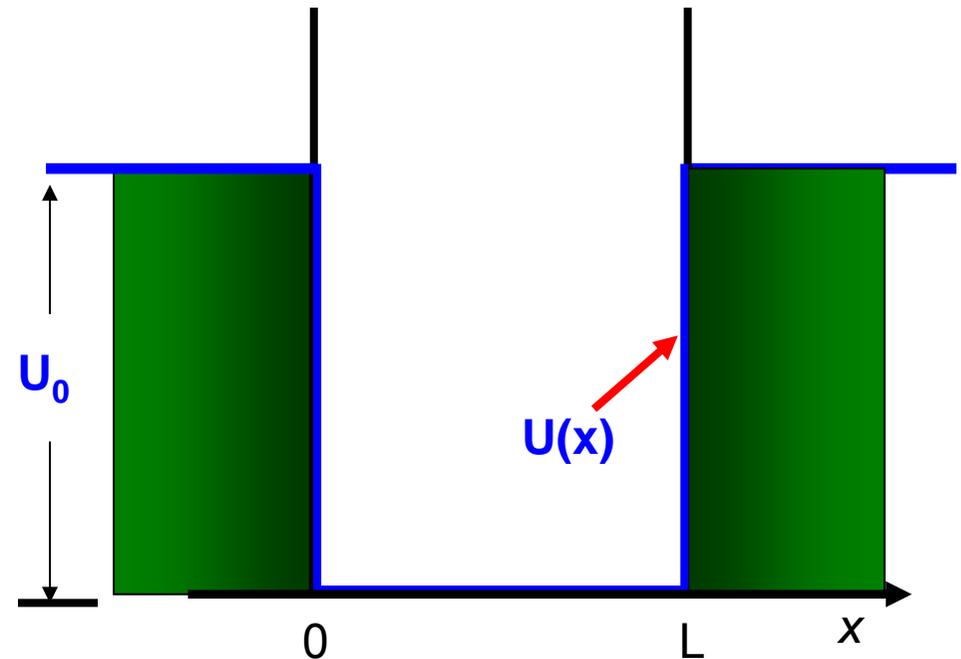
Partícula sujeita a um potencial harmônico:

Oscilador harmônico e estados coerentes



Partícula em um Poço Finito

Considere agora uma partícula classicamente aprisionada em um poço de potencial, com profundidade finita U_0 :



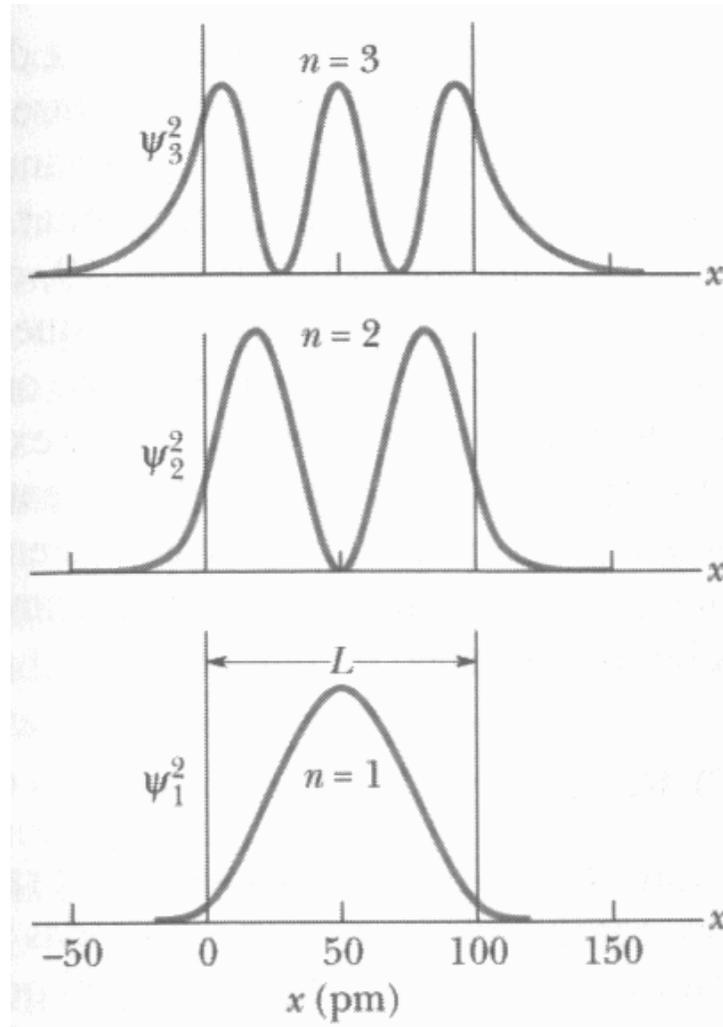
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

As funções de onda **não se anulam** mais em $x = 0$ ou $x = L$.

Partícula em um Poço Finito

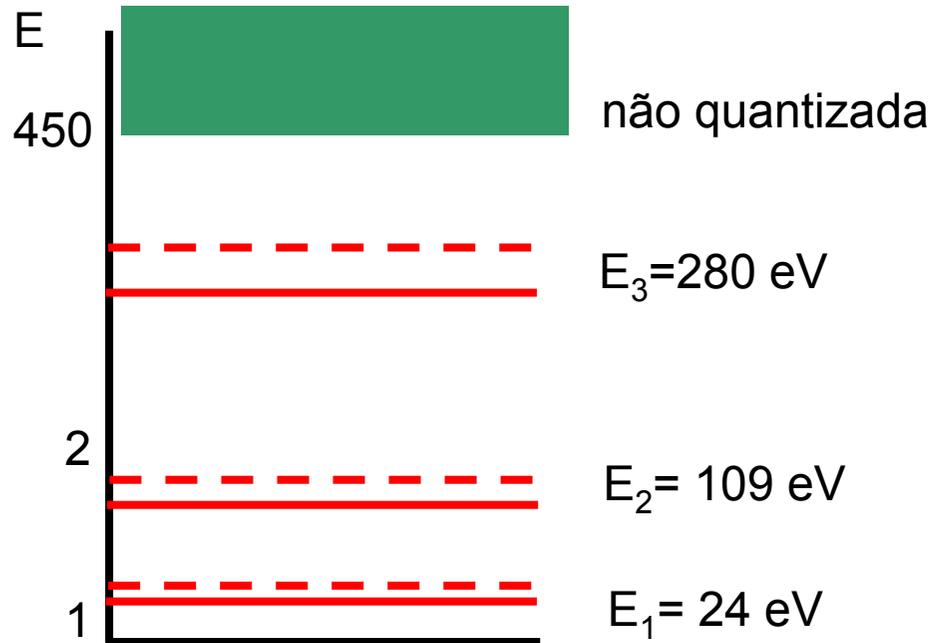
As funções de onda apresentarão a forma ao lado.

Terão energias um pouco menores que para U_0 infinito.



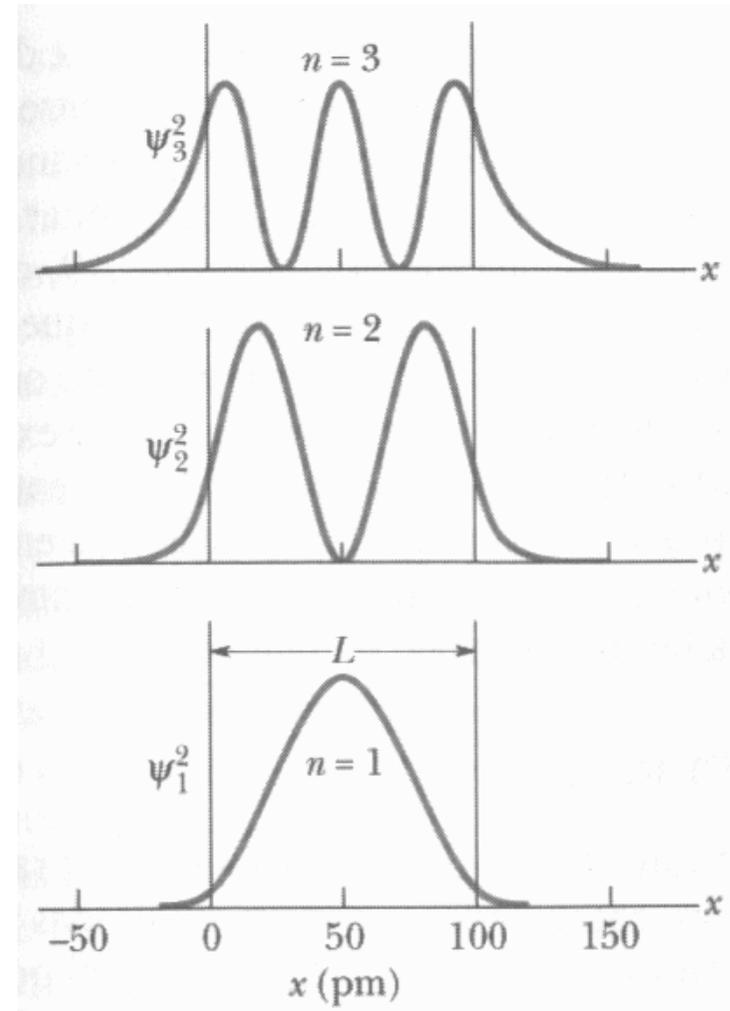
- **Várias formas de poços são construídas em laboratório, para se estudar propriedades quânticas da matéria.**

Partícula em um Poço Finito



Energias em um poço
com $L = 100 \text{ pm}$ e
 $U_0 = 450 \text{ eV}$.

(linhas tracejadas:
Poço Infinito)



Existem aplicações de poços finitos?

Poços Quânticos (QW)

Poços quânticos foram primeiro apresentados (1970) pelos físicos L. Esaki e R. Tsu.

