## Física Quântica (BCK0103-15)

aula 13 - 2019



#### Na última aula (19/11/19)

- O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas);
- Separação de variáveis;
- A quantização de Momento Angular e Energia.

#### Na aula de hoje (26/11/19)

- Funções de ondas do átomo de Hidrogênio;
- Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos.
- Imagens, Abstrações e Interpretações.

#### O que há por vir...

#### Avaliação 2: Dia 03/12

Turma A2: sala 205-0 das 8 às 10 hs Turma B2: sala 108-0 das 10 às 12 hs

Os alunos deverão fazer a prova em sua turma e horário correspondentes

Conteúdo: Desde equação de **Schrodinger** até a aula de hoje.

Vistas de Avaliações: Dia 06/12 (sexta feira)

Notas serão divulgadas assim que as avaliações estejam corrigidas.

Todas as turmas: sala 609-3 das 14 às 16hs **Obs: Não haverá atendimento dia 05/12**!

#### Avaliação SUB ou REC: Dia 10/12

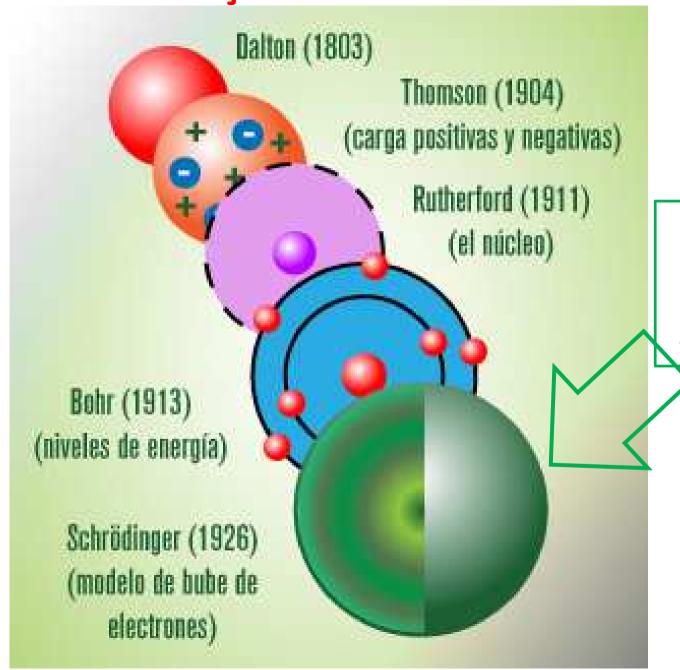
Turma A2: sala 205-0 das 8 às 10hs. Turma B2: sala 108-0 das 10 às 12hs

Os alunos deverão fazer a prova em sua turma e horário correspondentes (caso precisem mudar, entrar em contato por email).

Conteúdo: Sub 1: mesma matéria da P1; Sub 2: mesma matéria da P2; Rec: toda a matéria

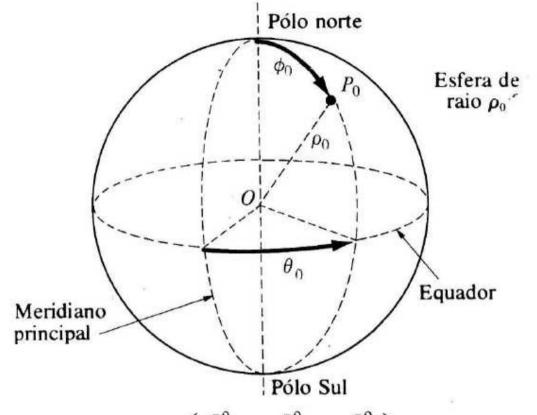
**Obs:** Alunos que fizerem a SUB e precisarem de REC serão contatados após fechamento dos conceitos, para marcar data da REC em 2020.1

#### A evolução dos modelos atômicos



A nossa jornada até aqui!

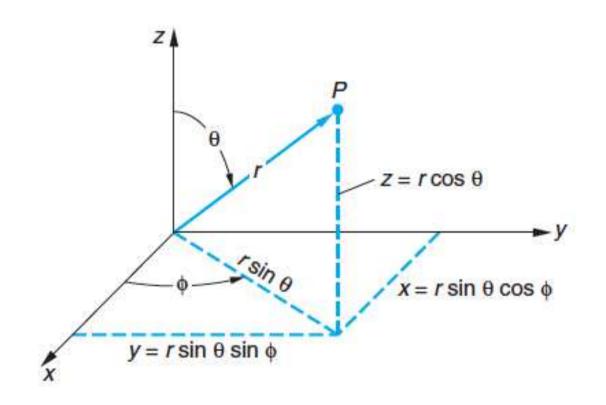
#### SISTEMA DE COORDENADAS ESFÉRICAS



$$\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 sen \ \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( sen \ \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 sen^2 \ \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

#### SISTEMA DE COORDENADAS ESFÉRICAS



Range of variables

Cartesian

$$X, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$$

Spherical

$$r: 0 \to +\infty$$

$$\theta: 0 \to \pi$$

$$\phi: 0 \rightarrow 2\pi$$

Equação de Schrodinger (independente do tempo) em coordenadas esféricas:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] + V(r)\psi = E\psi$$

A equação de Schrodinger (independente do tempo) para o átomo de Hidrogênio em coordenadas esféricas

$$-\frac{\hbar^{2}}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial \psi}{\partial r} \left( r^{2} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^{2} sen \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( sen \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^{2} sen^{2} \theta} \frac{\partial^{2} \psi}{\partial \phi^{2}} \right]$$
$$-\frac{e^{2}}{4\pi \varepsilon_{0} r} \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

O que fazer quando surge uma equação diferencial ordinária de segunda ordem em três variáveis?



Aplicação de métodos matemáticos adequados para obter a solução da equação:



$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} - E \right] R(r) = 0$$

$$\frac{sen \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left( sen \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \beta sen^2 \theta = m^2$$

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2$$

Separação de variáveis e solução de 3 equações diferenciais de uma variável.

## Soluções do Átomo de Hidrogênio

$$\Phi_{m}(\phi) = A_{m}e^{im\phi}$$

$$\Theta(\theta) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta)$$
(Polinômios de Legendre)

$$R_{nl}(r) = -\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{l+3/2} r^l e^{-r/na_0} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l+3/2}$$

(Polinômios de Laguerre)

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$
  $0 \le l \le n - 1$   $n = 1, 2, \dots$ 

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = f_{lm}(\theta) g_m(\varphi)$$

#### $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

#### Table 7-1 Spherical harmonics

$$|\mathbf{L}| = L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$$
 for  $\ell = 0, 1, 2, 3, ...$ 

$$\ell = 0 m = 0 Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$\ell = 1 m = 1 Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \, e^{i\phi}$$

$$m = 0 Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$m = -1 Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \, e^{-i\phi}$$

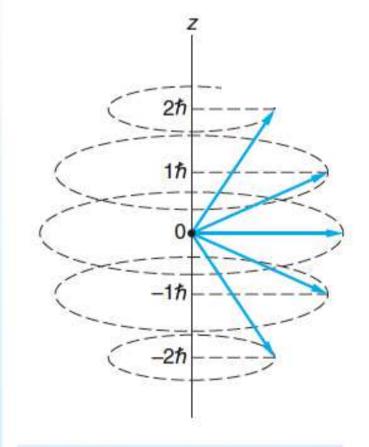
$$\ell = 2 m = 2 Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \, e^{2i\phi}$$

$$m = 1 Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \, e^{i\phi}$$

$$m = 0 Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$m = -1 Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \, e^{-i\phi}$$

$$m = -2 Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \, e^{-2i\phi}$$



$$L_z = m\hbar$$
 for  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ 

A energia para o átomo de hidrogênio é dada por:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

