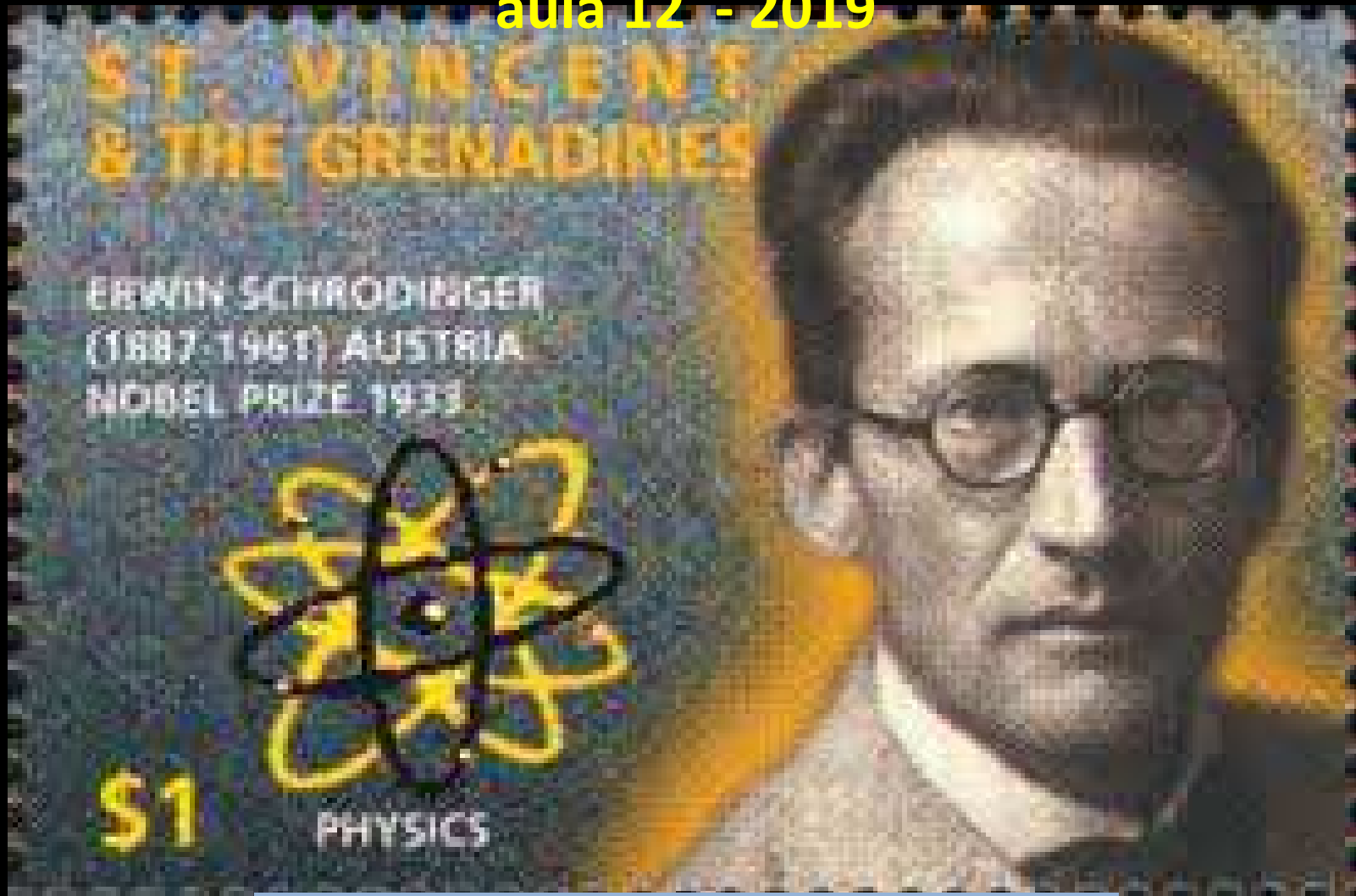


Física Quântica (BCK0103-15)

aula 12 - 2019



Luciano Cruz

Sala 609 – Torre 3 – Bloco A

luciano.cruz@ufabc.edu.br

Na última aula (14/11/19)

- Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico.
- Armadilhas de íons e princípios de informação quântica.
- Equação de Schrodinger em três dimensões;
- O cubo quântico (coordenadas cartesianas);

Na aula de hoje (19/11/19)

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

A equação de Schrodinger independente do tempo

Para o caso de potenciais independentes do tempo [para $V(x,t) = V(x)$]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

E a solução geral da Equação será dada por:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

A distribuição de probabilidade pode ser então calculada diretamente como:

$$P(x) = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \psi^*(x) \psi(x)$$

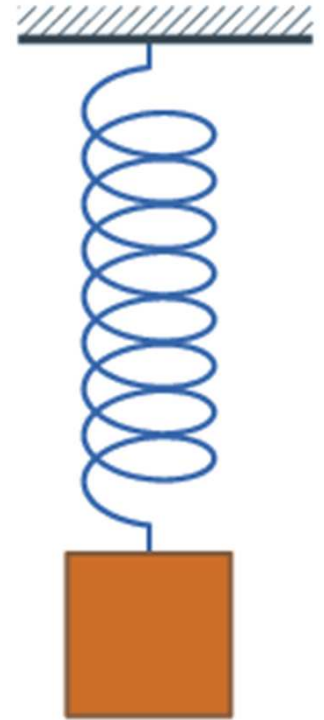
O Oscilador Harmônico

Oscilador Harmônico Simples (OHS) é um dos sistemas mais estudados em Física Clássica. Um exemplo é o sistema “massa-mola”, sob uma força restauradora:

$$F = -kx$$

E uma energia potencial dada por:

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad \text{Com:} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$



As soluções para Oscilador Harmônico Quântico devem satisfazer a equação de Schrodinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

De maneira geral, as soluções para o oscilador harmonico são dadas por:

$$\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(x)$$

Onde C_n são obtidos por normalização e $H_n(x)$ são denominados **Polinômios de Hermite**.

$H_0(x)$	1
$H_1(x)$	$2x$
$H_2(x)$	$4x^2 - 2$
$H_3(x)$	$8x^3 - 12x$
$H_4(x)$	$16x^4 - 48x^2 + 12$
$H_5(x)$	$32x^5 - 160x^3 + 120x$
$H_6(x)$	$64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$
$H_7(x)$	$128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x$
$H_8(x)$	$256x^8 - 3594x^6 + 13,440x^4 - 13,440x_2 + 1680$

Energias, Funções de Onda e Densidades de Probabilidade de um Oscilador Harmônico Quântico