Usando técnicas como MBE ou MOCVD podemos produzir heteroestruturas de cristais $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ -GaAs que se comportam como poços quânticos (QW)

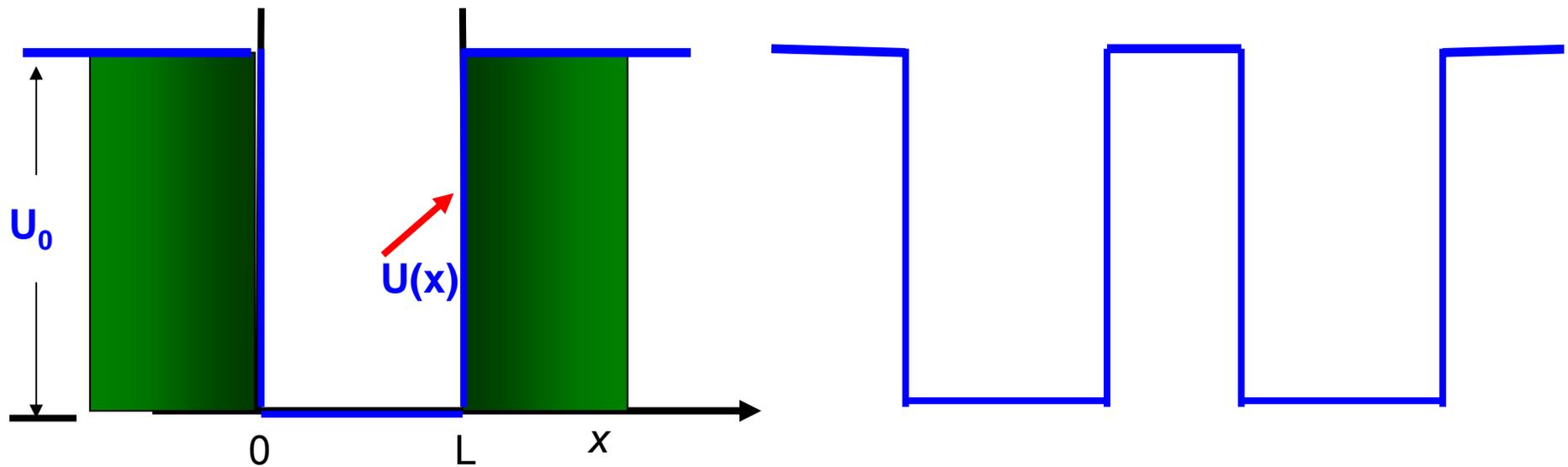
MBE (Molecular Beam Epitaxy) ou **MOCVD** (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) produzem nanoestruturas, depositando camadas de espessura em escala atômica (controle de monocamada).

$\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}-\text{GaAs}$



Aplicações QW: laser
para leitores de CD e DVD

QW duplo



Equação de Schrödinger em 3D

A generalização da eq. de Schrödinger de uma para três dimensões é direta:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + [E - V(x, y, z)] \psi = 0$$

Caixa Retangular

Se tivermos uma caixa retangular com potenciais infinitos, a solução da eq. de Schrödinger, no interior da caixa, pode ser escrita como:

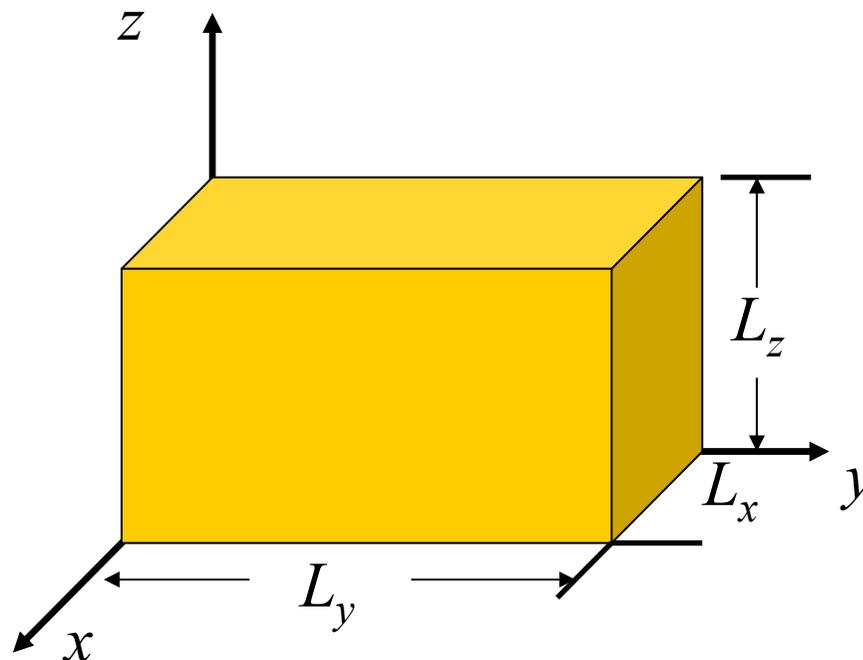
$$\psi_n(x, y, z) = A \text{sen}(k_1 x) \text{sen}(k_2 y) \text{sen}(k_3 z)$$

As condições de contorno :

$$k_1 = n_1 \frac{\pi}{L_x}$$

$$k_2 = n_2 \frac{\pi}{L_y}$$

$$k_3 = n_3 \frac{\pi}{L_z}$$



Assim, temos como solução:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = A \operatorname{sen}\left(n_1 \frac{\pi x}{L_x}\right) \operatorname{sen}\left(n_2 \frac{\pi y}{L_y}\right) \operatorname{sen}\left(n_3 \frac{\pi z}{L_z}\right)$$

Observe que agora temos um sistema tridimensional e portanto são necessários três números quânticos para definir cada estado: ψ_{n_1, n_2, n_3}

O níveis de energia serão então dados por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

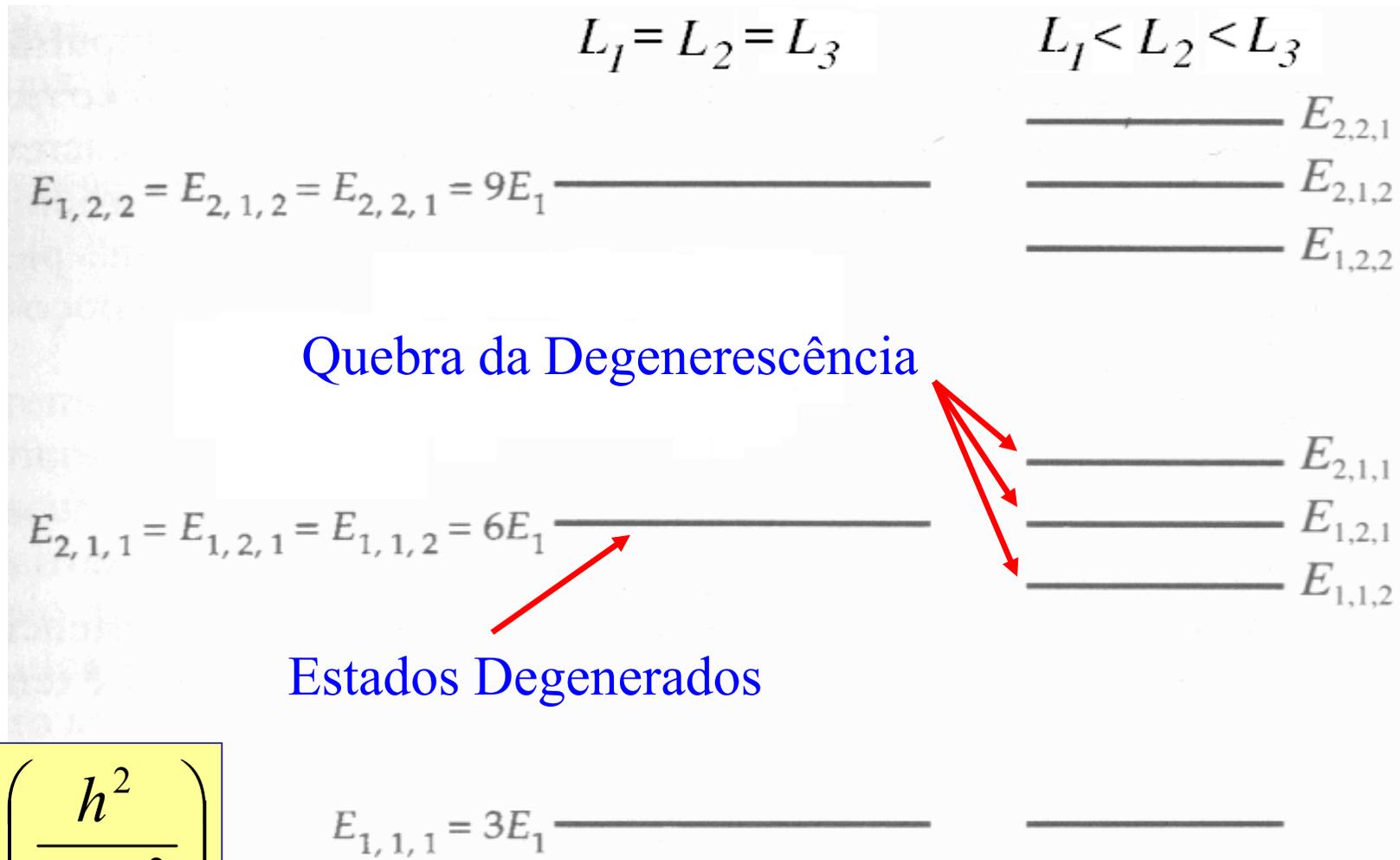
$$k_i = \frac{n_i \pi}{L_i}$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{L_x} + \frac{n_2^2}{L_y} + \frac{n_3^2}{L_z} \right)$$

Se: $L_x = L_y = L_z = L$:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

O níveis de energia são então dados por:



$$E_1 \equiv \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right)$$

Prob. 2

Um elétron de massa m está confinado em uma caixa cúbica de dimensões $L_x = L_y = L_z = L$. **a)** Quantas frequências diferentes o elétron é capaz de emitir, ou absorver, ao sofrer uma transição entre dois níveis que estejam entre os tres de menor energia? Que múltiplo de $h/8mL^2$ corresponde **(b)** à menor, e **(c)** à maior frequência?