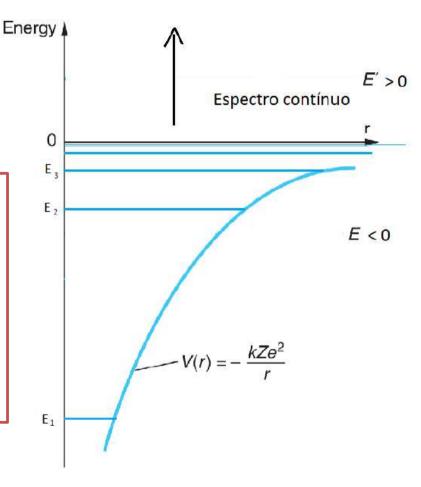
Usando a definição do raio de Bohr:  $a_0=arepsilon_0 h^2/\pi\mu e^2=4\piarepsilon_0 \hbar^2/\mu e^2$ 

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0 n^2}$$
  $n = 0, 1, 2, ...$ 

Na ausência de campo magnético, temos um número de estados com a mesma energia para o mesmo n e diferentes I e m, dado por:

# de estados =  $n^2$  (sem levar em conta o spin)

Obs: Na próxima aula, falaremos sobre um outro número quântica, o **spin,** para o elétron o spin poderá assumir dois valores distintos e isso resulta em 2.n<sup>2</sup> estados degenerados (como veremos na aula de hoje...)



As coluções de equeção radial são dadas nor esta formula de recorrência.

$$R_{nl}(r) = -\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{l+3/2} r^l e^{-r/na_0} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l+3/2}$$

$$n = 1 \qquad \ell = 0 \qquad R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$n = 2 \qquad \ell = 0 \qquad R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\ell = 1 \qquad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$n = 3 \qquad \ell = 0 \qquad R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$$

$$\ell = 1 \qquad R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) e^{-r/3a_0}$$

$$\ell = 2 \qquad R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$$

Normalização:  $\int_0^\infty R_{nl}^*(r)R_{nl}(r)r^2dr = 1$ 

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

#### RESUMO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Resumindo, para o átomo de hidrogênio, as energias são dadas por:

$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

Ou seja, temos os espectros de linhas de emissão como visto na primeira parte da disciplina.

As funções de onda são definidas por três números quânticos:

$$n = 1, 2, 3, ...$$
  
 $l = 0, 1, 2, ..., (n - 1)$   
 $m = -l, (-l + 1), (-l + 2), ..., 0, 1, 2, ...l$ 

$$\psi_{nlm}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{nl}\left(r\right)Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right)$$

#### Funções de onda do estado estacionário do átomo de Hidrogênio

A solução dos estados estacionarias são dadas por:

$$\psi_{nlm}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{nl}\left(r\right)Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right)$$

Em geral, os harmônicos esféricos já são normalizados em sua definição:

$$\int_{0}^{\pi} d\theta \int_{0}^{2\pi} d\varphi \sin \theta \mid Y_{lm} (\theta, \varphi) \mid^{2} = 1$$

Contudo, para a função estar devidamente normalizada, devemos ter:

$$\int_{todo \ espaço} |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dV = 1$$

$$\int_{todo\ espaco} |R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 dV = 1$$

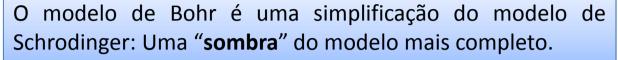
Em coordenadas esféricas um elemento de volume é dado por:

$$dV \equiv r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$$

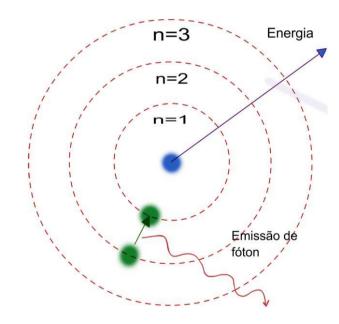


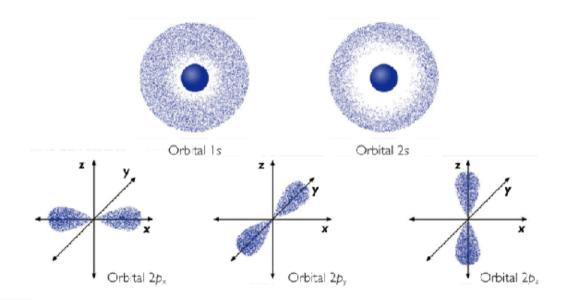
#### Entre os modelos de Bohr e Schrodinger

A quantização do momento no modelo de Bohr é a mesma da projeção do momento angular (Lz) no modelo de Schrodinger.









$$L = mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$
  $n = 1, 2, 3, ...$ 

$$L_z = m\hbar$$
 for  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ 

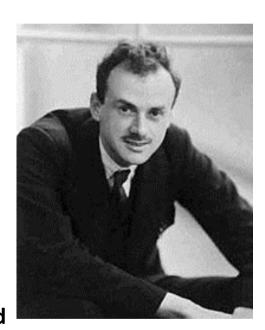
# O modelo do átomo de Hidrogênio via solução da equação de Schrodinger confirmava a efetividade da teoria quântica para a Física Atômica.







"for the discovery of new productive forms of atomic theory."



Considere um átomo de Hidrogênio (Z=1) de massa reduzida  $\mu$ , o elétron deste átomo encontrase no estado com a função de onda radial  $R_{21}(r) = A \, r e^{-r/2a_0}$ , com n =2 e l = 1. O potencial de interação entre o núcleo e o elétron é dado por  $V(r) = \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \frac{1}{r}$ .

- a)Determine a constante de normalização para este estado.
- b)Mostre por substituição direta que está função é solução da equação de Schrodinger radial e determine a energia correspondente a este estado.



Feito em sala de aula!

#### O Papel dos Números Quânticos Atômicos

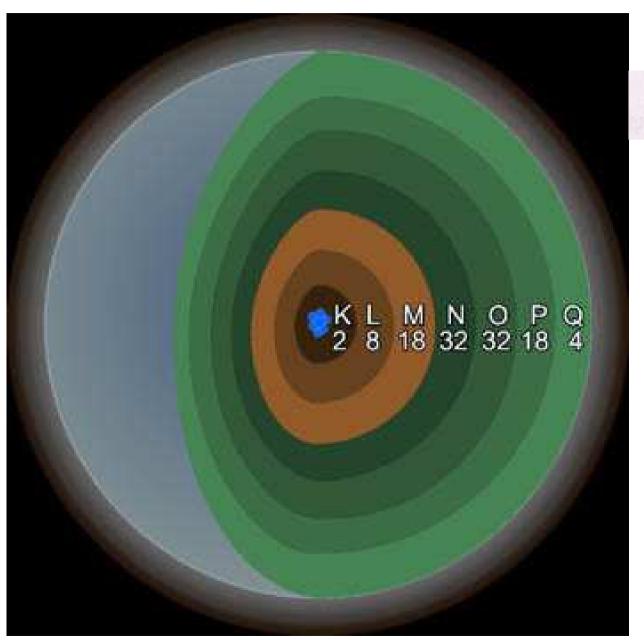
**n** está associado a energia do elétron e define a sua "proximidade" do núcleo

I está associado ao momento angular do elétron e define o "tipo" de forma do orbital

**m** está associado à projeção do momento angular (número quântico magnético) do elétron e define a "orientação" do orbital no espaço.

O conjunto de número quânticos associados a um elétron pode ser entedido como um "endereço". Devido a característica dos elétrons, que são férmions, não existem dois eletrons no Universo que ocupem exatamente os mesmos números quânticos.

#### A definição de camadas a partir do número quântico principal (n)



$$n = 1$$
 2 3 4...  
K L M N...