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

First four harmonic oscillator normalized wavefunctions

$$\Psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-y^2/2}$$

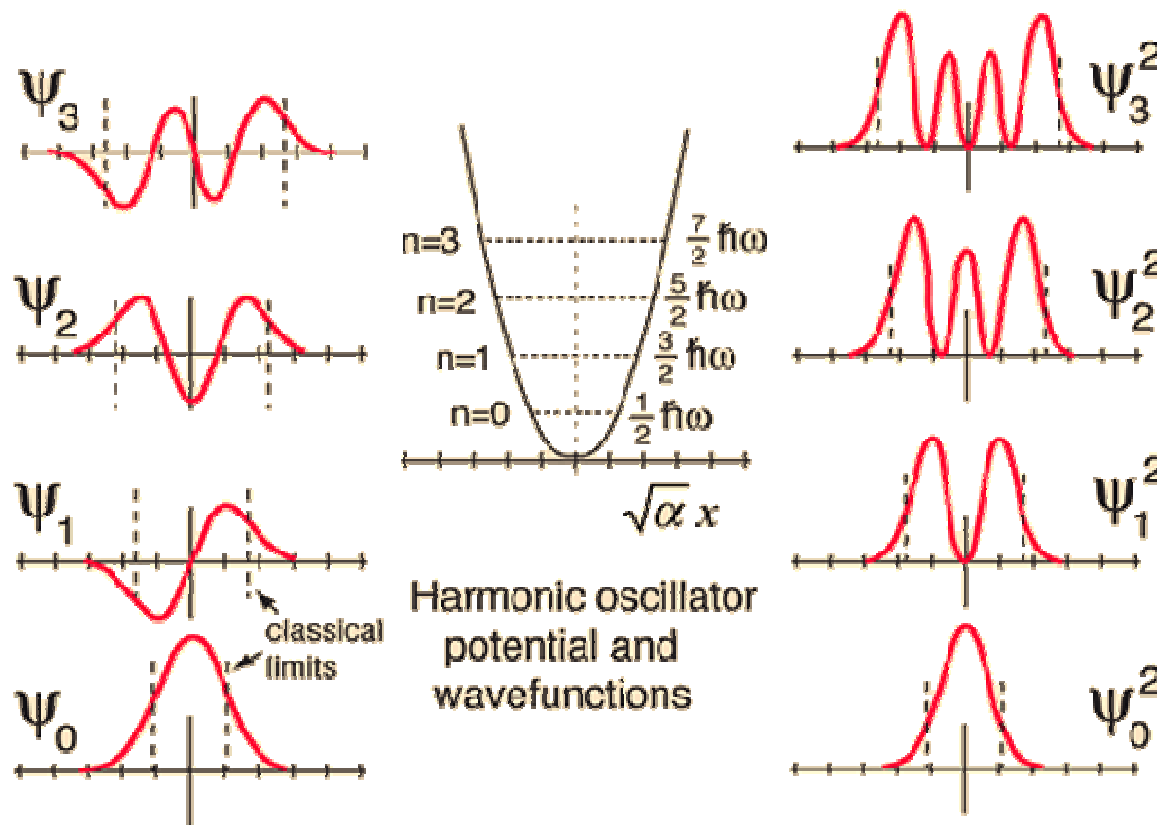
$$\Psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \sqrt{2} y e^{-y^2/2}$$

$$\Psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2y^2 - 1) e^{-y^2/2}$$

$$\Psi_3 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} (2y^3 - 3y) e^{-y^2/2}$$

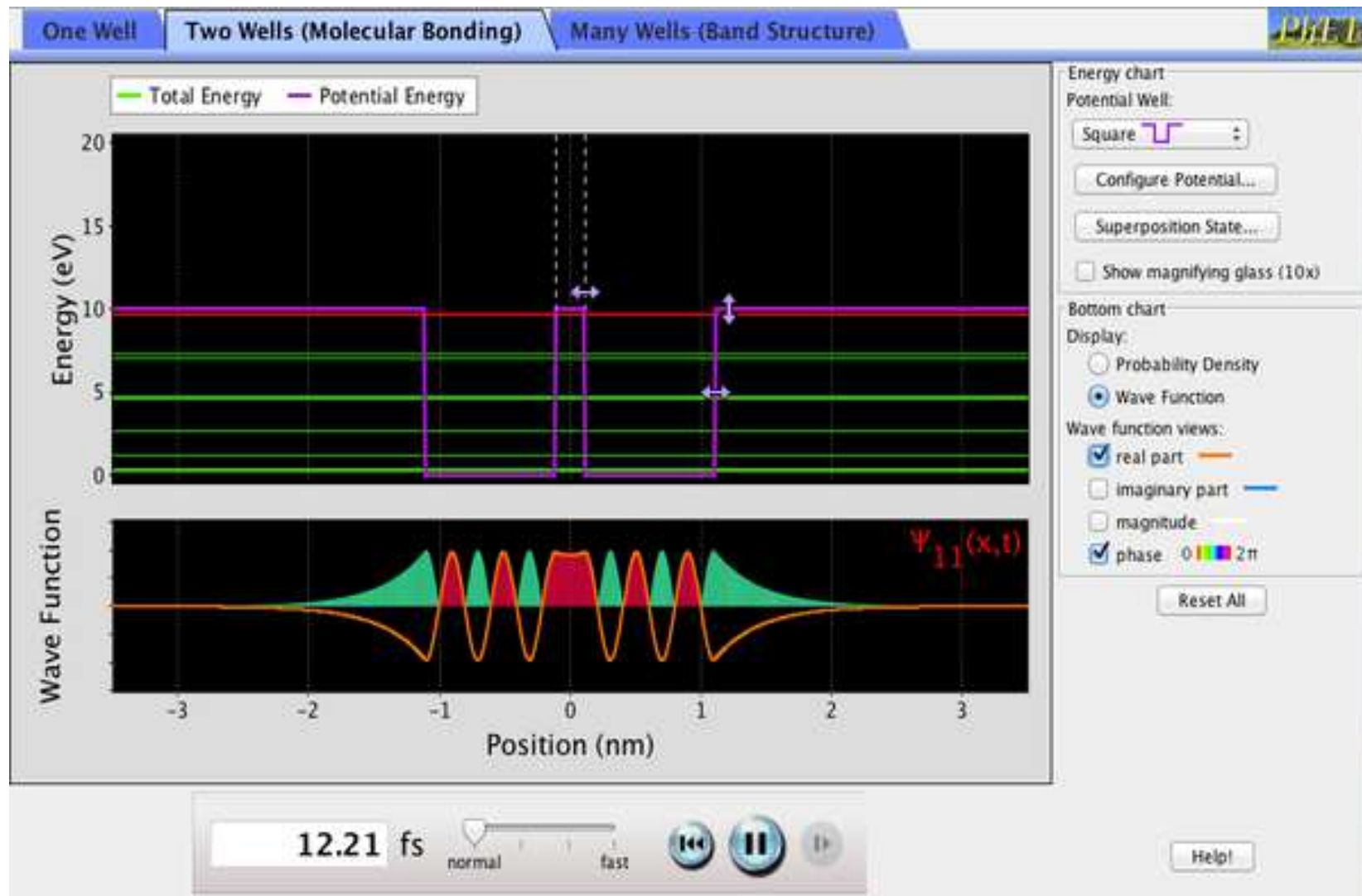
$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$y = \sqrt{\alpha} x$$



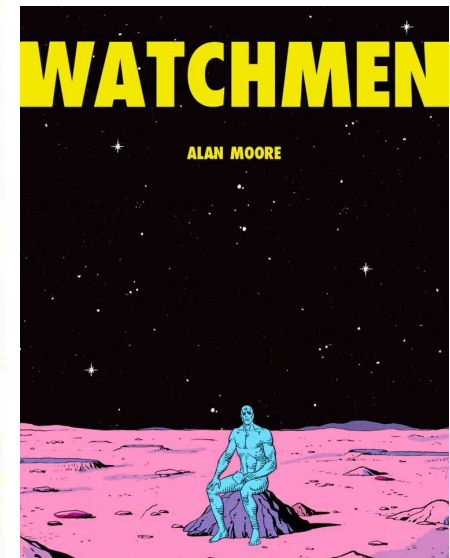
Resolva as questões 8, 9 e 12 da lista 2.