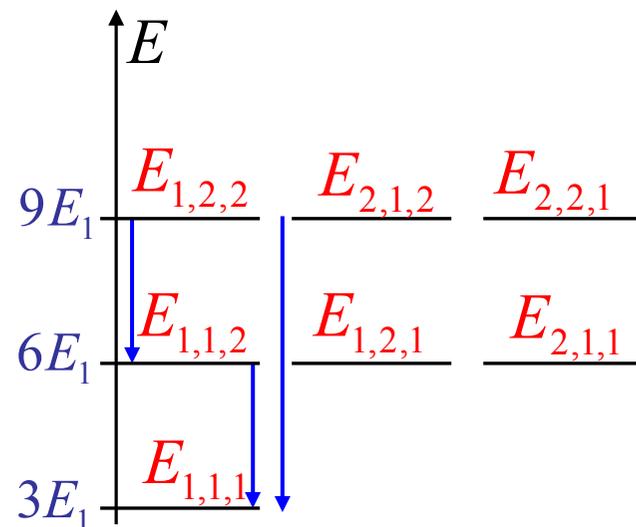
$$E_{n_1, n_2, n_3} = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \Rightarrow \frac{E_{n_1, n_2, n_3}}{E_1} = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad \boxed{E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}}$$

$$h\nu_{i \rightarrow f} = |E_f - E_i| \quad ; \quad \frac{\nu_{i \rightarrow f}}{(h/8mL^2)} = \frac{|E_f - E_i|}{(h^2/8mL^2)} = |\Delta(n_{1 \rightarrow 1'}^2 + n_{2 \rightarrow 2'}^2 + n_{3 \rightarrow 3'}^2)|$$

a) 3 frequências: Ver Figura

$$\mathbf{b)} \quad \frac{\nu_{\min}}{(h/8mL^2)} = \frac{6E_1 - 3E_1}{E_1} = \frac{9E_1 - 6E_1}{E_1} = 3$$

$$\mathbf{c)} \quad \frac{\nu_{\max}}{(h/8mL^2)} = \frac{9E_1 - 3E_1}{E_1} = 6$$



Outras Armadilhas

- Pontos Quânticos (0-D)
- Fios Quânticos (1-D)
- Gás de elétrons em 2-D
- Currais

Pontos Quânticos

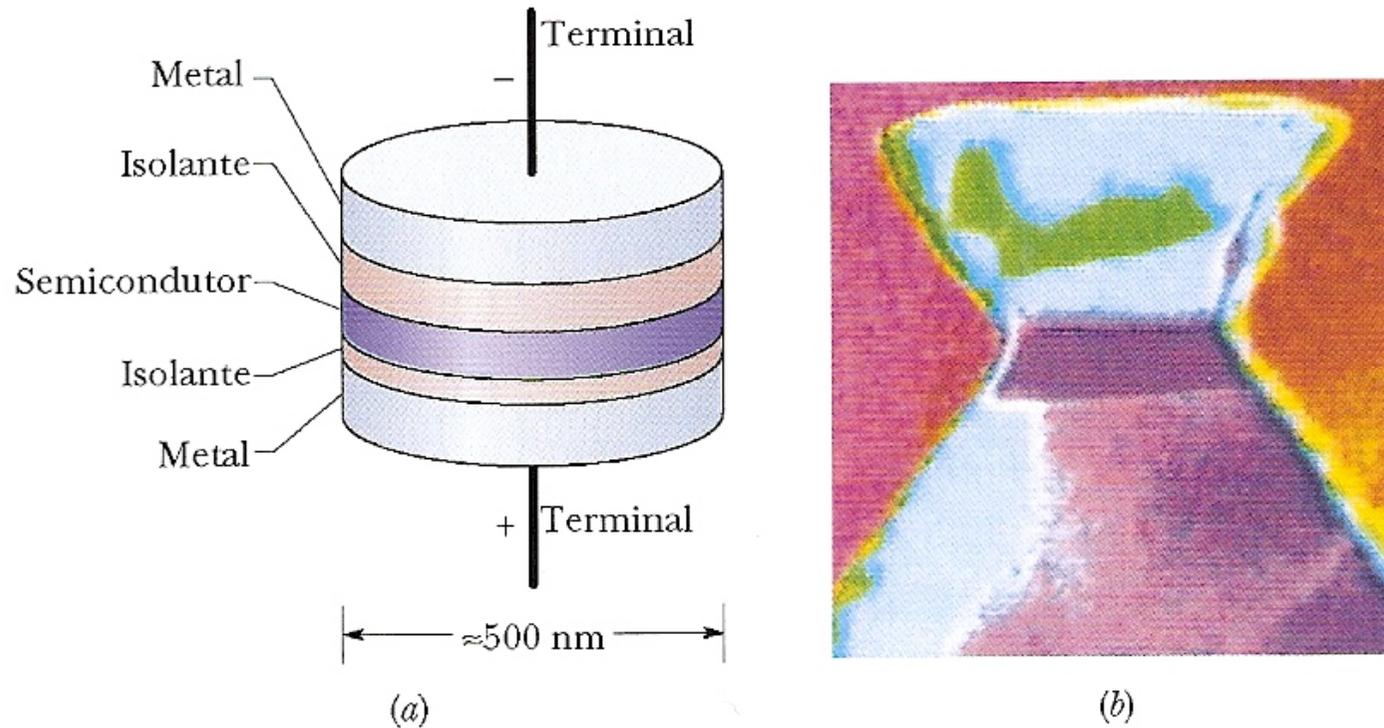
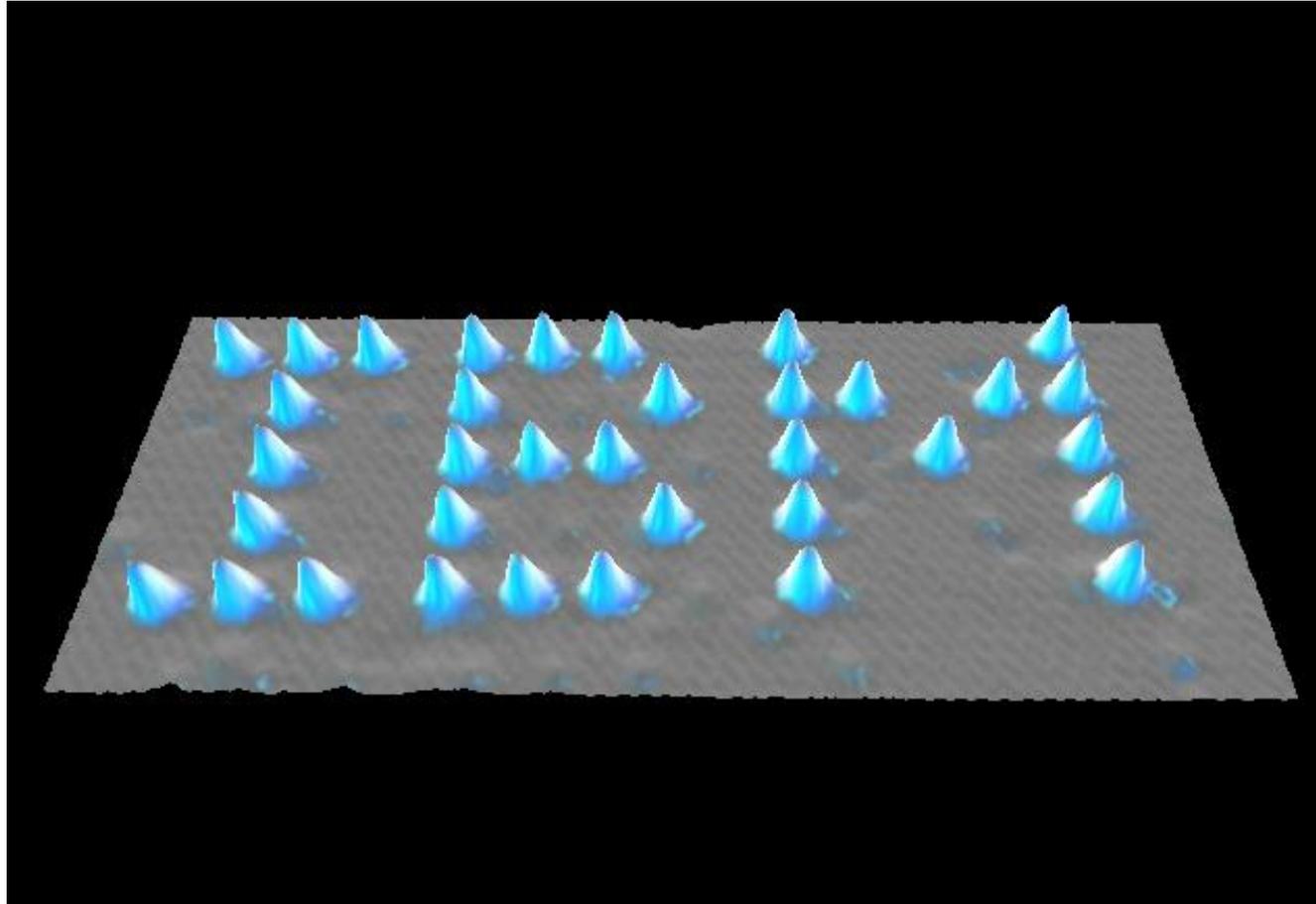


Fig. 39-11 Um ponto quântico ou “átomo artificial”. (a) A camada semicondutora central forma um poço de energia potencial no qual o elétron é confinado. A camada isolante de baixo é suficientemente estreita para permitir que elétrons sejam introduzidos ou retirados da camada central por tunelamento quando uma tensão apropriada é aplicada aos terminais do dispositivo. (b) Fotografia de um ponto quântico real. A faixa central é a região onde os elétrons são confinados.

