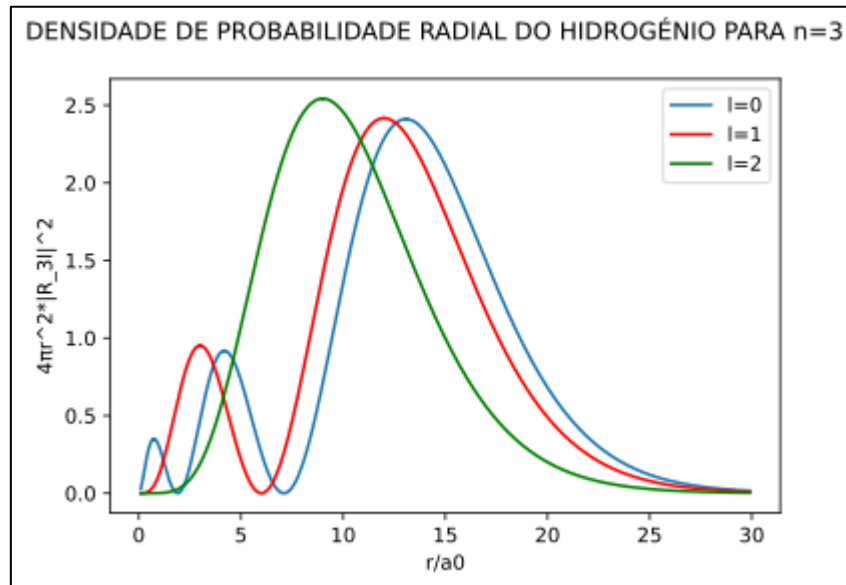


# Problema 1

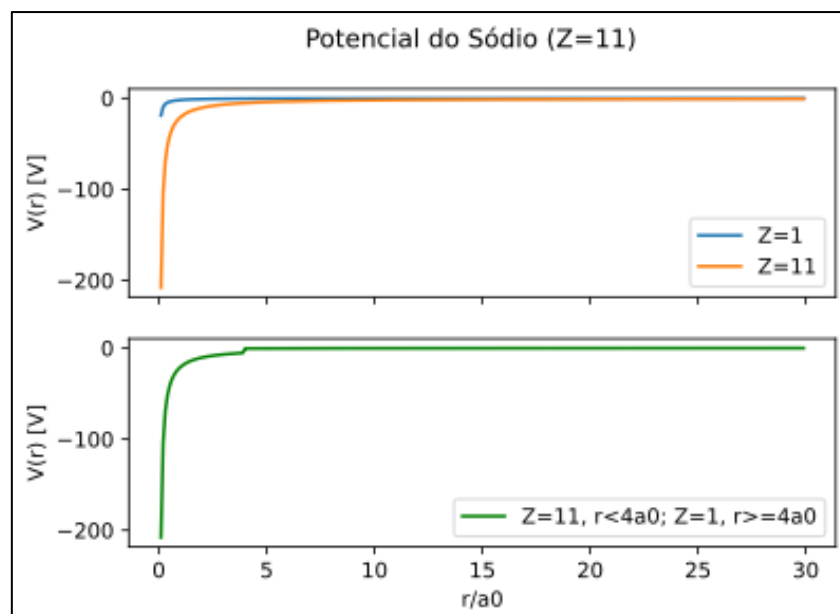
José Rodrigues, nº 201924656

1



A partir do gráfico da densidade de probabilidade radial do hidrogénio, verifica-se que existem nodos (pontos no qual a densidade de probabilidade radial é nula) entre pontos de densidade máxima, sendo que, para  $l=0$  existem 2 nodos entre 3 máximos, para  $l=1$  existe 1 nodo entre 2 máximos, e  $l=3$  não tem nodos, mas tem um máximo. Verificam-se também pontos nos quais a densidade de probabilidade radial é igual para 2 estados degenerados diferentes.