#### A nomeclatura S P D F

Origem histórica devido a aparência das linhas observadas no espectro do hidrogênio

S:SHARP (I=0)

P: PRINCIPAL (I = 1)

D: DIFFUSE (I = 2)

F: FUNDAMENTAL (I = 3)

$$l = 0$$
 1 2 3 4 5 6...  
s p d f g h i...

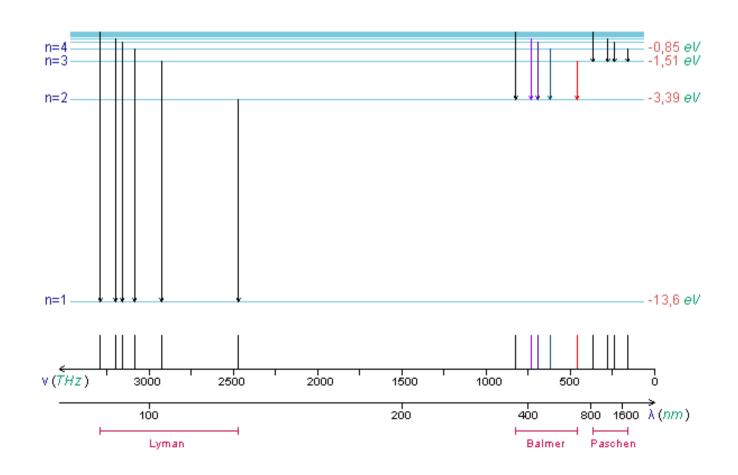
$$G(1 = 4)$$

$$H(I = 5)$$

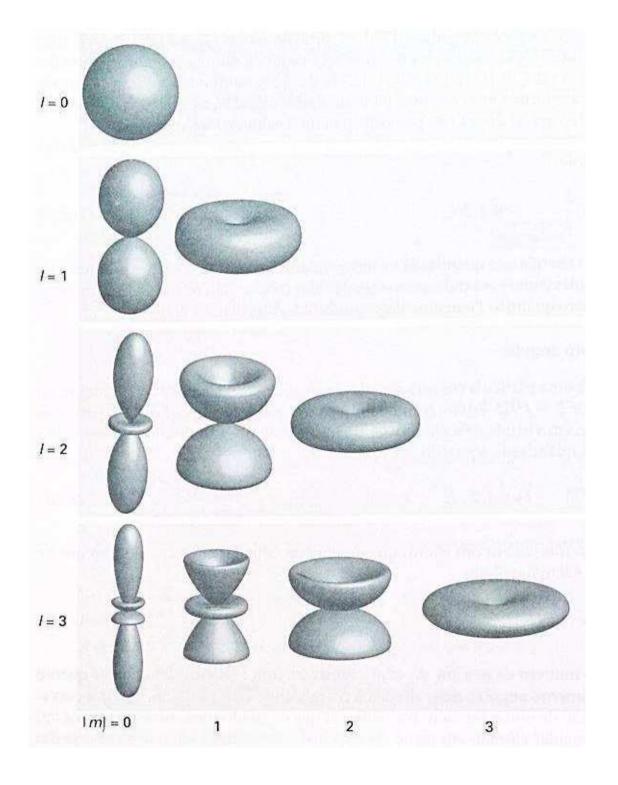
•

.

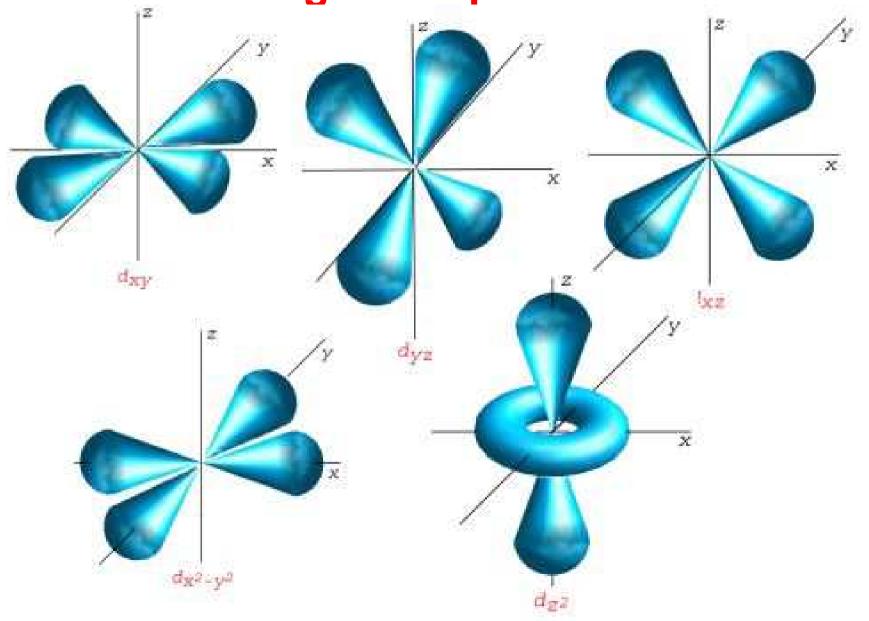
•



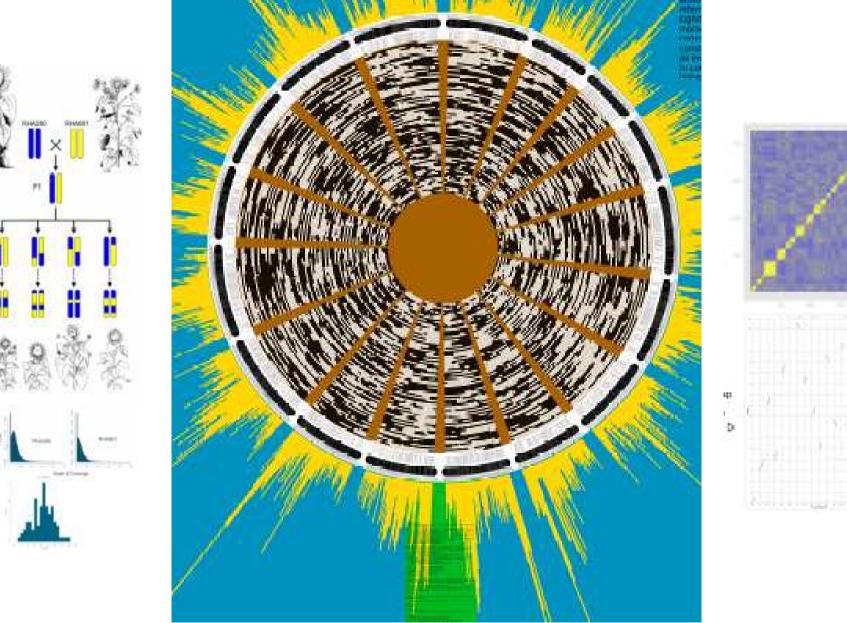
As diferentes formas associadas a variação dos números quânticos l e m.