Microscópio de Tunelamento (STM)

Como tudo começou (1985)...

Manipulação de átomos



35 átomos de Xenônio em superfície de Ni (D. Eigler et al, IBM)

Manipulando átomos

Esquema do STM

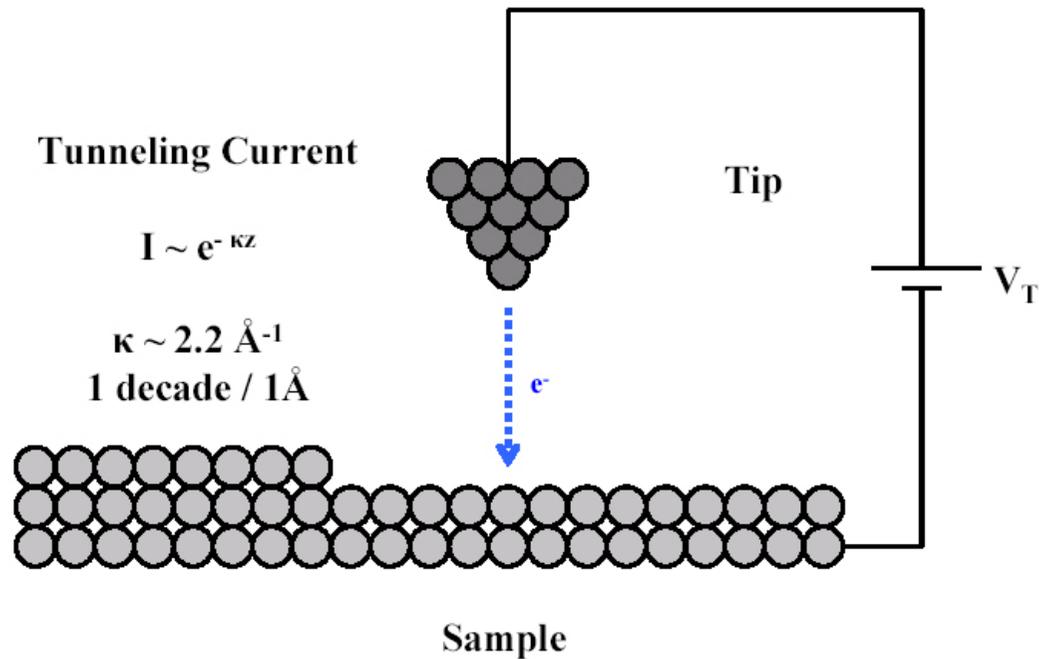
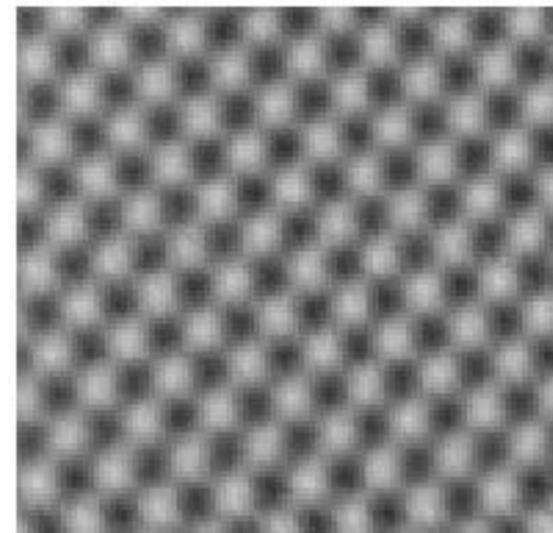
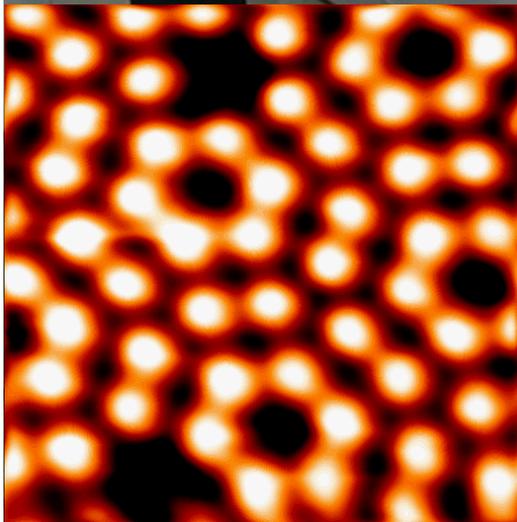


Imagem STM de Ag(001)