Vamos estudar algumas soluções do Oscilador Harmônico Quânticos com um applet.
“Estados quânticos ligados”



<https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/bound-states>





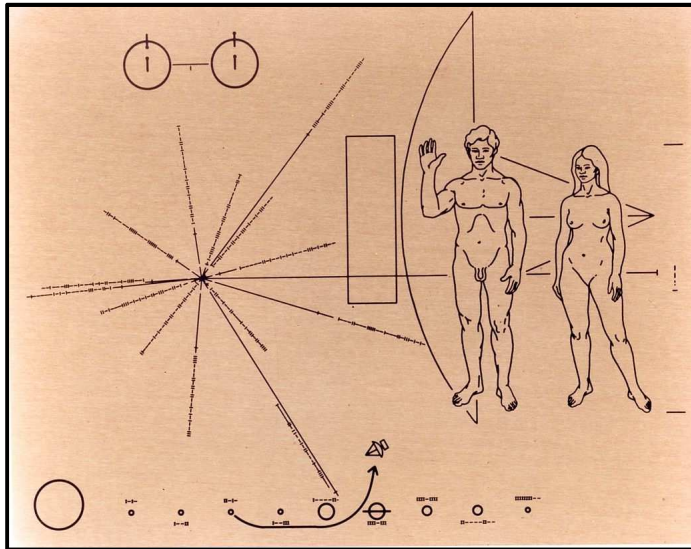
Watchmen

Alan Moore

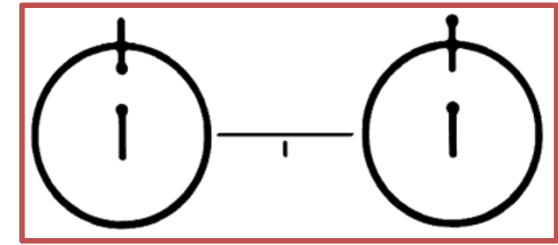
"Todos nós somos fantoches, Laurie. Eu apenas sou um fantoche que consegue ver os fios."

(Doutor Manhattan)

Placa Pioneer



Placa enviada na Pioneer 10 (1972) e 11 (1973).

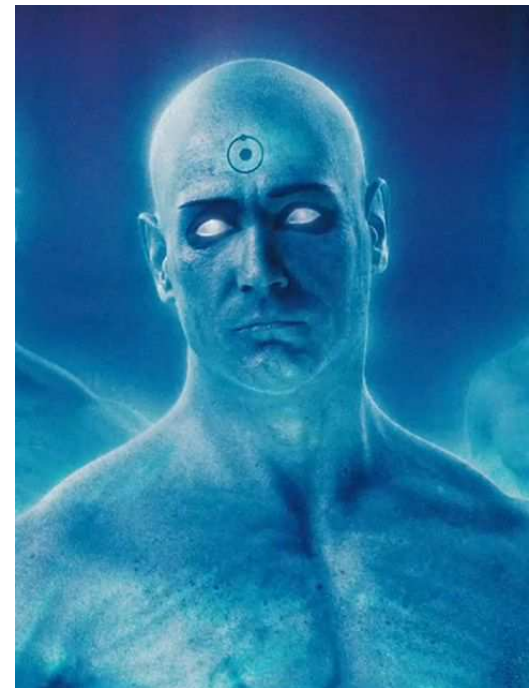
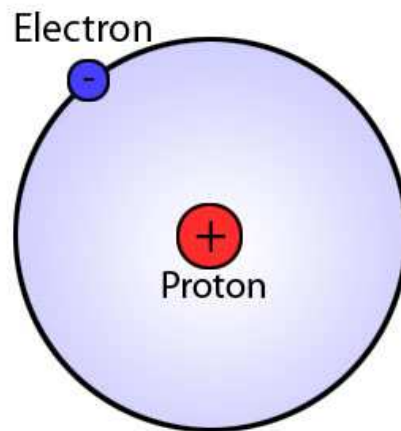
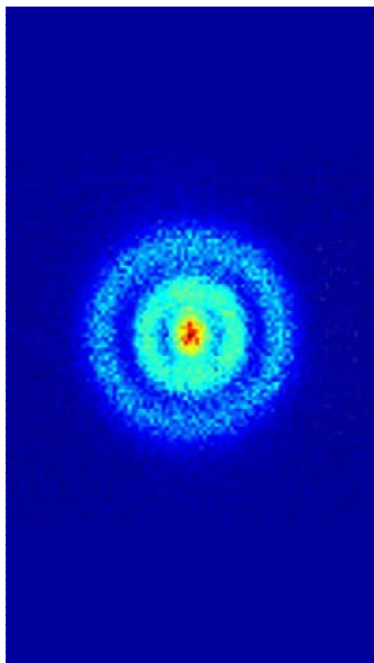


Na parte superior esquerda da placa está representado o conceito fundamental que estabelece o padrão de distância e tempo, que é utilizado para decodificar todos os outros conceitos representados na placa.

Os projetistas acreditaram que como o hidrogênio é o elemento mais abundante do universo, ele seria bem conhecido por uma outra civilização. Com isso em mente eles inscreveram dois átomos de hidrogênio cada um em um diferente nível de energia.

O comprimento de onda dessa onda eletromagnética é de aproximadamente 21 cm e serve como o padrão de comprimento e o período da onda é de aproximadamente 0,7 ns, que serve como padrão de tempo. Logo abaixo dos átomos há um pequeno traço vertical representando o número binário 1, que é associado a essas dimensões de tempo e espaço.

A solução para a equação de Schrodinger do Átomo de Hidrogênio



Equação de Schrodinger em 3 Dimensões

A equação de Schrodinger em coordenadas cartesianas. Neste caso, consideramos potenciais que não dependem do tempo.

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

A solução para esta equação pode ser escrito da seguinte forma:

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

E a probabilidade de encontrar a partícula em uma certa posição (x,y,z) é dada por:

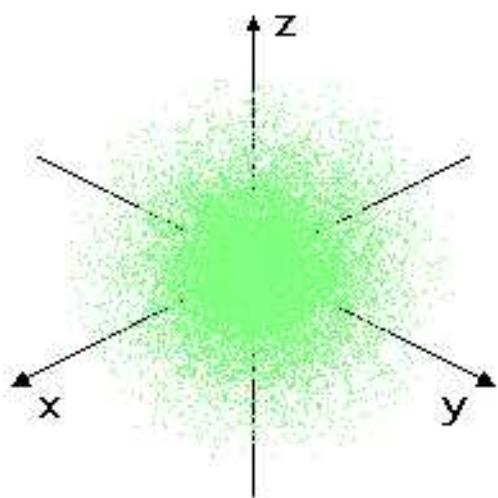
$$P(x,y,z)=\psi^*(x,y,z)\psi(x,y,z)$$

Sistemas de coordenadas para a equação de Schrodinger em 3 dimensões.