## O que as funções de onda do Átomo de Hidrogênio representam?

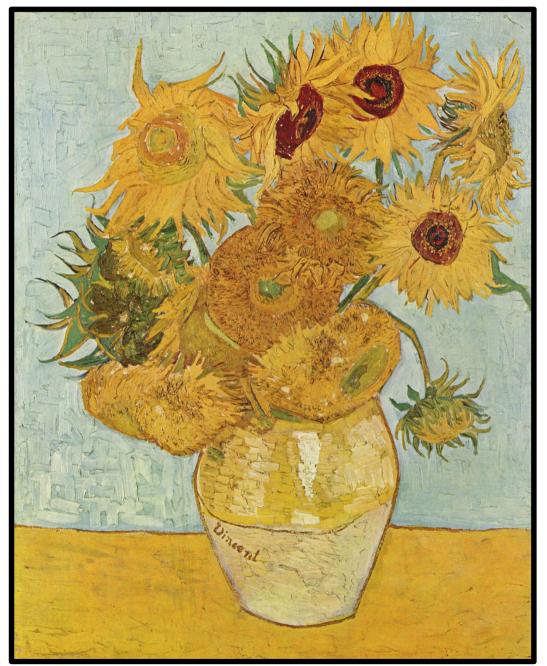


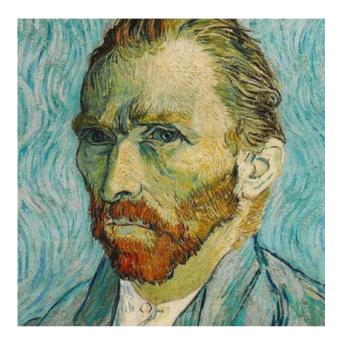
#### Uma Questão de Representação





#### Uma Questão de Representação





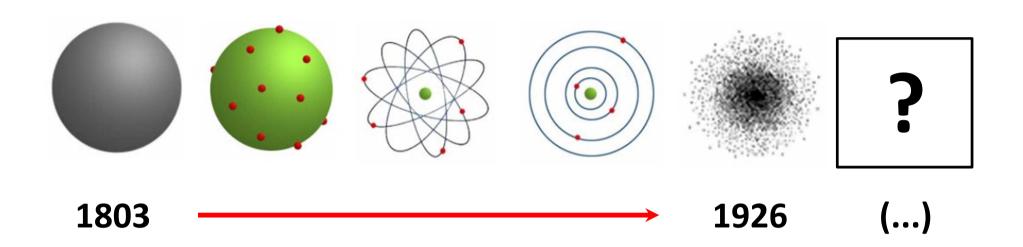
"Não extingua sua inspiração e sua imaginação; não se torne o escravo do seu modelo."

V. van Gogh

#### Uma Questão de Representação



## Evolução dos modelos Atômicos

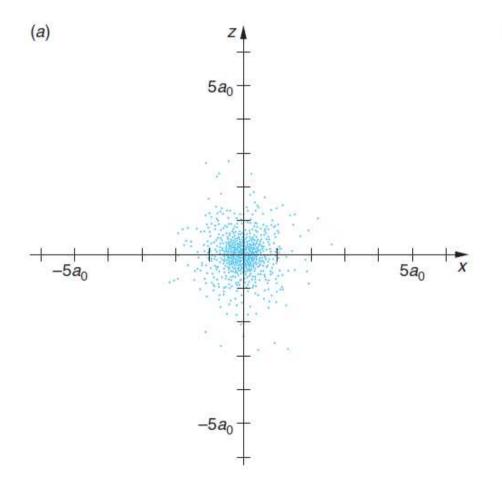


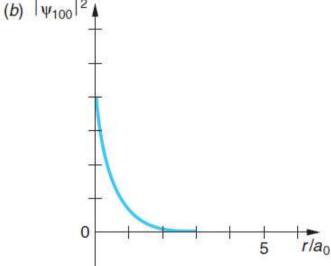
Em um periodo de 120 anos, tivemos uma mudança completa na forma como compreendemos a materia e como ela se manifesta no espaço e no tempo.

Nos últimos 90 anos, temos aprimorado a nossa visão do modelo de Schrodinger.

#### **Orbitais Atômicos**

Os orbitais atômicos representam os estados estacionários dos elétrons ligados ao átomo e definem a região no espaço (3D), na qual é distribuida a probabilidade de se encontrar estes elétrons após ser realizada uma medida.





Look at me as many times as you wish, but you won't get to know me!
Since you have last seen me,
I've changed a hundred times!

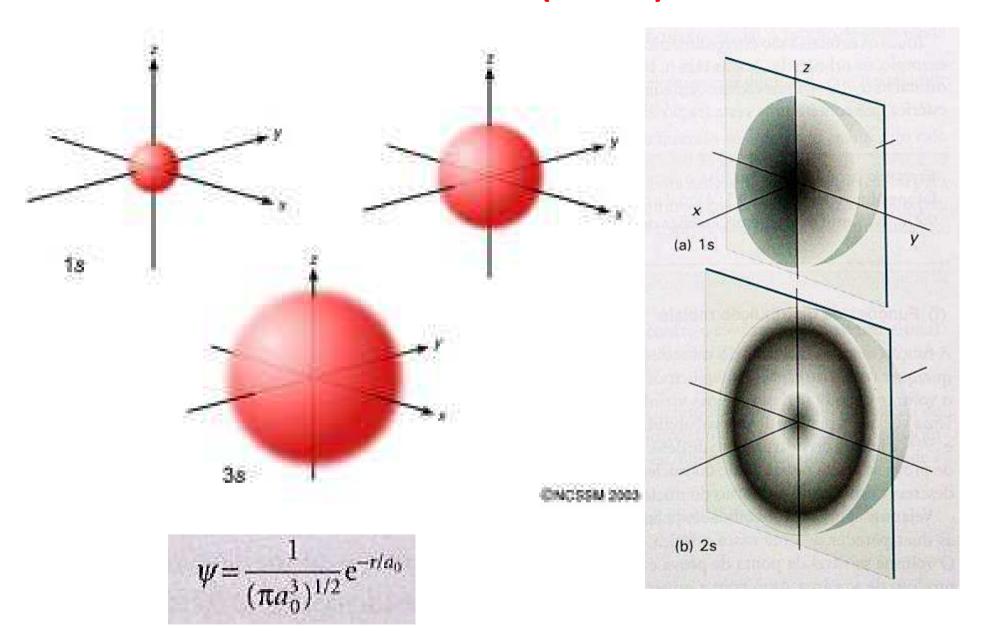
Rumi =)



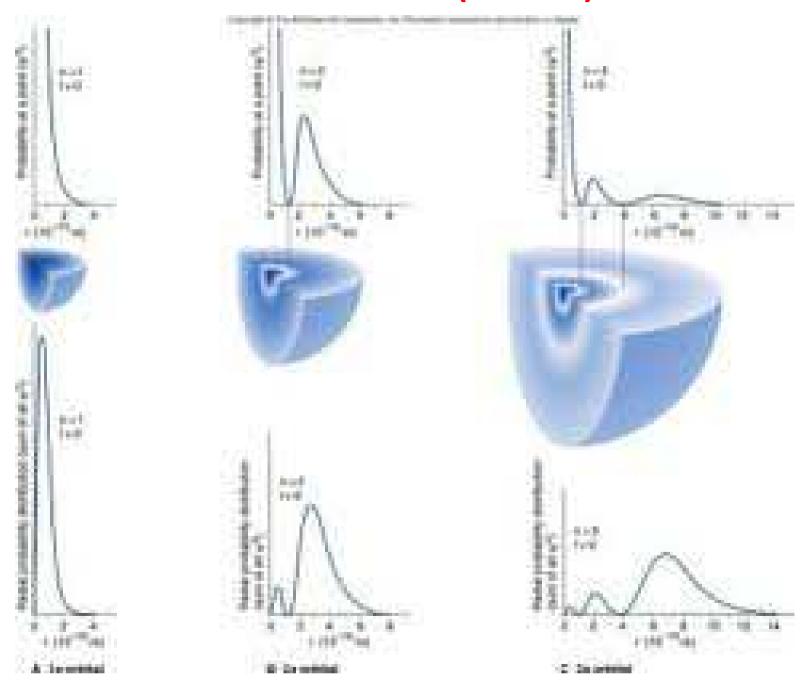
"What we observe as material bodies and forces are nothing but shapes and variations in the structure of space."