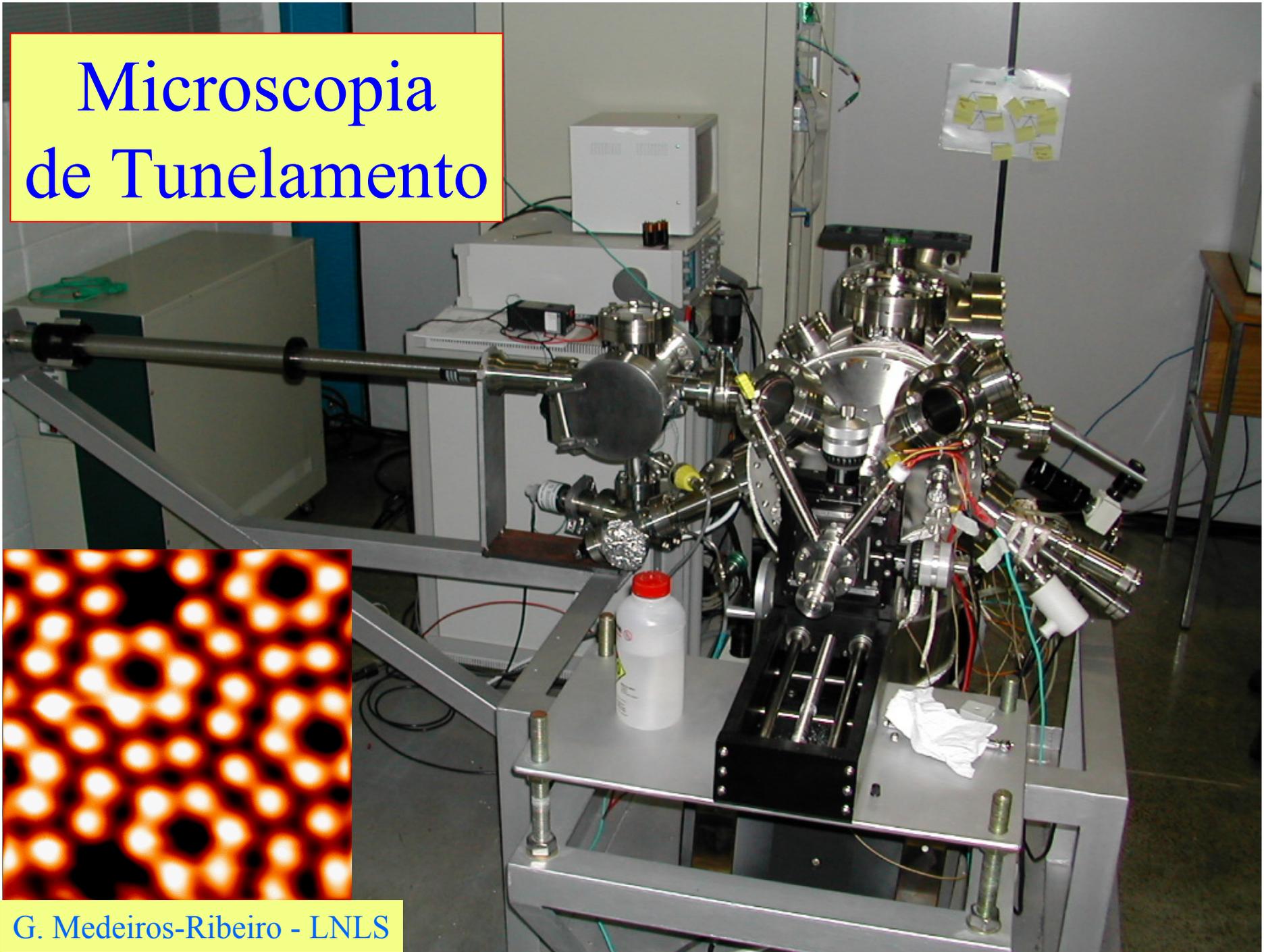


1 nm

Microscopia de Tunelamento

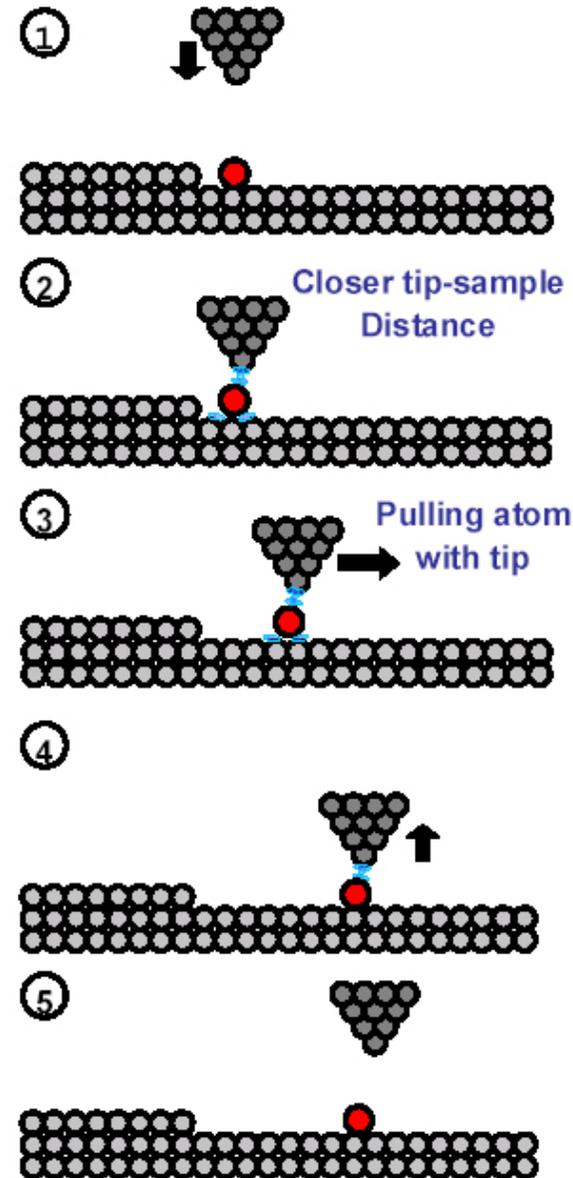


G. Medeiros-Ribeiro - LNLS



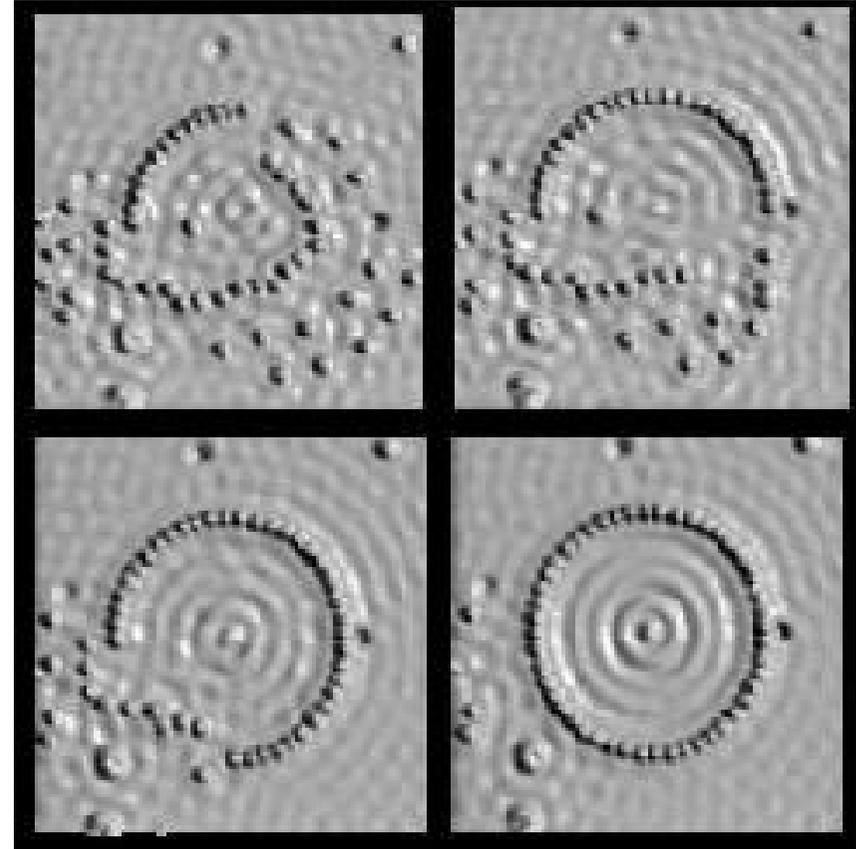
Manipulando átomos com STM

- 1- STM identifica átomo
- 2- com a ponta próxima seleciona o átomo
- 3- com a ponta próxima movimentada o átomo
- 4-5 libera o átomo na posição desejada

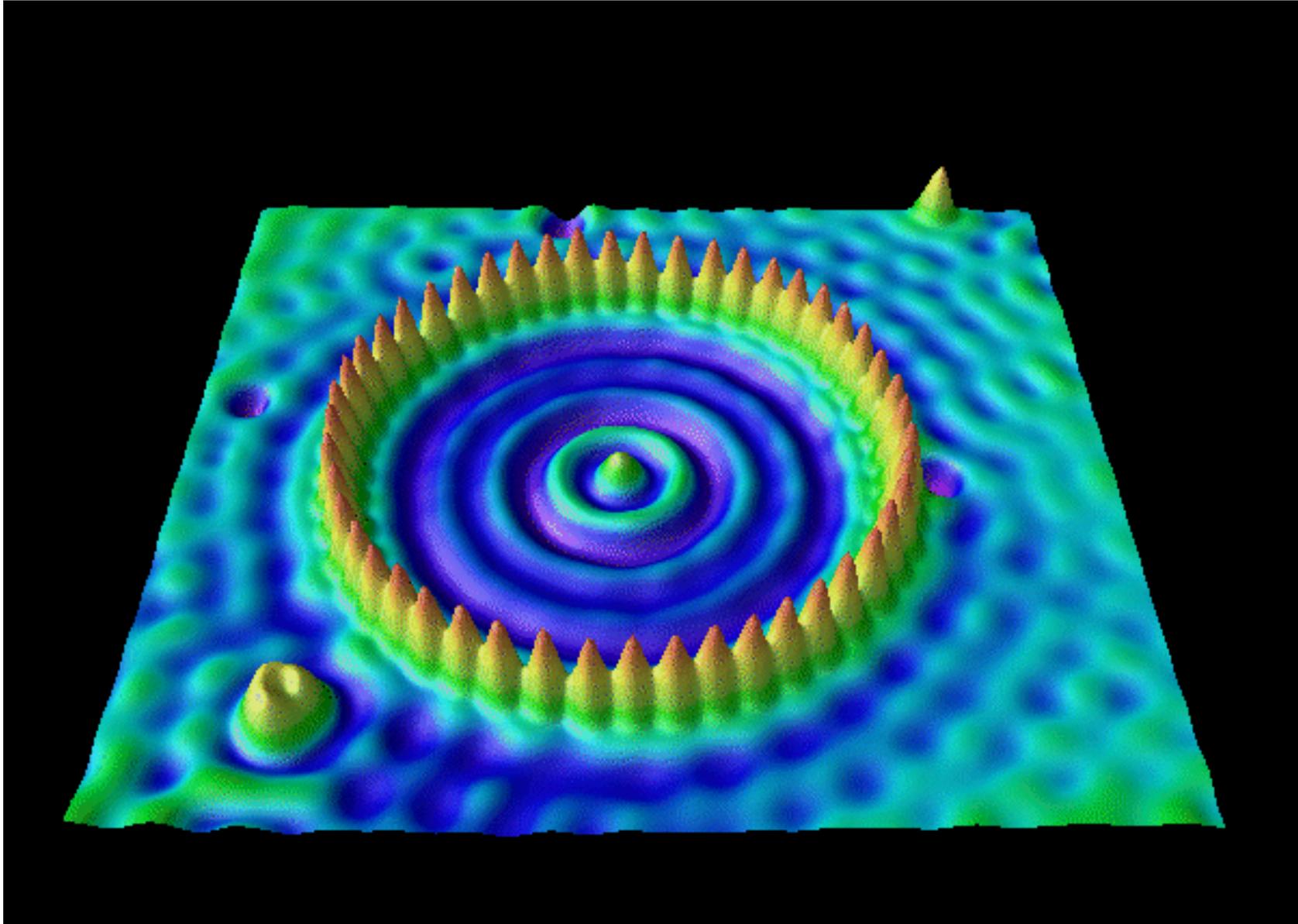


Currais Quânticos

- Superfície de Cu(111)
- Átomos de Fe são depositados (physisorbed)
- A ponta do STM é aproximada de um Fe a TC aumentada
- Átomo de Fe é levado até posição
- Atomo liberado abaixando a TC.

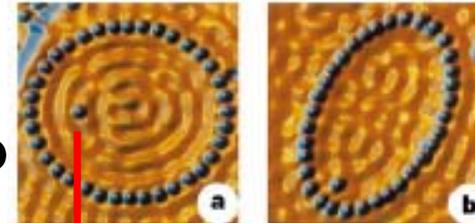


Curral de 48 átomos de Fe



Miragem quântica

Imagem de STM com Co no foco



Resposta magnética com Co no foco

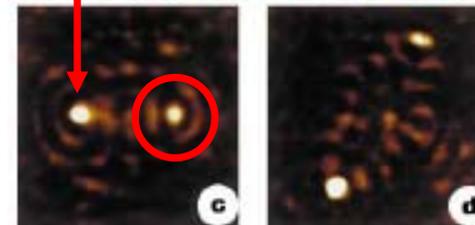
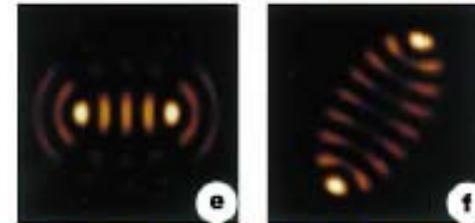
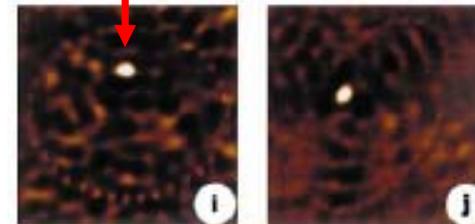
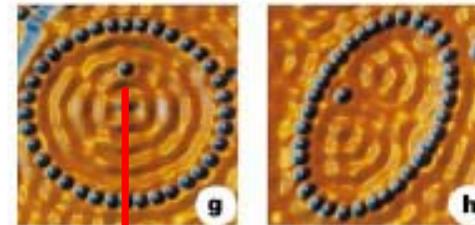


Imagem de STM com Co fora do foco



Resposta magnética com Co fora do foco



O átomo na “Antiga” Mecânica Quântica

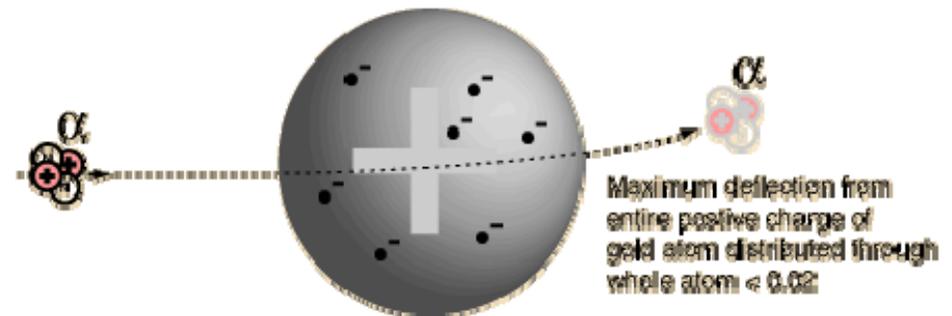
- Por volta de 1910 acumularam-se inúmeras evidências experimentais de que os átomos continham elétrons (aquelas partículas que compunham os raios catódicos e conduziam a eletricidade).