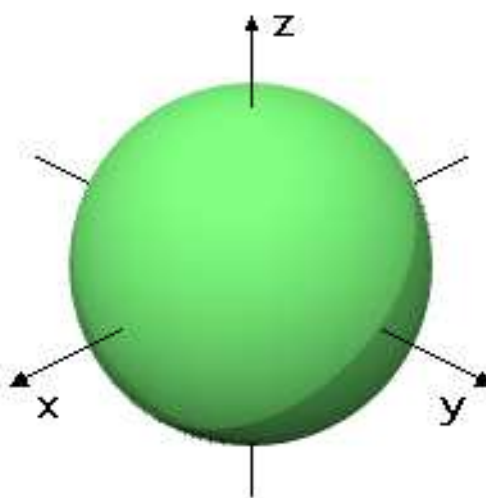
Para problemas em mais de uma dimensão é conveniente escolher um sistema de coordenadas que seja mais adequado para a situação, ou seja, um que permita obter a solução em sua forma mais simples. Em geral, observamos as simetrias existentes no problema para definir o sistema de coordenadas mais “natural”.

Exemplo: No poço infinito (cúbico) em 3 D, o sistema de coordenadas que aproveita melhor das simetrias do problema é o cartesiano.

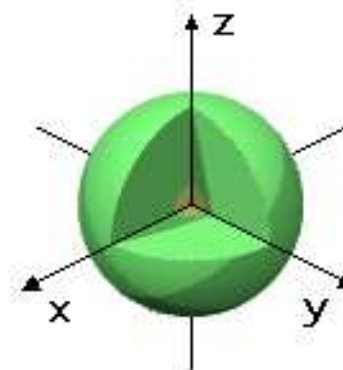
No caso do átomo de Hidrogênio, que iremos tratar nesta aula, o sistema mais adequado é o sistema de coordenadas esféricas.



Orbital s ($\ell=0, m_\ell=0$)



$n=1$ (H)

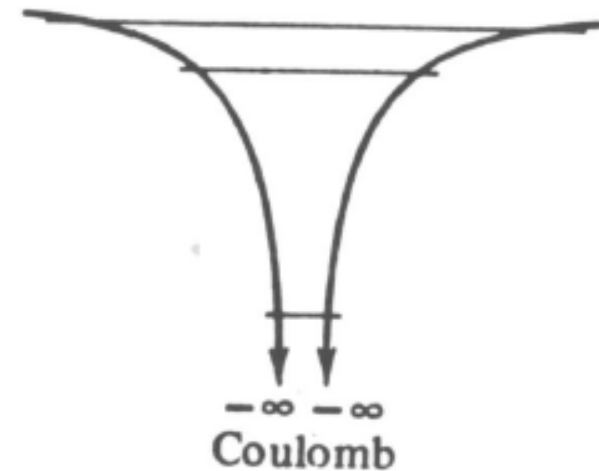


Átomo de Hidrogênio

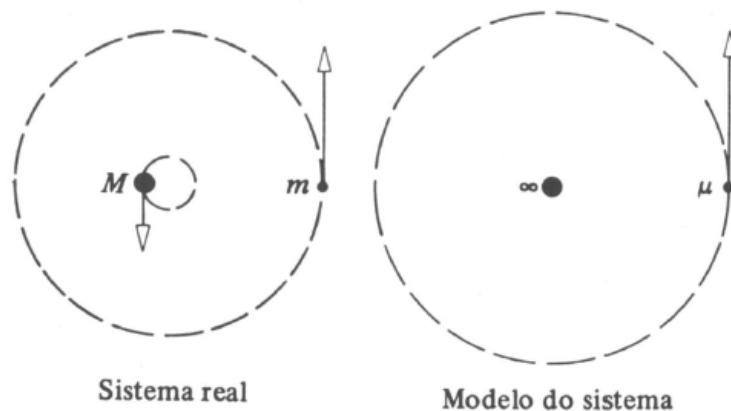
Vamos considerar um potencial muito similar ao do átomo de verdade. Contudo, iremos supor que o próton do átomo está parado no centro (com massa infinita) e o elétron age como uma partícula isolada sob a influência de um potencial:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad \text{Onde} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Este é um potencial confinante, se compararmos com o que foi visto antes, também teremos estados ligados neste caso:



Como na teoria de Bohr, incluímos o Z , que é 1 para o Hidrogênio. Observe que pode-se levar em conta o movimento do núcleo, substituindo a massa do elétron pela massa reduzida levando em conta a massa do núcleo:

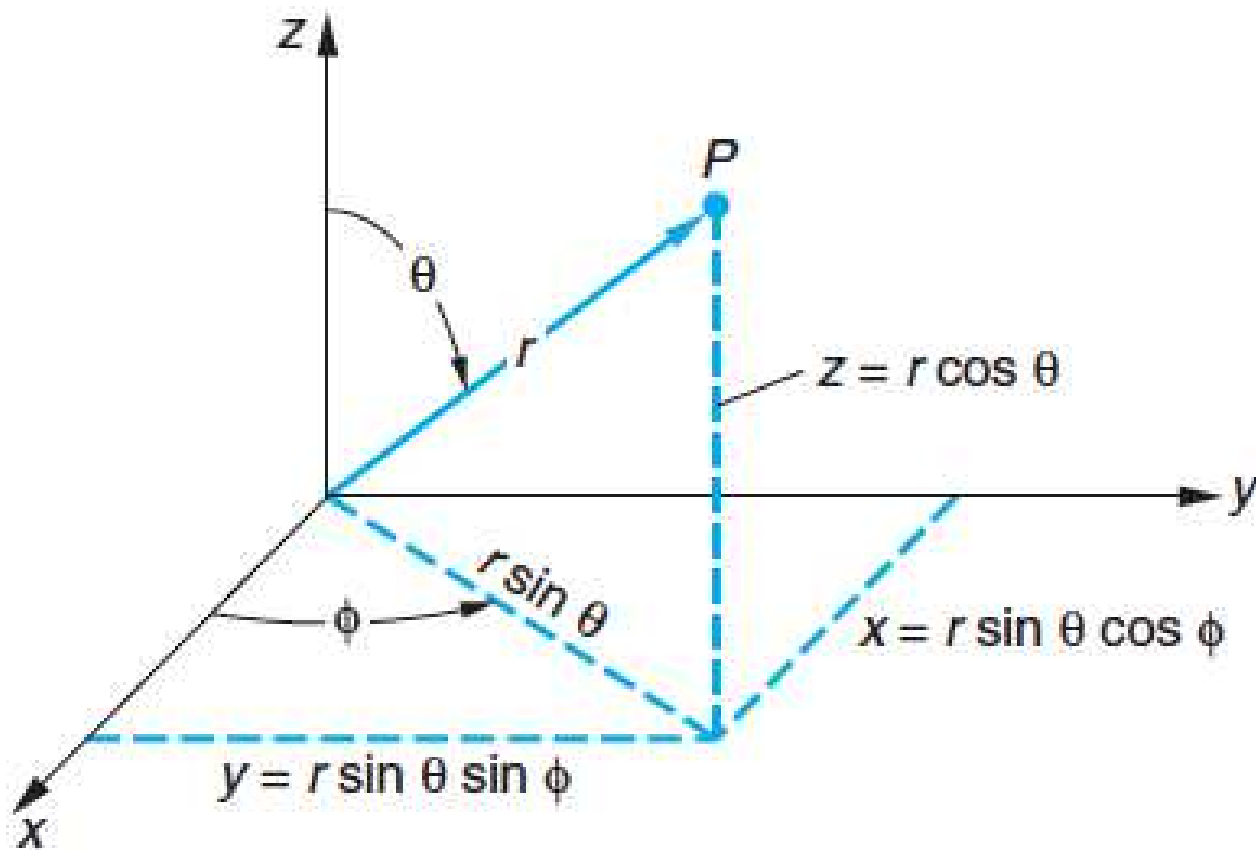


$$\mu = m_e / (1 + m_e / M_N)$$

A equação de Schrodinger (independente do tempo) em 3 dimensões para uma partícula de massa μ é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = E\psi$$