Erwin Schrodinger

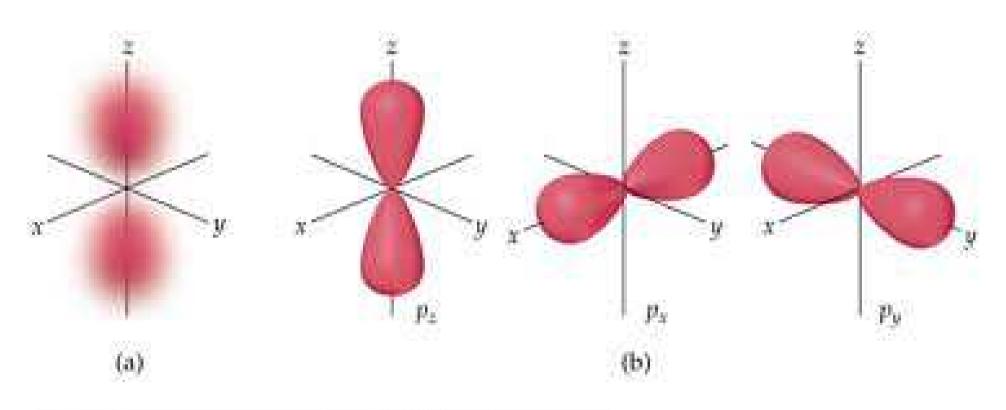
## Orbitais S(I = 0)



## Orbitais S(I = 0)



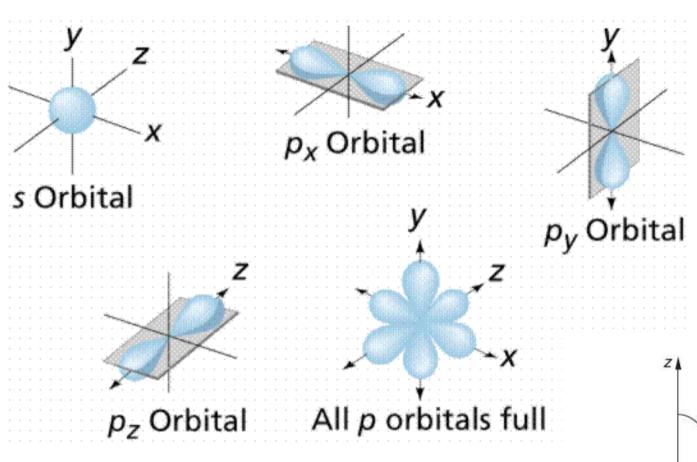
## Orbitais P (I = 1)



$$\psi_{p_0} = R_{2,1}(r)Y_{1,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r\cos\theta e^{-Zr/2a_0} = r\cos\theta f(r)$$

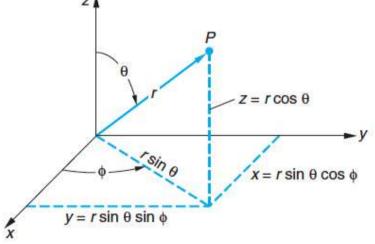
$$\psi_{p_{\pm 1}} = R_{2,1}(r)Y_{1,\pm 1}(\theta,\phi) = \mp \frac{1}{8\pi^{1/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r \operatorname{sen} \theta e^{\pm i\phi} e^{-Zr/2a_0} = \pm \frac{1}{2^{1/2}} r \operatorname{sen} \theta e^{\pm i\phi} f(r)$$

## Orbitais P (I = 1)

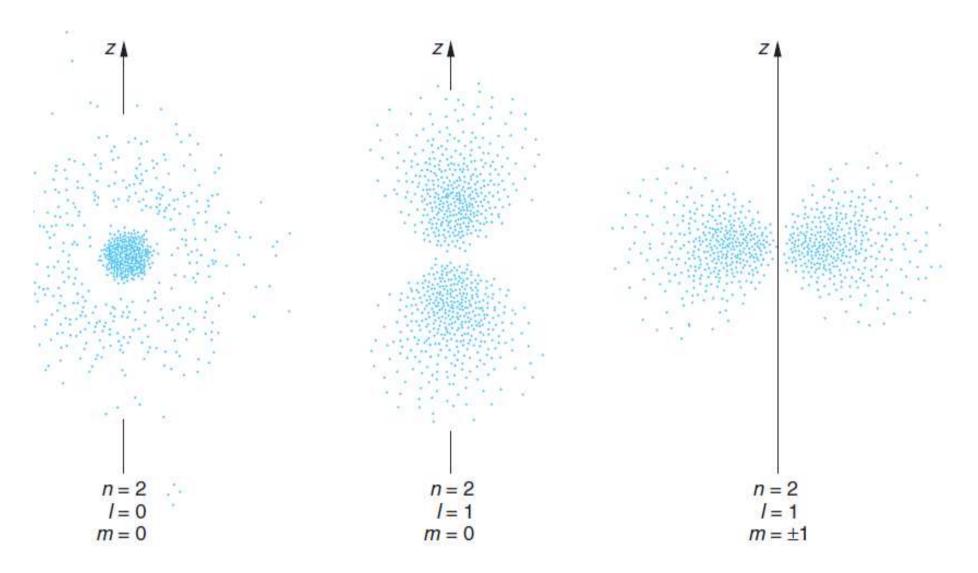


$$\Psi_{\mathbf{p}_{1}} = -\frac{1}{2^{1/2}}(\mathbf{p}_{+1} - \mathbf{p}_{-1}) = r \sec \theta \cos \phi f(r) = xf(r)$$

$$\Psi_{\mathbf{p}_{2}} = \frac{1}{2^{1/2}}(\mathbf{p}_{+1} + \mathbf{p}_{-1}) = r \sec \theta \sec \phi f(r) = yf(r)$$