Mas os átomos eram neutros. Portanto, deviam possuir uma quantidade igual de carga positiva.

Modelo de Thomson (1910)

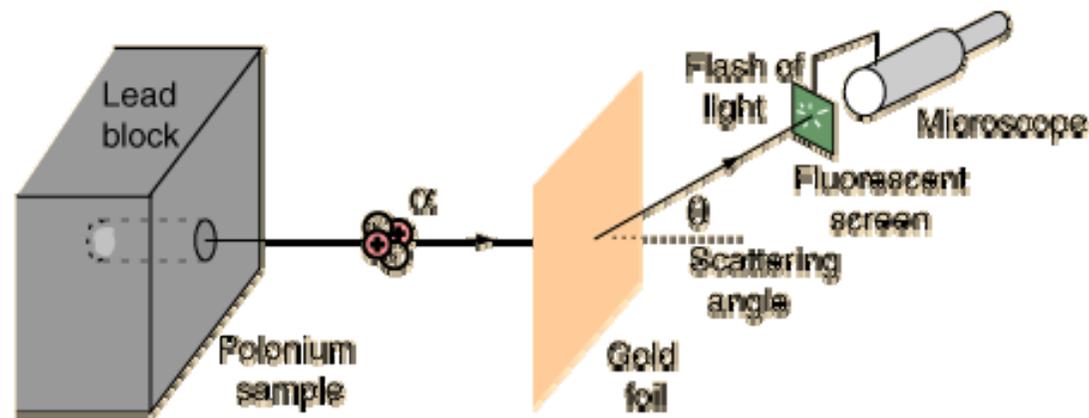
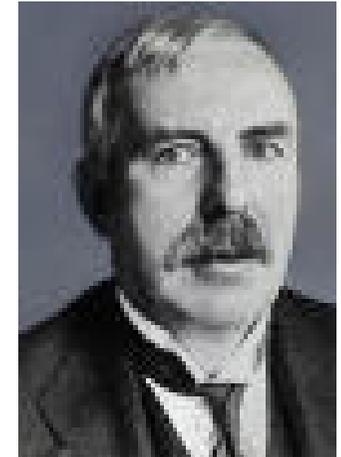
Os átomos seriam compostos por elétrons pontuais, distribuídos numa massa de carga positiva uniforme: Modelo do “*pudim de passas*”.

Modelo de Thomson: previa uma deflexão pequena das partículas α

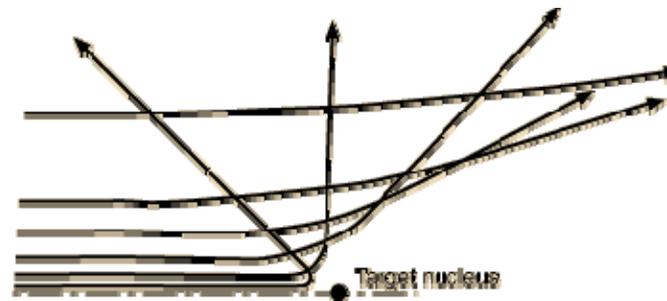


Exemplo histórico: estrutura do átomo

- Ernest Rutherford (1911): descobriu a **estrutura nuclear** do átomo. Primeiro experimento de colisão de partículas sub-atômicas.



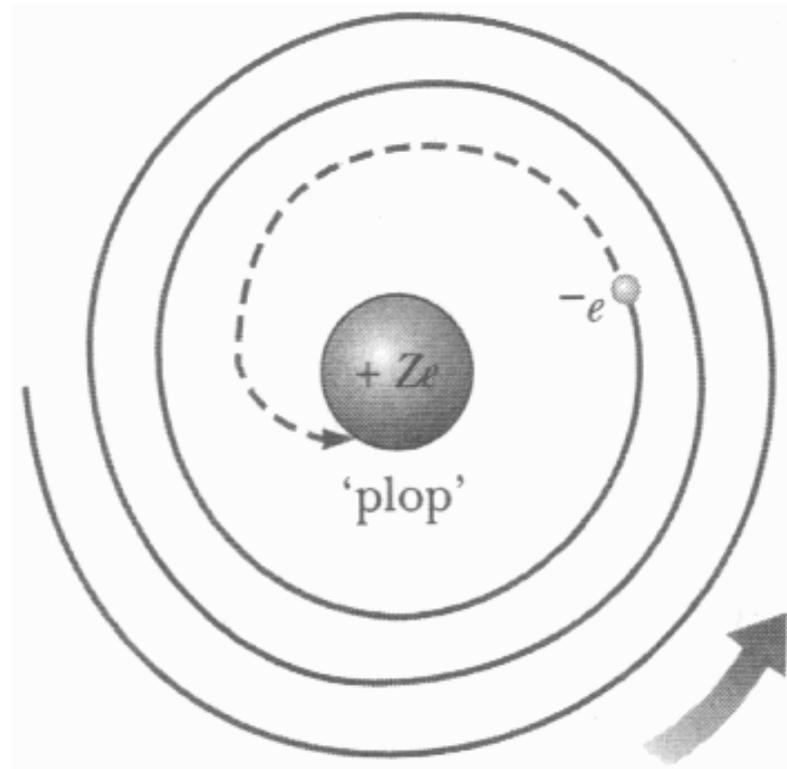
Rutherford observou grandes deflexões, sugerindo um núcleo duro e pequeno



O átomo na “Antiga” Mecânica Quântica

- Rutherford então propôs um modelo no qual toda a carga positiva dos átomos, que comportaria praticamente toda a sua massa, estaria concentrada numa pequena região do seu centro: *o núcleo*. Os elétrons, então, ficariam orbitando em torno deste núcleo: Modelo “*planetário*”.

Entretanto, estes elétrons em órbita estariam acelerados (aceleração centrípeta). Assim, **segundo o eletromagnetismo**, deveriam **emitir energia** na forma de radiação eletromagnética, até **colapsarem para o núcleo!**



O modelo atômico de Bohr (1913)

Motivação experimental:

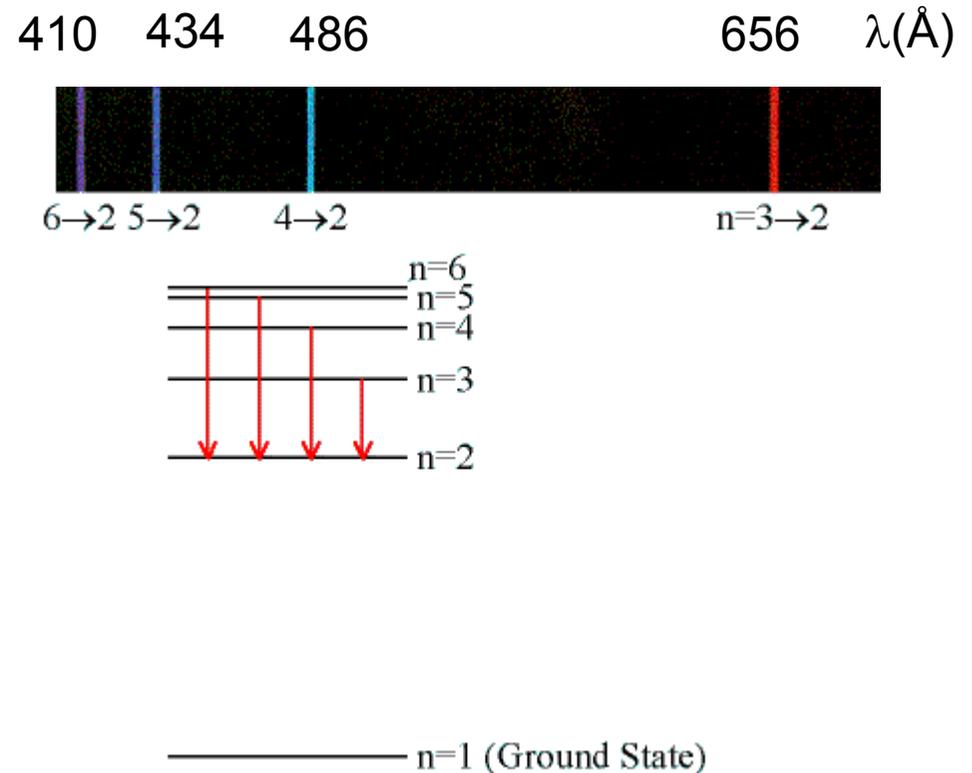
Experimentos de espectroscopia de átomos de H apresentavam raias espectrais discretas :

Série de Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n=3, 4, 5, \dots$$

$$R_H = 109,677 \text{ cm}^{-1}$$



O modelo atômico de Bohr (1913)

Baseado na idéia da “quantização” e da existência dos fótons, Bohr introduziu o seu modelo para o **átomo de hidrogênio**, baseado em 4 postulados:

- 1) Um elétron se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana do núcleo, (mecânica clássica).
- 2) O elétron só pode se mover em órbitas que apresentem **momentos angulares L “quantizados”**:

$$L = n\hbar \quad n = 1,2,3,\dots \quad (\hbar = h/2\pi)$$

O modelo atômico de Bohr (1913)

- 3) O elétron fica em *órbitas “estacionárias”* e **não emite radiação eletromagnética**. Portanto, a sua energia total **E** permanece constante.
- 4) **Radiação é emitida** se um elétron, que se move inicialmente numa órbita de energia E_i , muda para uma órbita de energia E_f menor que E_i . A frequência da radiação emitida é dada por:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

Em outras palavras, o átomo emite um *fóton*.