2



### 3

O estado do eletrão exterior no átomo de sódio menos afetado pelo facto de o potencial não ser um potencial puro de Coulomb é o estado 3d, uma vez que a alteração do potencial ocorre em  $r=4a_0$  e este estado é definido apenas por um máximo perto de  $r=9a_0$  (zona na qual o potencial não sofre qualquer alteração). Por outro lado, o estado mais afetado por esta condição do potencial é o estado 3s, pois neste estado a densidade de probabilidade radial atinge um máximo local perto de  $r=a_0$  (no qual está sujeito a um potencial de carga +11), perto de  $r=4.5a_0$  atinge o seu 2º máximo local e na vizinhança de  $r=13a_0$  atinge o seu máximo absoluto (sendo que nestes dois pontos a energia potencial do eletrão é consequente apenas de uma carga +1).

### 4

Os valores indicados para a energia de ligação do eletrão nos estados 3s, 3p e 3d, vão de encontro às conclusões acerca da penetração relativa dos estados, já que o estado onde o eletrão tem maior energia de ligação é o estado no qual, na alínea anterior, se verificou uma zona de densidade de probabilidade radial máxima para um potencial devido à carga total do núcleo de Na ( $Z=+11$ ), o estado 3s (destes 3 estados, é o estado mais penetrante).

Estes valores de energia diminuem com  $l$  uma vez que os estados são sucessivamente menos penetrantes, pois o estado 3p ainda tem uma zona de densidade de probabilidade radial máxima perto de  $r=3a_0$  (cf. gráfico potencial do sódio), pelo que a energia de ligação do eletrão nesse estado vai ser maior que no estado 3d.

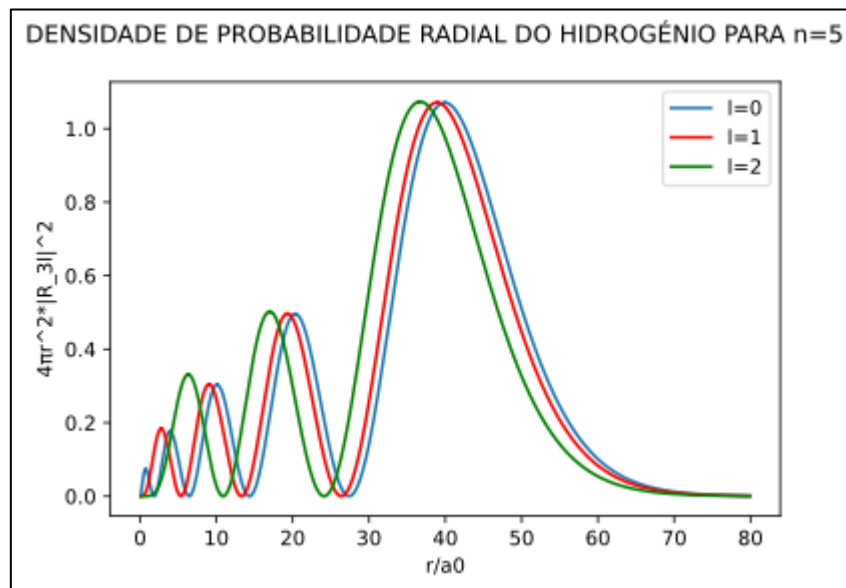
### 5

$Z_{\text{eff}}$  para 3s = 1.8403308289097275

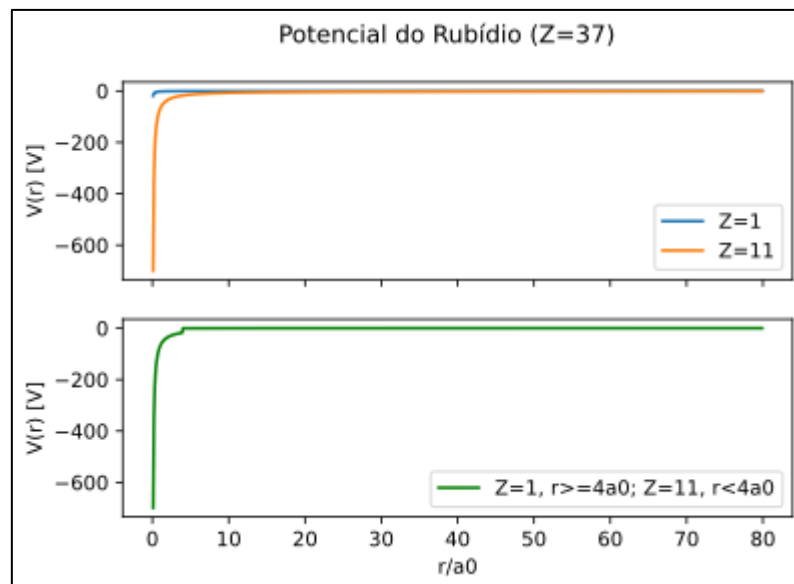
$Z_{\text{eff}}$  para 3p = 1.1786112123072248