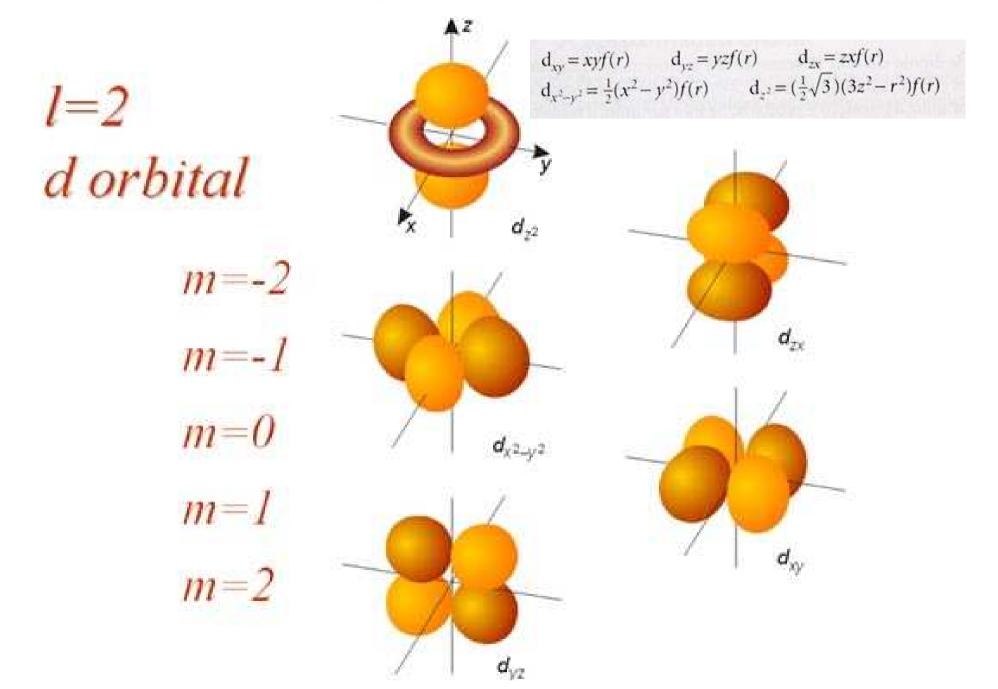


Distribuição de densidade de probabilidade para funções de onda com n = 2

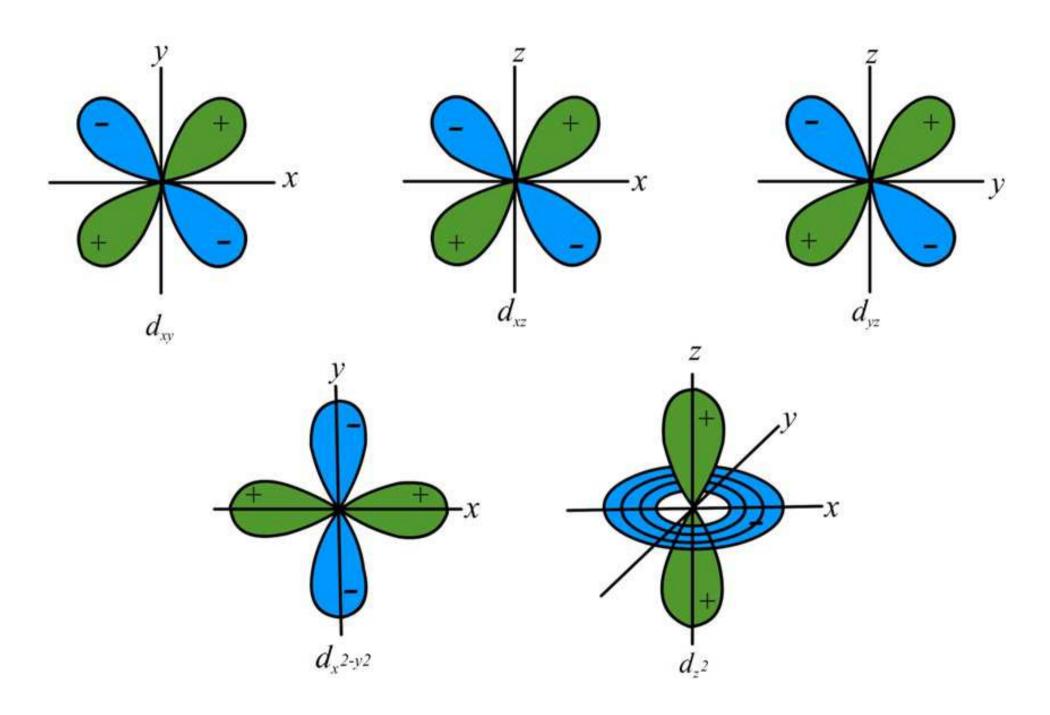


Todos estes estados tem o mesmo valor de energia.