O modelo atômico de Bohr (1913)

Considerando o núcleo em repouso, a força elétrica no elétron é dada por

$$F = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2}$$

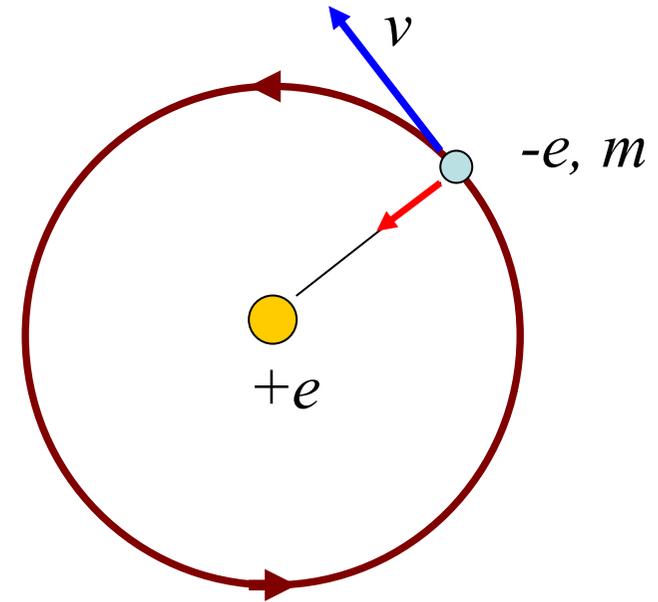
Para uma órbita circular:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Se } L = rmv \\ \text{e } L = n\hbar \end{array} \right\} \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{rm}$$

$$\Rightarrow r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2$$

Quantização das órbitas!



O modelo atômico de Bohr (1913)

Portanto, Bohr prevê que as órbitas têm raios:

$$r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2 \quad \text{ou} \quad r_n = r_0 n^2$$

com

$$r_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \quad \text{ou} \quad r_0 = 0,5291 \text{ \AA}$$

Mas:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Assim, a energia das diferentes órbitas serão dadas por:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} eV$$

O modelo atômico de Bohr (1913)

As frequências emitidas nas transições seriam:

$$\nu_{n \rightarrow n'} = \frac{E_{n'} - E_n}{h} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

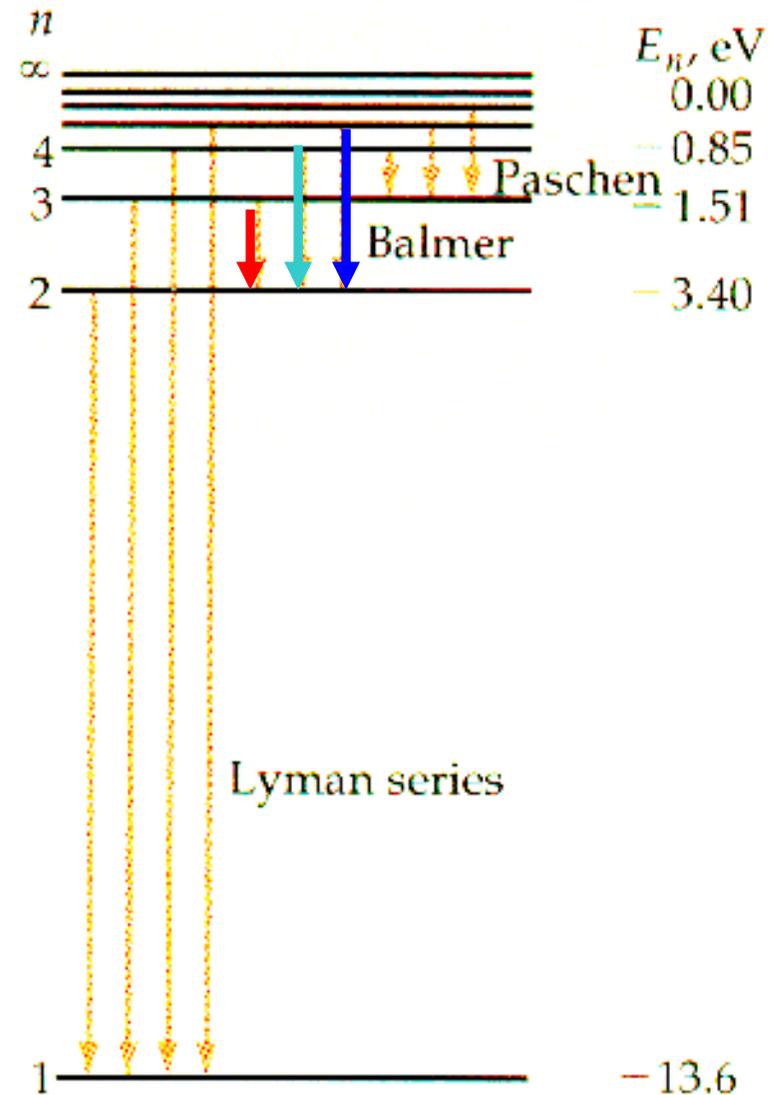
$$\frac{1}{\lambda_{n \rightarrow n'}} = \frac{\nu_{n \rightarrow n'}}{c} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

Portanto, Bohr prevê que:

$$R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 109,74 \text{ cm}^{-1}$$

sendo um êxito para a sua teoria!

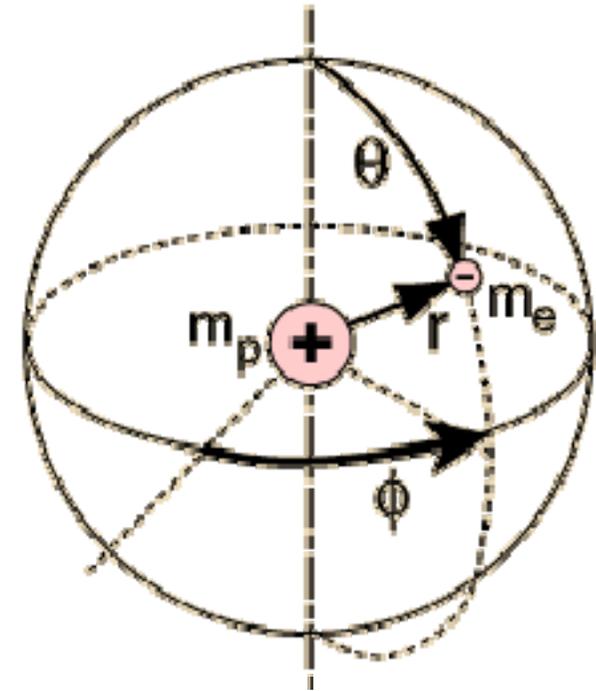
O modelo de Bohr explicou as *raias espectrais*, conhecidas para o *átomo de hidrogênio*, e mostrou que deveriam existir outras, fora do espectro visível.



A equação de Schrödinger e o átomo de H

O poço de potencial onde o elétron está confinado tem a forma

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$



A equação de Schrödinger nesse potencial é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + U(r) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

A equação de Schrödinger e o átomo de H

Como o potencial só depende de r , a função de onda pode ser separada (em coordenadas esféricas)

Isto produz 3 equações separadas, para as coordenadas eletrônicas do átomo de H !