$Z_{\text{eff}}$  para 3d = 0.9961082807521859

Estes resultados vêm reforçar as conclusões das alíneas anteriores, a energia de ligação eletrão-núcleo diminui com o nº quântico orbital, o que pode ser explicado pelo facto do potencial efetivo diminuir também com  $l$ , que é exatamente o que se verifica nesta alínea.



Tendo em conta ambos os gráficos da densidade de probabilidade radial do hidrogênio, verifica-se que para  $r < 4a_0$  o comportamento das curvas (à exceção das amplitudes dos máximos) é muito semelhante para ambos os casos,  $n=3$  e  $n=5$ , pelo que a análise feita na alínea 1. é também válida para esta situação (fazendo um paralelismo entre os estados, 3s e 5s, 3p e 5p, e 3d e 5d).



$Z_{\text{eff}}$  para 5s = 2.7713910583854138

$Z_{\text{eff}}$  para 5p = 2.194119697052091

$Z_{\text{eff}}$  para 5d = 1.3487369880011097

A transposição de informação da alínea 3 para este comentário também é válida, pelas razões referidas anteriormente, pelo que o estado mais afetado é o 5s e o menos afetado o 5d.

Utilizando os valores para as energias de ligação do eletrão nos estados 5s, 5p e 5d do Rb apresentados em Moore e Russel (1952)- 4.18 eV para estado 5s, 2.62 eV para o estado 5p e 0.99 eV para o estado 5d- as conclusões são em tudo idênticas às apresentadas na alínea 4: a energia de ligação diminui com o nº quântico orbital, porque para os estados 5s e 5p existem zonas de densidade de probabilidade radial máxima para  $r < 4a_0$ , ou seja, o eletrão nesses estados pode estar sujeito a um potencial devido a uma carga de +37 (o que não se verifica para um eletrão no estado 5d).

Do mesmo modo que em 5., os potenciais efetivos calculados estão de acordo com as observações feitas acima, i.e., a energia de ligação do eletrão diminui com  $l$ , pois quanto menor for o potencial efetivo que interage com esse eletrão, menor é a energia de ligação do eletrão.

## Anexo

Código utilizado em Python:

```
from math import exp, sqrt, pi, factorial as fct
from scipy.special import assoc_laguerre
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

n=3 #nº quântico principal
l=[0,1,2]
z=1 #nº atômico
a=0.52917721092 #raio de bohr: a0 [a]
e=-1 #carga do elétron [eV]
def R(r,n,l):
    y=sqrt((2/(n*a))**3*fct(n-l-1)/(2*n*fct(n+l)))\
        *exp(-r/(n*a))*(2*r/(n*a))**l\
        *assoc_laguerre((2*r/(n*a)),n-l-1,2*l+1)
    return y
"""
1.
"""
r_a=[i for i in np.arange(0.1,30,0.1)] #r/a0
R30=[]
R31=[]
R32=[]
Rnl=[R30,R31,R32]
for i in l:
    for j in r_a:
        Rnl[i]+=[(4*pi*(j*a)**2*(R(j*a,n,i))**2)]
```

```

plt.suptitle('DENSIDADE DE PROBABILIDADE RADIAL DO HIDROGÊNIO PARA n=3')
plt.plot(r_a,R30, label='l=0')
plt.legend(loc='upper right')
plt.plot(r_a,R31, label='l=1',color='red')
plt.legend(loc='upper right')
plt.plot(r_a,R32, label='l=2',color='green')
plt.legend(loc='upper right')
plt.xlabel('r/a0')
plt.ylabel('4\u03C0r^2*|R_3l|^2')
plt.show()
"""

```

2.