Como dito antes, para este problema é mais adequado escrever esta equação em termos das coordenadas esféricas:



A relação entre coordenadas cartesianas e esféricas é dada por:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

O intervalo de variação das coordenadas esféricas é:

$$0 \leq r \leq \infty$$

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

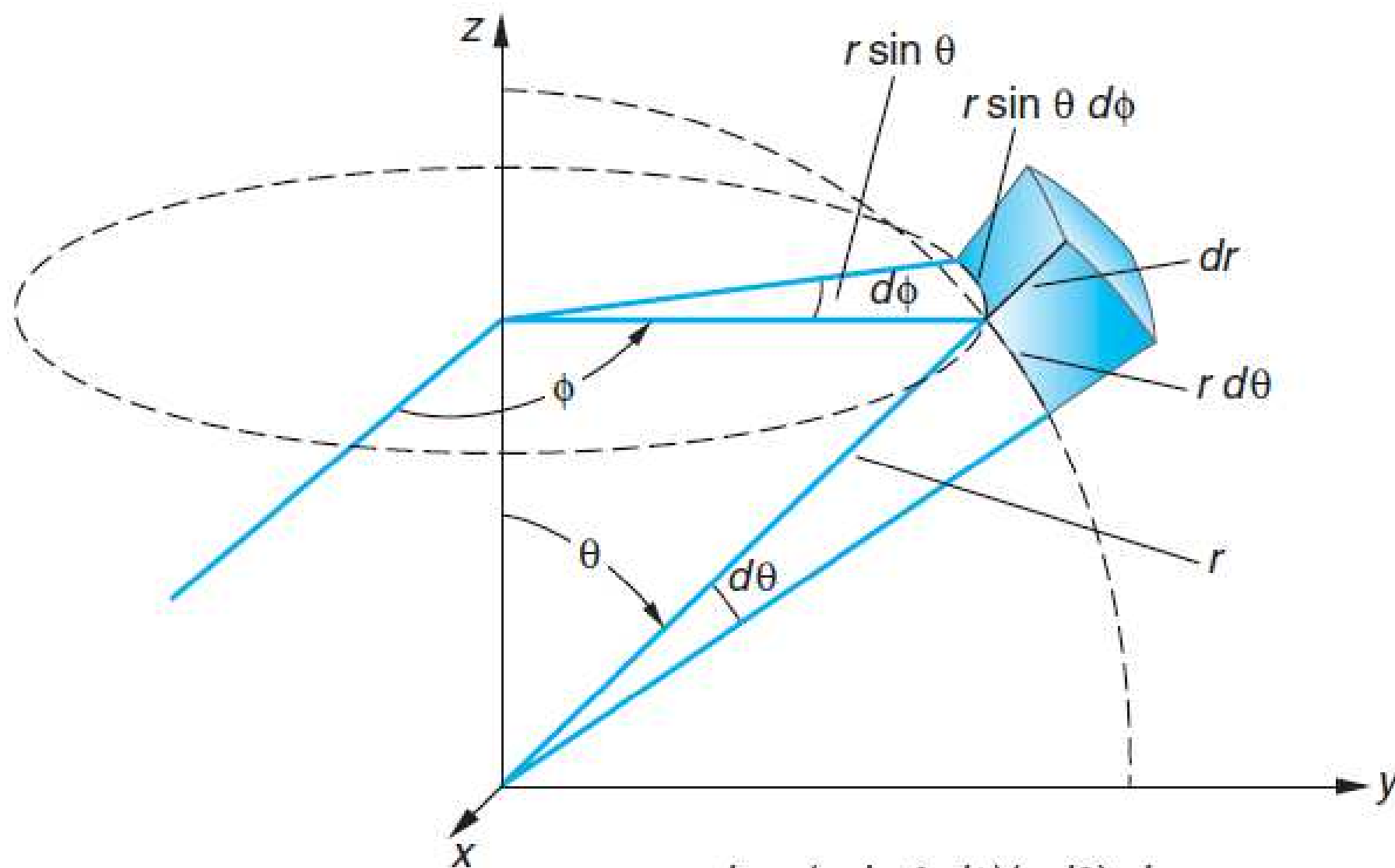
$$0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Assim, devemos escrever:

$$\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \theta, \varphi)$$

Os operadores envolvendo coord. Cartesianas são escritos em esféricas desta forma:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$



$$d\tau = (r \sin \theta d\phi)(r d\theta) dr$$

$$= r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

Utilizando estas transformações podemos mostrar que **o Laplaciano** em coord. cartesianas:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Pode ser escrito em coord. Esféricas:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Os detalhes desse calculo pode ser visto por completo, por exemplo, em **Física Quântica de Eiseberg & Resnick**

A equação de Schrodinger pode ser escrita como:

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

Apesar do aspecto complicado da equação, podemos obter soluções relativamente simples devido a simetria do potencial que depende apenas da variável r.

Podemos utilizar o método de separação de variáveis:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) f(\theta) g(\varphi)$$

Assim:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \left[f g \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R g}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{df}{d\theta} \right) + \frac{R f}{\sin^2\theta} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} \right] + V(r) R f g = E R f g$$

Se dividimos toda a equação por ψ e rearranjarmos os termos:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{f \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{df}{d\theta} \right) + \frac{1}{g \sin^2\theta} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} \right] + V(r) = E$$

$$\frac{1}{g} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} = -\sin^2\theta \left[\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{f \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{df}{d\theta} \right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (V(r) - E) \right]$$

Dessa forma, isolamos o único termo dependente de φ do lado esquerdo. Como já vimos antes, ambos os lados devem ser então constantes. Por conveniência, vamos escrever esta constante como: $-m^2$

Assim obtemos:

$$\frac{1}{g} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} = -m^2$$

$$\frac{d^2 g}{d\varphi^2} = -m^2 g$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{f \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{df}{d\theta} \right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = \frac{m_l^2}{\sin^2\theta}$$

A última equação ainda pode ser reescrita como:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{f \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{df}{d\theta} \right)$$

Novamente, os dois lados da equação devem ser constantes, que escreveremos como:

$$l(l + 1)$$

Mais tarde, veremos a conveniência de escrever desta forma.