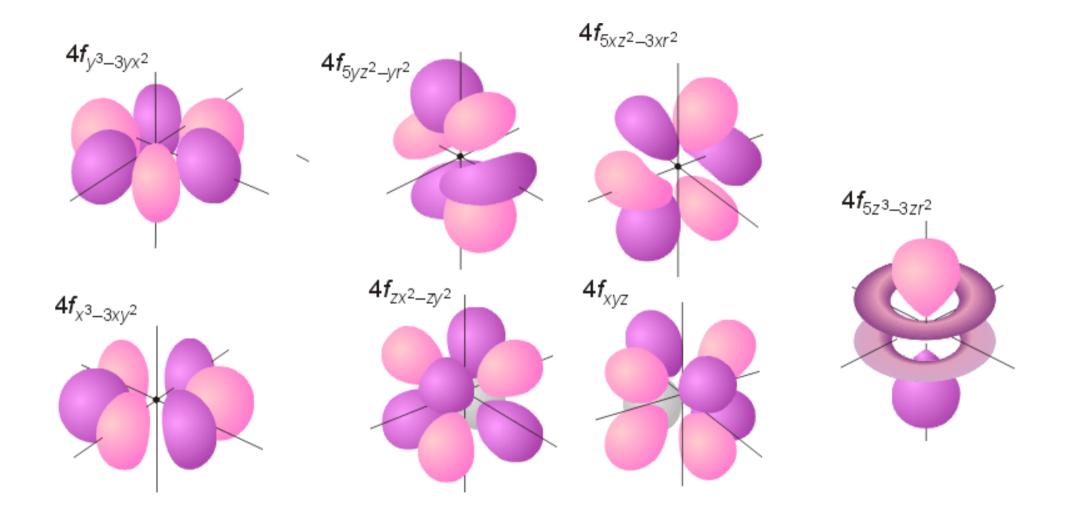
### **Orbitais D**



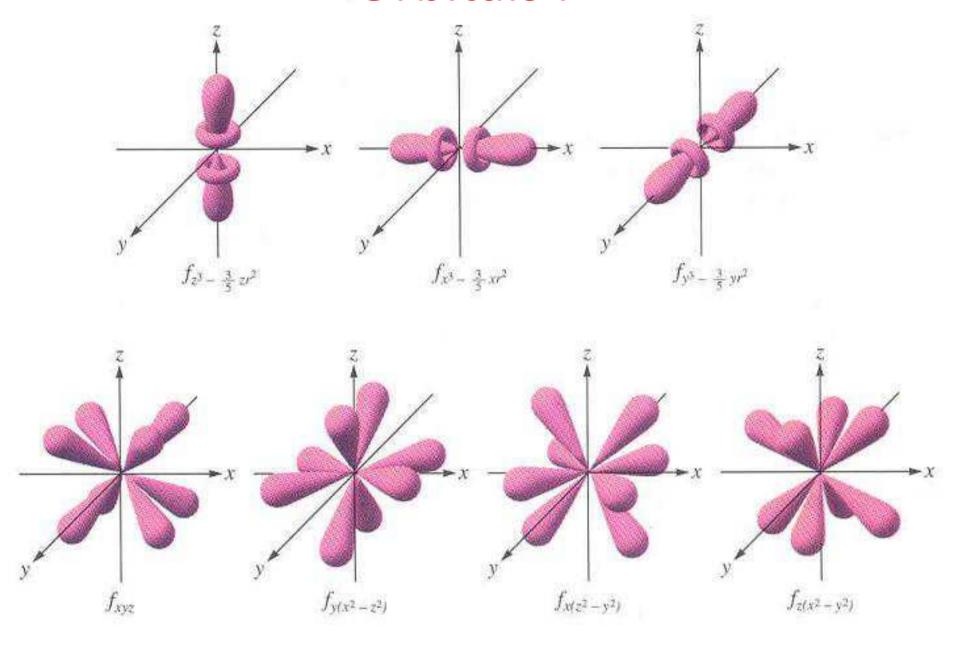
## **Orbitais D**



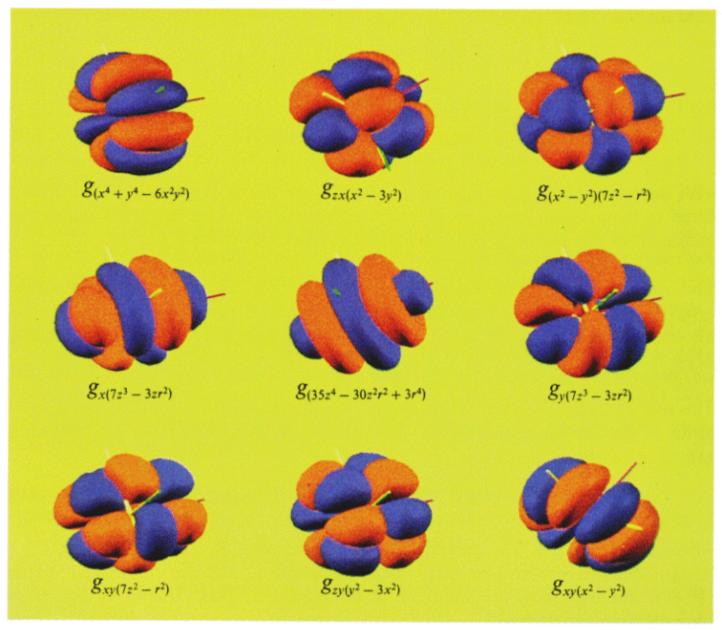
## **Orbitais F**



# **Orbitais F**

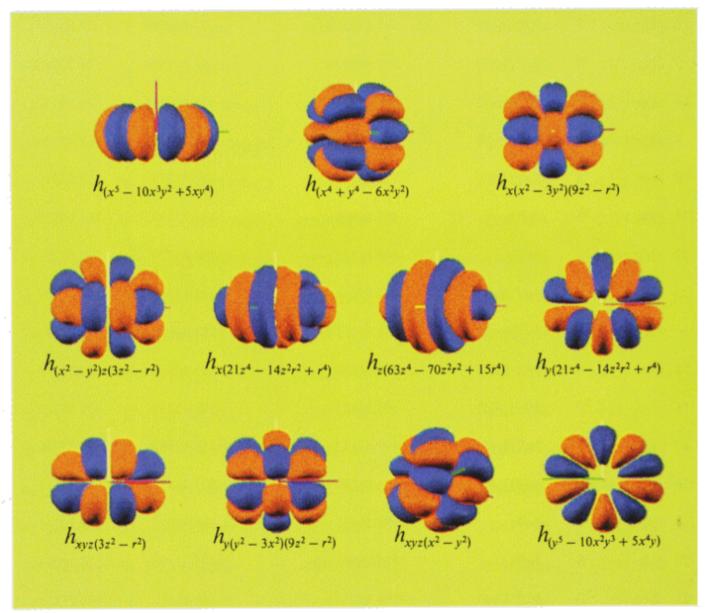


# Orbitais G



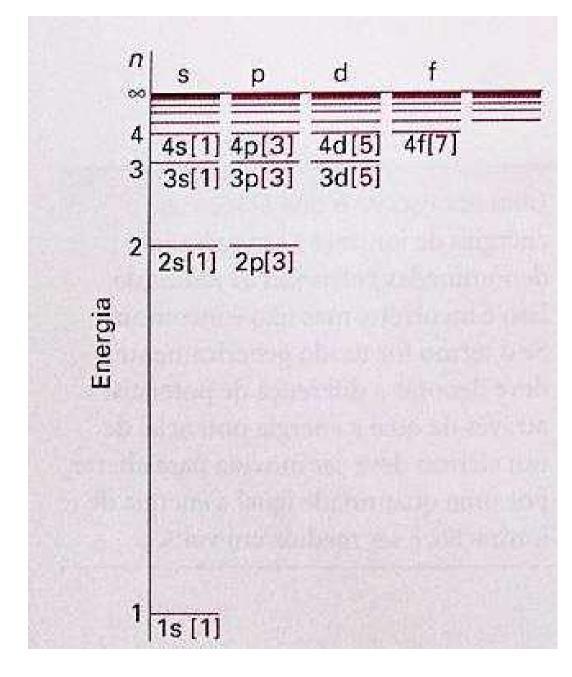
Representação 3D-dimensional dos orbitais do tipo g.

# **Orbitais H**

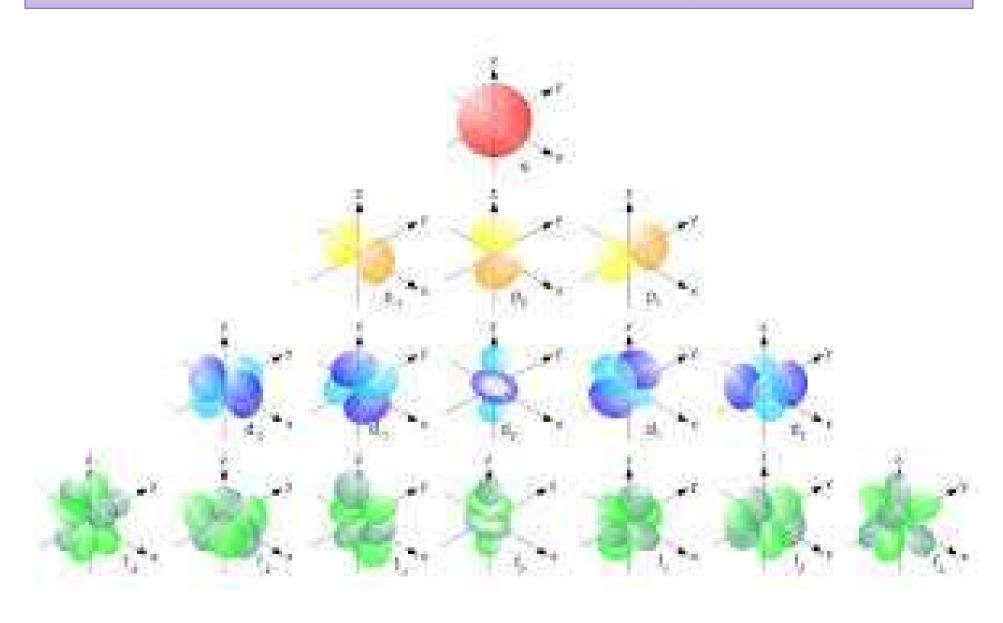


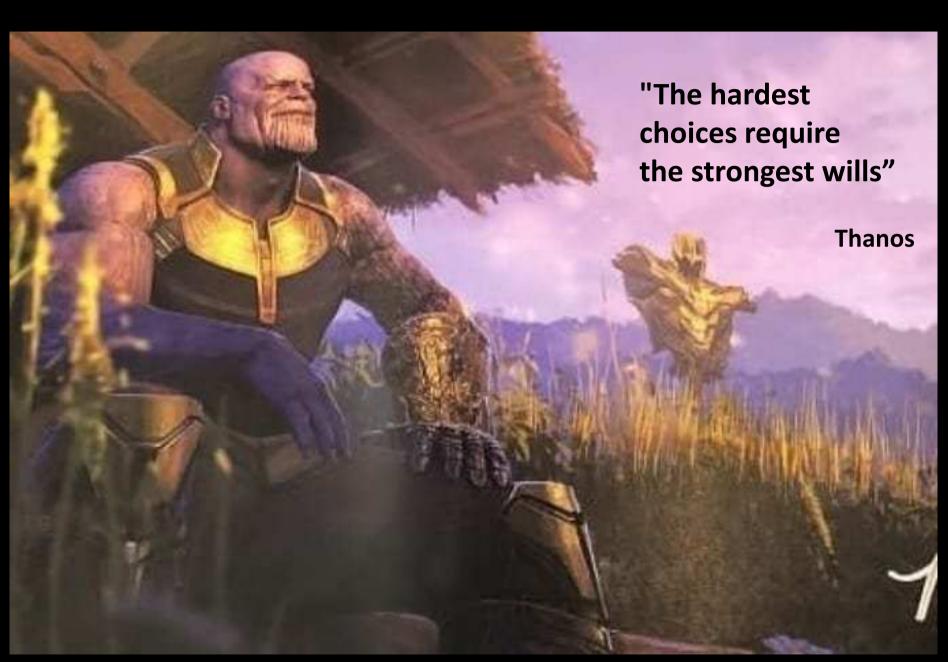
Representação 3D-dimensional dos orbitais do tipo h.

## Representação: Diagrama de níveis de energia



<u>Lembre-se</u>: Orbitais são representações da probabilidade de medida da posição de um elétron associado a uma certa energia.





Com o trabalho de Schrodinger e o uso da sua equação para as ondas de matéria foi possível obter a solução para o átomo de Hidrogênio e um entendimento de como os elétrons se "comportam" em um átomo (conceito de orbital).