"""

```

v1=[]

```

```

v2=[]

```

```

v=[]

```

```

for i in r_a:

```

```

    v2+=[-11*e**2/(i*a)]

```

```

    v1+=[-e**2/(i*a)]

```

```

for i in r_a:

```

```

    if i>=4:

```

```

        z=1

```

```

    else:

```

```

        z=11

```

```

    v+=[-z*e**2/(i*a)]

```

```

fig, axs = plt.subplots(2, sharex= True)

```

```

fig.suptitle('Potencial do Sódio (Z=11)')

```

```

axs[0].plot(r_a,v1,label='Z=1')

```

```

axs[0].legend(loc='lower right')

```

```

    axs[0].plot(r_a,v2,label='Z=11')
    axs[0].legend(loc='lower right')
    axs[0].set(ylabel='V(r) [V]')
    axs[1].plot(r_a,v,label='Z=11, r<4a0; Z=1, r>=4a0', color='g')
    axs[1].legend(loc='lower right')
    axs[1].set(xlabel='r/a0')
    axs[1].set(ylabel='V(r) [V]')

plt.show()

```

```

"""

```

5.

```

"""

```

```

print("""5. """"\n')

```

```

Eh=-13.60569301 #[eV]

```

```

En=[5.12, 2.10, 1.50] #[eV]

```

```

def zef(n,En):

```

```

    y=sqrt(-n**2*En/Eh)

```

```

    return y

```

```

j=0

```

```

for i in En:

```

```

    n=3

```

```

    orbital=['3s','3p','3d']

```

```

    print(f"Z_eff para {orbital[j]} = {zef(n,i)}")

```

```

    j+=1

```

```

"""

```

6.1

```

"""

```

```

z=37

```

```

n=5

```

```

r_a=[i for i in np.arange(0.1,80,0.1)]

R50=[]

R51=[]

R52=[]

Rnl=[R50,R51,R52]

for i in l:

    for j in r_a:

        Rnl[i]+=[(4*pi*(j*a)**2*(R(j*a,n,i))**2)]

plt.suptitle('DENSIDADE DE PROBABILIDADE RADIAL DO HIDROGÉNIO PARA n=5')

plt.plot(r_a,R50, label='l=0')

plt.legend(loc='upper right')

plt.plot(r_a,R51, label='l=1',color='red')

plt.legend(loc='upper right')

plt.plot(r_a,R52, label='l=2',color='green')

plt.legend(loc='upper right')

plt.xlabel('r/a0')

plt.ylabel('4\03C0r^2 |R_3l|^2')

plt.show()

"""

6.2

"""

v1=[]

v2=[]

v=[]

for i in r_a:

    v2+=[-z*e**2/(i*a)]

    v1+=[-e**2/(i*a)]

for i in r_a:

    if i>=4:

```



```

        z=1
    else:
        z=37
    v+=[-z*e**2/(i*a)]

fig, axs = plt.subplots(2, sharex= True)
fig.suptitle('Potencial do Rubídio (Z=37)')
axs[0].plot(r_a,v1,label='Z=1')
axs[0].legend(loc='lower right')
axs[0].plot(r_a,v2,label='Z=11')
axs[0].legend(loc='lower right')
axs[0].set ylabel='V(r) [V]'
axs[1].plot(r_a,v,label='Z=1, r>=4a0; Z=11, r<4a0',color='g')
axs[1].legend(loc='lower right')
axs[1].set xlabel='r/a0'
axs[1].set ylabel='V(r) [V]'
plt.show()

"""

6.3, 6.4 e 6.5

"""

print("""6.3, 6.4 e 6.5"""\n')
Eh=-13.60569301 #[eV]
En=[4.18,2.62,0.99] #[eV],
https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/048/jresv48n1p61\_A1b.pdf

j=0
for i in En:

    n=5

    orbital=['5s','5p','5d']

    print(f"Z_eff para {orbital[j]} = {zef(n,i)}")

    j+=1

```