Portanto, temos três equações para resolver:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) = 0 \\ -\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} f(\theta) \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} f(\theta) - l(l+1) f(\theta) = 0 \\ \frac{d^2}{d\varphi^2} g(\varphi) + m^2 g(\varphi) = 0 \end{array} \right.$$

Para solucionar para o átomo de hidrogênio devemos considerar o potencial columbiano.

O número quântico m

A última equação tem solução:

$$g_m(\varphi) = e^{im\varphi}$$

Essa função deve satisfazer a relação:

$$\begin{aligned} g_m(\varphi) &= g_m(\varphi + 2\pi) \\ e^{im\varphi} &= e^{im\varphi + i2\pi m} \end{aligned}$$

Que pode ser definida como: $e^{i2\pi m} = 1$ E nos leva que m deve assumir os valores:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

O número quântico l

A equação:

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} f(\theta) \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} f(\theta) - l(l+1) f(\theta) = 0$$

As soluções desta equação são dadas pelos **polinômios de Legendre** e são da forma:

$$f_{lm}(\theta) = \frac{(\sin\theta)^{|m|}}{2^l l!} \left[\frac{d}{d(\cos\theta)} \right]^{l+|m|} (\cos^2\theta - 1)^l$$

Com: $l \geq |m|$ (condição necessária para a existência da solução)

Ou seja:

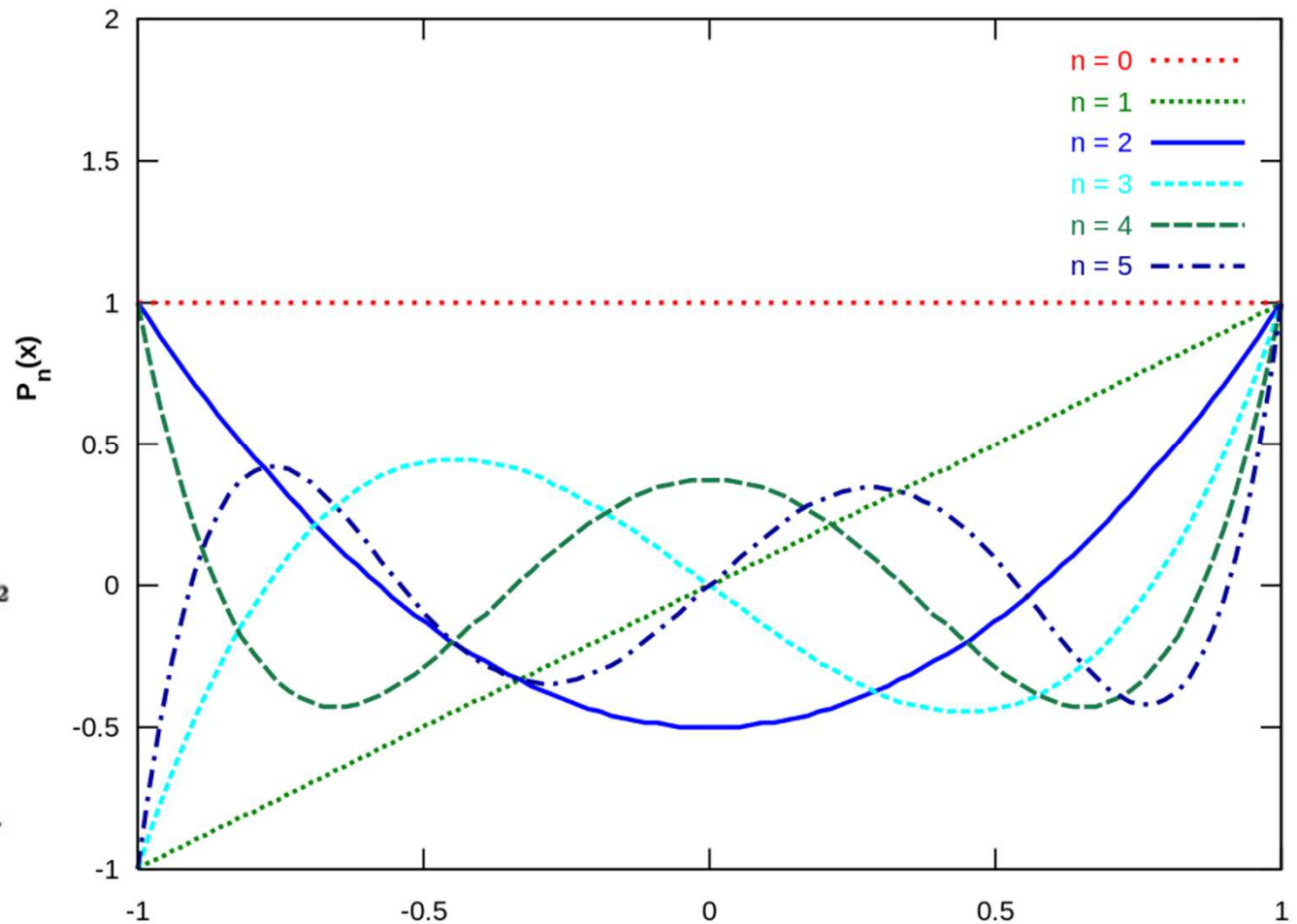
$$m = -l, (-l+1), (-l+2), \dots, 0, 1, 2, \dots, l$$

l é o número quântico do momento angular orbital.

Polinômios de Legendre

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} f(\theta) \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} f(\theta) - l(l+1) f(\theta) = 0$$

$$\begin{aligned} P_0^0(x) &= 1 \\ P_1^0(x) &= x \\ P_1^1(x) &= -(1-x^2)^{1/2} \\ P_2^0(x) &= \frac{1}{2}(3x^2-1) \\ P_2^1(x) &= -3x(1-x^2)^{1/2} \\ P_2^2(x) &= 3(1-x^2) \\ P_3^0(x) &= \frac{1}{2}x(5x^2-3) \\ P_3^1(x) &= \frac{3}{2}(1-5x^2)(1-x^2)^{1/2} \\ P_3^2(x) &= 15x(1-x^2) \\ P_3^3(x) &= -15(1-x^2)^{3/2} \\ P_4^0(x) &= \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3) \\ P_4^1(x) &= \frac{5}{2}x(3-7x^2)(1-x^2)^{1/2} \\ P_4^2(x) &= \frac{15}{2}(7x^2-1)(1-x^2) \\ P_4^3(x) &= -105x(1-x^2)^{3/2} \\ P_4^4(x) &= 105(1-x^2)^2 \\ P_5^0(x) &= \frac{1}{8}x(63x^4-70x^2+15). \end{aligned}$$



Em nosso caso, $x = \cos(\theta)$

$$f_{lm}(\theta) = \frac{(\sin\theta)^{|m|}}{2^l l!} \left[\frac{d}{d(\cos\theta)} \right]^{l+|m|} (\cos^2\theta - 1)^l$$

Como vimos, quando o potencial depende apenas de r , podemos afirmar que qualquer problema com esta simetria esférica terá para as variáveis angulares as soluções que encontramos e que são denominadas **Harmônicos Esféricos**

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

Table 7-1 Spherical harmonics

$\ell = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\ell = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$
$\ell = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$