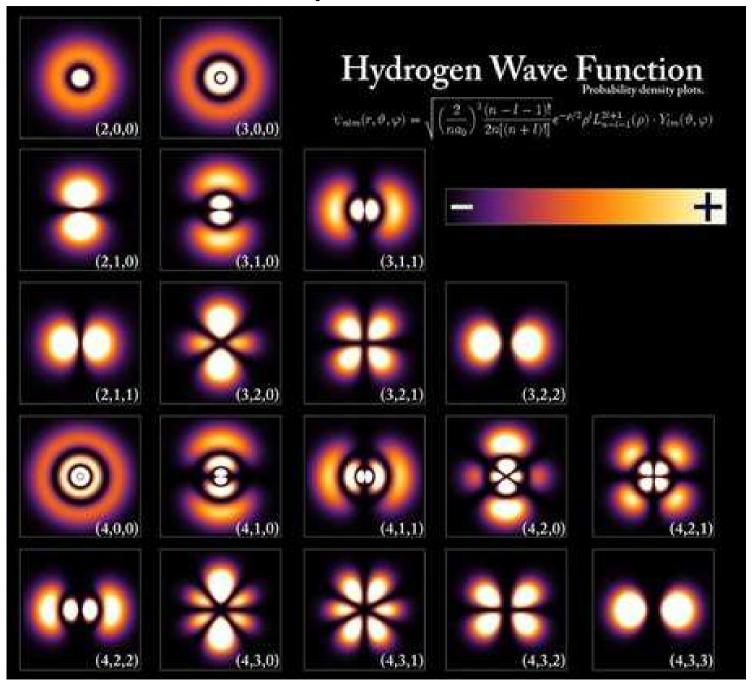
As contribuições de Schrodinger para a Física Quântica foram essenciais para que esta se estabelecesse como uma nova teoria física, que tem profundas implicações na forma como vemos a Natureza e como desenvolvemos a nossa tecnologia nos dias atuais.

Let me say at the outset, that in this discourse, I opposing not a few special statements of quantum mechanics held today (1950s), I am opposing as it were the whole of it, I am opposing its basic wiews that have been shaped 25 years ago, when Max Born put forward his probability interpretation, which was accepted by almost everybody. I don't like it, I'm sorry I ever had anything to do with it.

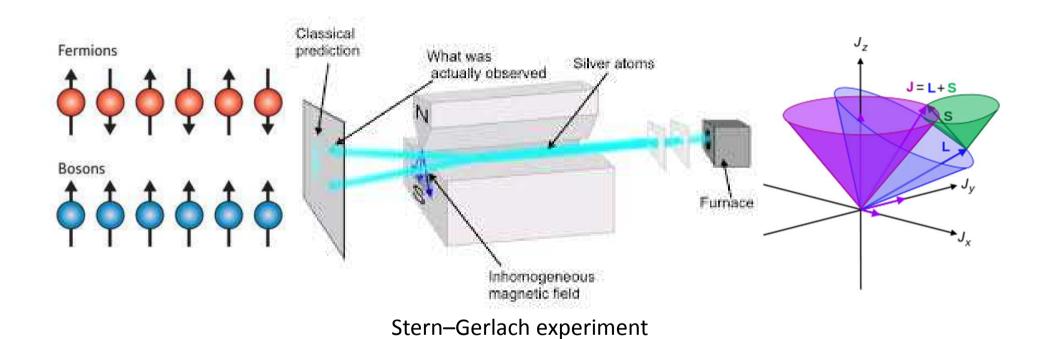
Erwin Schrodinger (1887 – 1961)



## Diferentes orbitais para o átomo de UM elétron



# O que acontece quando um átomo tem mais de um elétron?



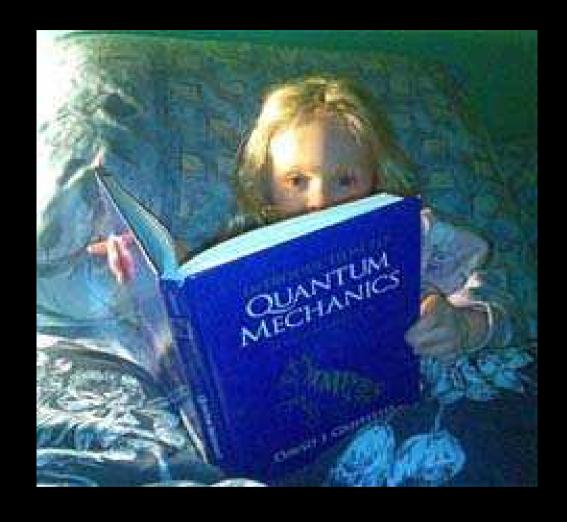
Manifestação de um "novo" número quântico: SPIN

#### Na aula de hoje (26/11/19)

- Funções de ondas do átomo de Hidrogênio;
- Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos;
- Imagens, Abstrações e Interpretações.

### Na próxima aula (28/11/19)

- Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons;
- Spin (quarto número quântico atômico);
- Tabela periódica;
- O fim de um começo.



Perguntas, dúvidas, comentários, aflições?

## Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 1)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
1	<del>24/09 (Ter)</del>	1	Apresentação a disciplina; Evidências experimentais da teoria quântica : radiação do Corpo Negro.
	_		
2	<del>01/10 (Ter)</del>	2	Evidências experimentais da teoria quântica: efeito foto-elétrico, efeito Compton, espectros atômicos
	<del>03/10 (Qui)</del>	3	Modelos atômicos, Modelo quântico de Bohr, Experimento de Franck-Hertz, Hipótese de de Broglie e ondas de matéria.
3	<del>08/10 (Ter)</del>	4	Revisitando ondas; interferência (fótons e elétrons) e interferômetros; dualidade onda- partícula e princípio de complementaridade; Principio de incerteza de Heisenberg.
	_		
4	<del>15/10 (Ter)</del>	5	Interferômetros e fótons únicos, polarização da luz, postulados da física quântica e notação de Dirac
	<del>17/10 (Qui)</del>	6	Relação entre estados quânticos e funções de onda. Espaços discretos e contínuos na física quântica. Probabilidade e interpretações em Física Quântica. Gato de Schrodinger. e estados emaranhados.
5	<del>22/10 (Ter)</del>	7	Mecânica Quântica Ondulatória, Determinação eurística da Equação de Schrodinger, propridades da equação de Schrodinger e funções de ondas.
6	<del>29/10 (Ter)</del>	<del>P1</del>	Primeira Avaliação
	<del>31/10 (Qui)</del>	8	Potenciais simples: poço de potencial, Espaço de estados e transições entre estados de energia; Elétrons em currais quânticos e o

## Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 2)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
7	05/11 (Ter)	9	Potenciais simples: poço quadrado finito; operadores e valores médios de observáveis, pontos quânticos e suas aplicações.
8	12/11 (Ter)	<del>10</del>	Potenciais simples: potenciais degraus, reflexão, Transmissão de Ondas, Tunelamento. Tempo de tunelamento em uma barreira (revisitando o princípio de incerteza de Heisenberg). Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.
	14/11 (Qui)	11	Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico. Armadilhas de íons e principios de informação quântica. Requisitos essenciais de um computador quântico.
9	19/11 (Ter)	<del>12</del>	Equação de Schrodinger em três dimensões: O cubo quântico (coordenadas cartesianas), O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas), Separação de variáveis e a quantização de Momento Angular e Energia.
			<del></del>
10	26/11 (Ter)	13	Funções de ondas do átomo de Hidrogênio; Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos. Imagens, Abstrações e Interpretações.
	28/11(Qui)	14	Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons, spin (quarto número quântico atômico) e tabela periódica. O fim de um começo.
11	03/12 (Ter)	P2	Segunda Avaliação da Disciplina Quase acabando
12	10/12 (Ter)	Psub\REC	Avaliação Substitutiva ou Avaliação de Recuperação
13			
	14 a 21/9		Lançamento de conceitos e faltas