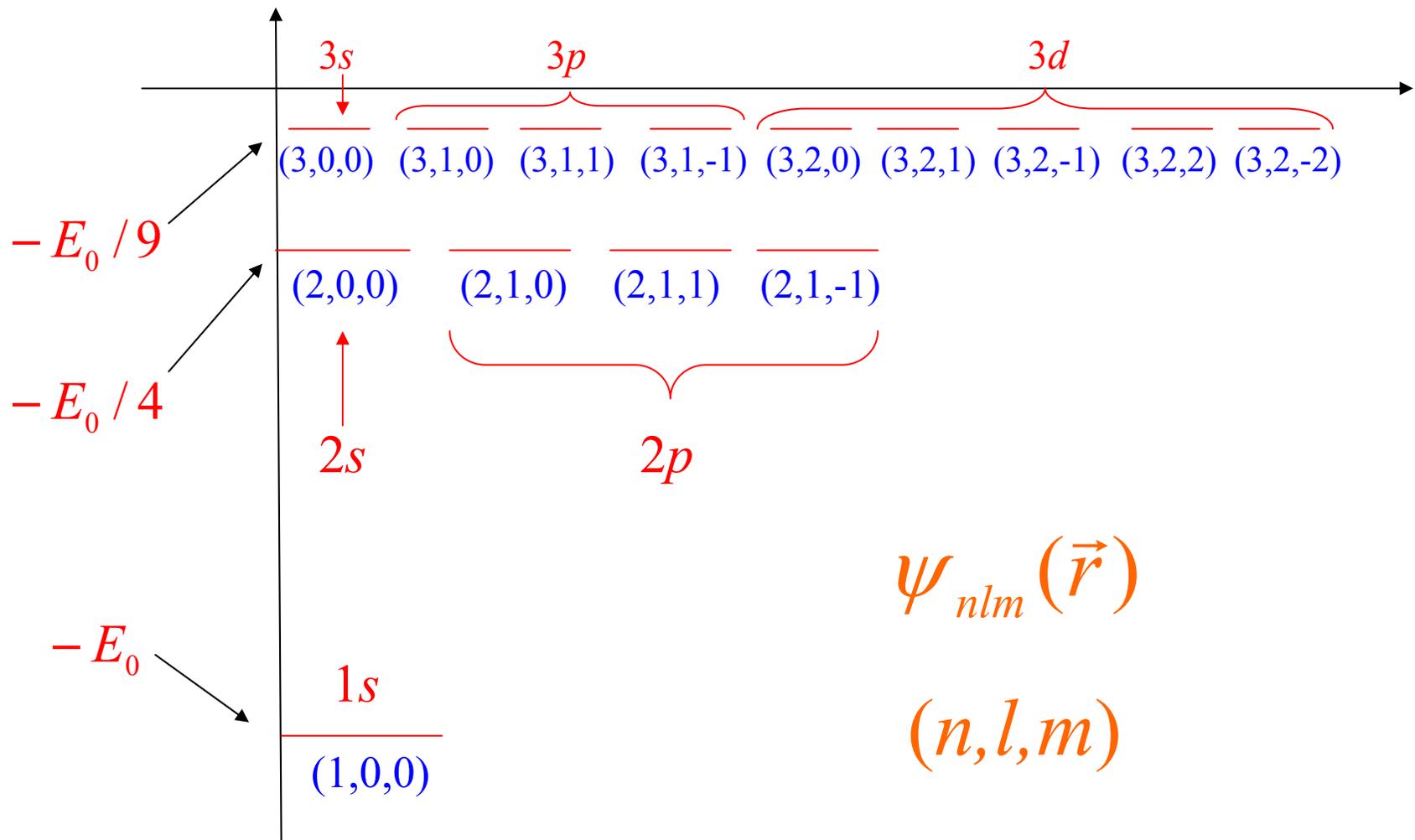
$$\Psi(r, \theta, \phi) = \psi(r)P(\theta)F(\phi)$$

n l m
número número número
quântico quântico quântico
principal orbital magnético

símbolo	valores
n	1,2,3,
l	0,..., $n-1$
m	$-l, \dots, l$

A equação de Schrödinger e o átomo de H

O número quântico orbital l corresponde aos estados: $l = 0, 1, 2, 3, 4$
 s, p, d, f, g



A equação de Schrödinger e o átomo de H

Para o estado fundamental ($n = 1, l = 0, m = 0$) temos a equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \psi(\vec{r})}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(\vec{r})}{dr} \right) + U(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

A função de onda radial do estado fundamental (1,0,0):

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} e^{-r/r_0} \quad ; \quad r_0 \text{ é o raio de Bohr}$$

A equação de Schrödinger e o átomo de H

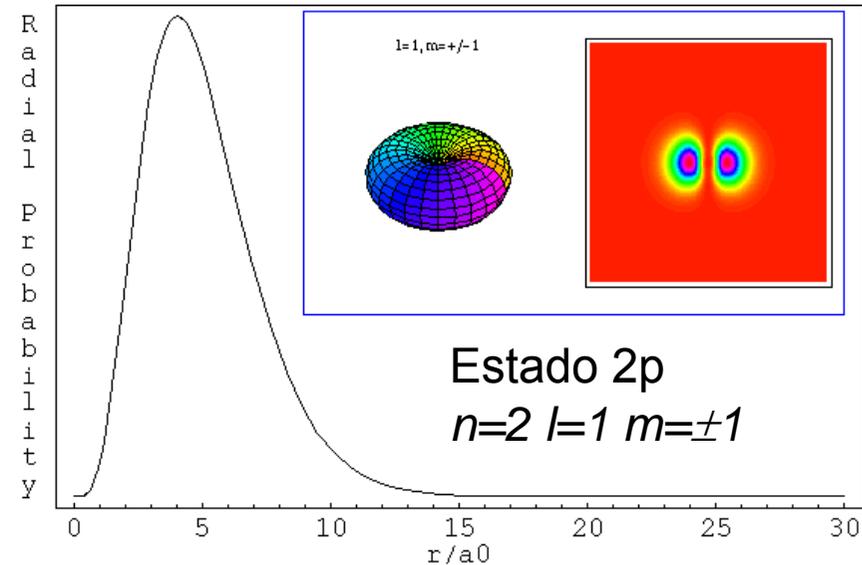
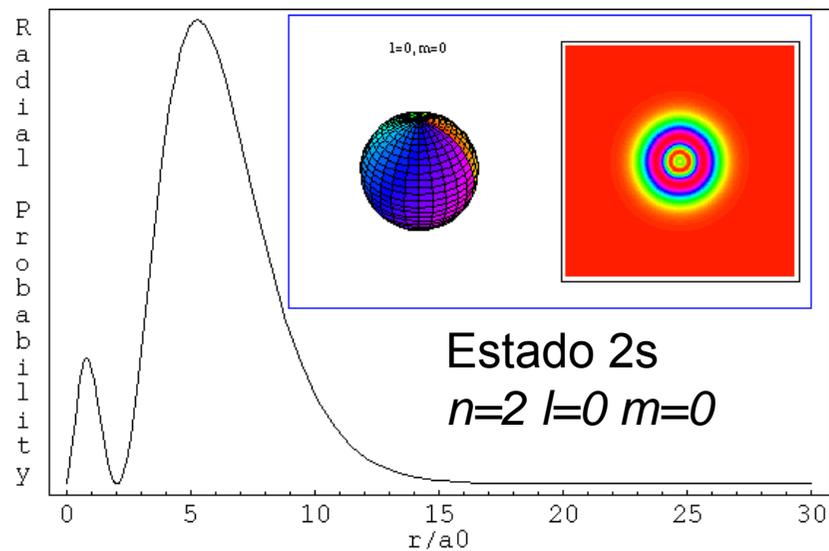
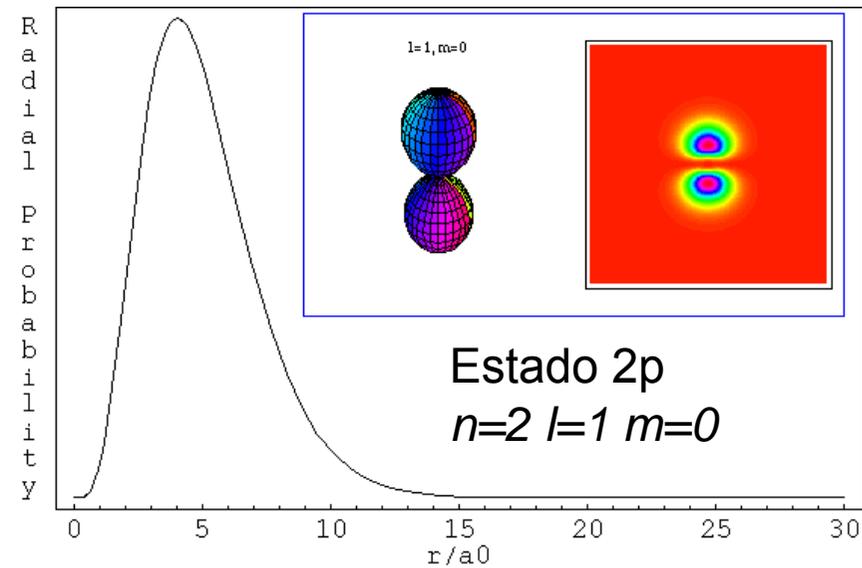
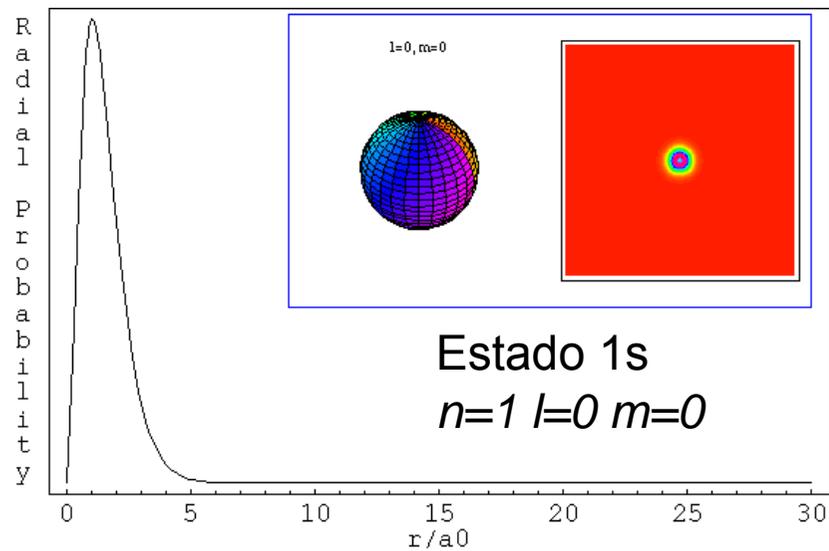
A densidade de probabilidade associada à função de onda:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Probabilidade de medir} \\ \text{no volume } dV \\ \text{à distância } r \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{densidade de probabilidade} \\ |\Psi(r)|^2 \\ \text{à distância } r \end{array} \right] \times dV$$

$$P(r)dr = |\psi(r)|^2 dV = |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr$$

onde
$$P(r) = \frac{4}{r_0^3} r^2 e^{-2r/r_0}$$

Densidade de probabilidade do H



Orbitais atômicos

orbitais atômicos