Números Quânticos ℓ e m – quantização de momento angular

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

$$p_r = \mu \left(\frac{dr}{dt} \right) \quad \text{and} \quad p_t = \mu r \left(\frac{dA}{dt} \right)$$

$$(p_r^2)_{\text{op}} = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

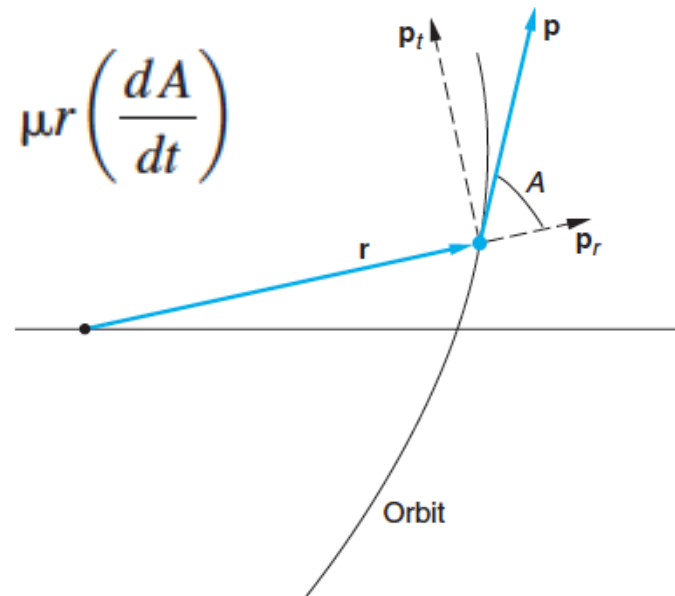


Figure 7-3 The orbit of a classical particle with $V = V(r)$ lies in a plane perpendicular to \mathbf{L} . The components of the momentum \mathbf{p} parallel and perpendicular to \mathbf{r} are \mathbf{p}_r and \mathbf{p}_t , respectively. The momentum \mathbf{p} makes an angle A with the displacement \mathbf{r} .

$$(L^2)_{\text{op}} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

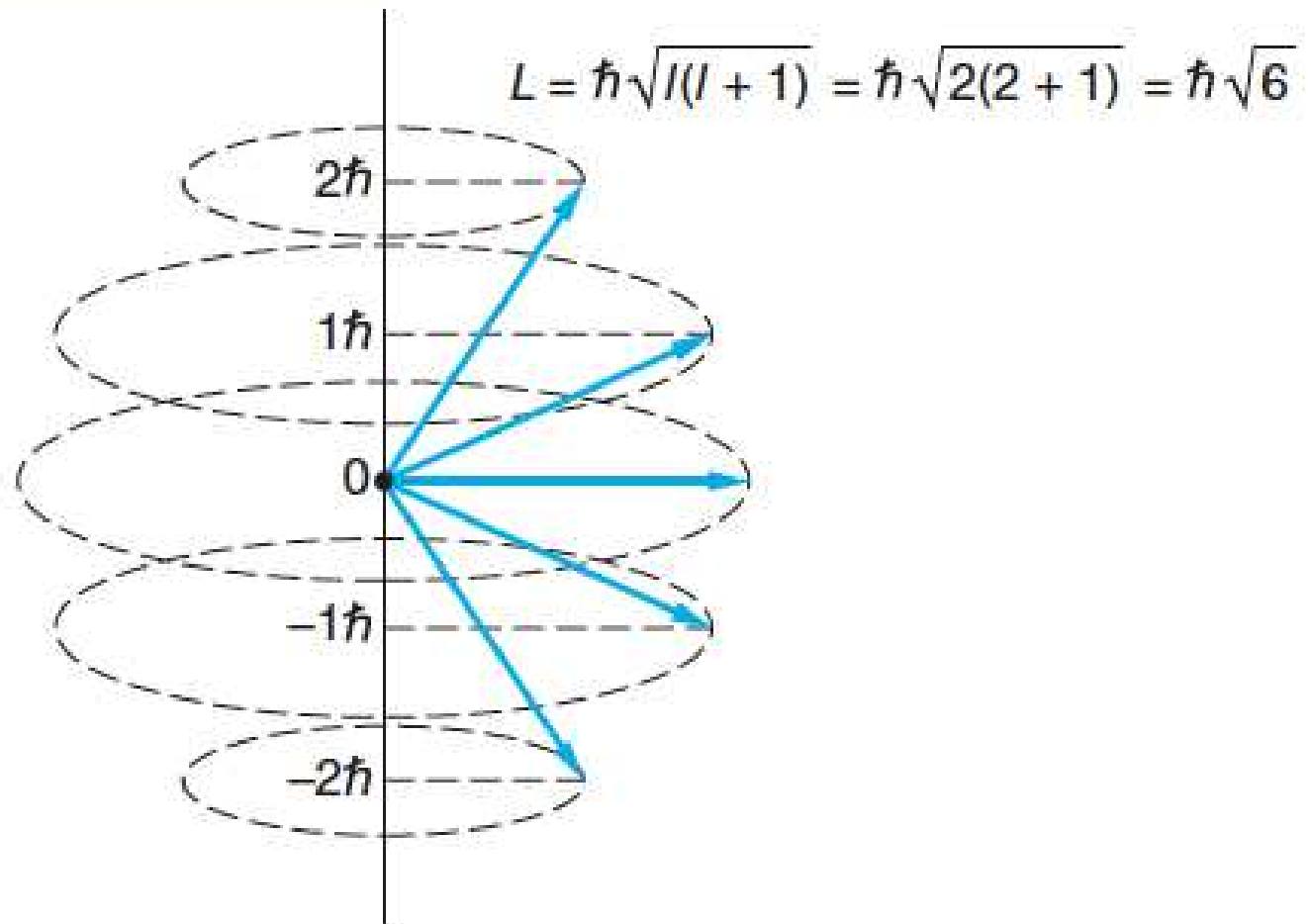
$$(L^2)_{\text{op}} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

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

Números Quânticos l e m – momentos angulares

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

$$L_z = m\hbar \quad \text{for } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$



O número quântico n – quantização de energia

A equação radial com o potencial de Coulomb:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R = E R$$

Como as soluções das equação radial depende do número quântico l, então as denominamos como:

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

Onde L_{n+l}^{2l+1} são os polinômios de Laguerre.

Além disso, o fato da constante dependente de l ser da forma l(l+1) vem da simetria rotacional das soluções. Para cada valor de n, tem-se n-1 valores de l associado.

$$l \leq n - 1$$
$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$$

Polinômios de Laguerre

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R = E R$$

$$L_1^1(\rho) = -1$$

$$L_2^1(\rho) = 2\rho - 4$$

$$L_2^2(\rho) = 2$$

$$L_3^1(\rho) = -3\rho^2 + 18\rho - 18$$

$$L_3^2(\rho) = -6\rho + 18$$

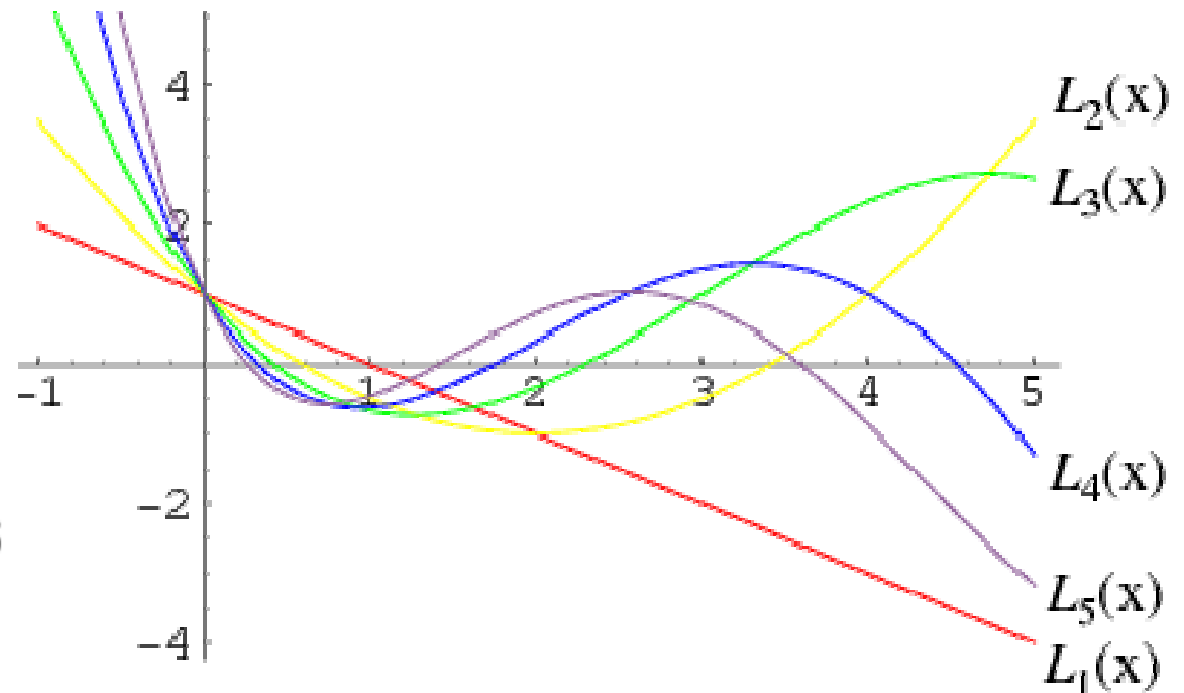
$$L_3^3(\rho) = -6$$

$$L_4^1(\rho) = 4\rho^3 - 48\rho^2 + 144\rho - 96$$

$$L_4^2(\rho) = 12\rho^2 - 96\rho + 144$$

$$L_4^3(\rho) = 24\rho - 96$$

$$L_4^4(\rho) = 24$$



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

Portanto, para cada valor de energia dada para um certo n , temos $n-1$ estados com diferente l .

$$\begin{cases} R_{n,0} \\ R_{n,1} \\ R_{n,2} \\ \vdots \\ R_{n,n-1} \end{cases}$$

As funções até $n=3$ são mostradas na próxima tabela

Table 7-2 Radial functions for hydrogen

$n = 1$	$\ell = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$
$n = 2$	$\ell = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$
	$\ell = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
$n = 3$	$\ell = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$
	$\ell = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0} \right) e^{-r/3a_0}$
	$\ell = 2$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$

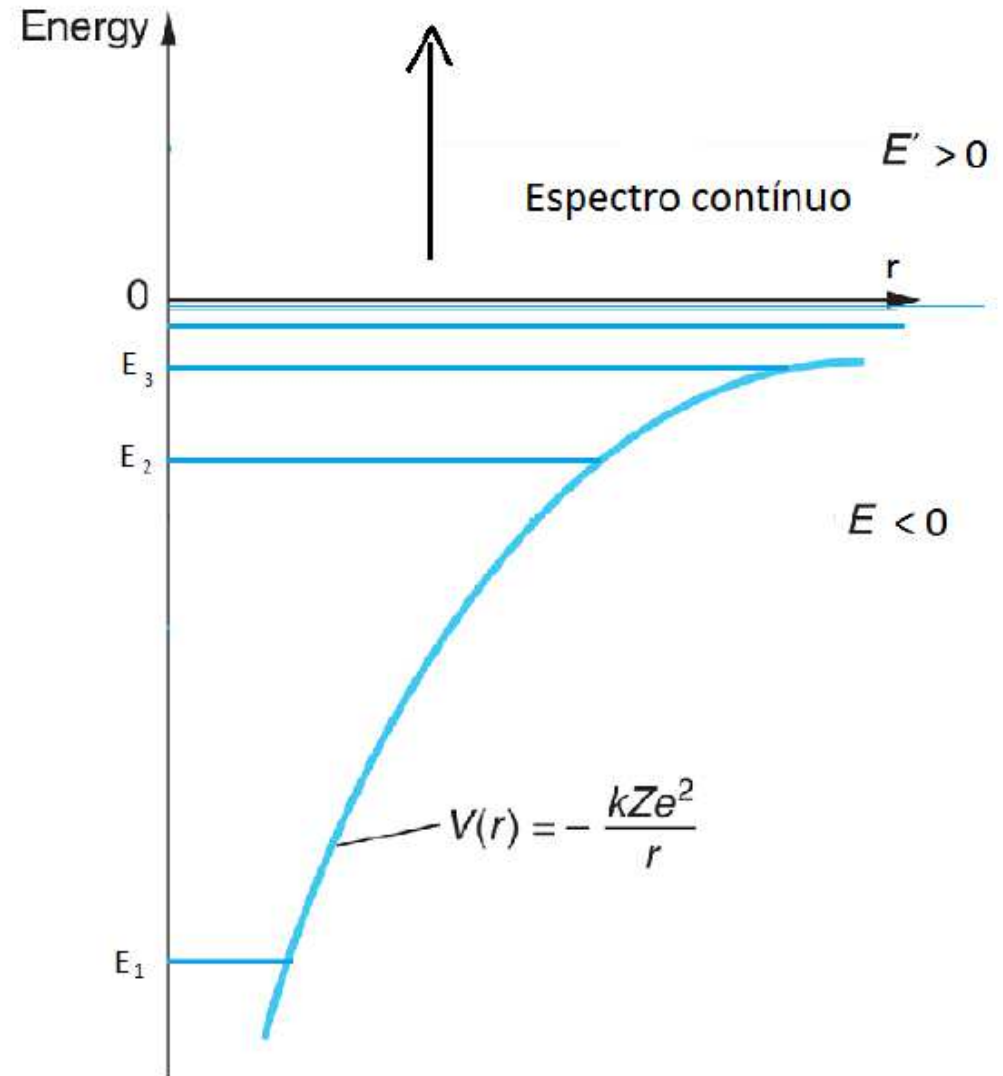
$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

Os autovalores de energia desta equação correspondem aos obtidos no átomo de Bohr:

$$E_n = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$
$$\approx -\frac{Z^2}{n^2} \times 13.6 \text{ eV}$$

$$n = 1, 2, 3, ..$$

n é o número quântico principal.



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:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

$$m = -l, (-l + 1), (-l + 2), \dots, 0, 1, 2, \dots, l$$

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

Exercício para casa

Mostre por substituição direta na equação de Schrodinger radial que as funções $R_{1,0}(r)$ e $R_{2,1}(r)$ são soluções do **estado fundamental e do primeiro estado excitado** para o átomo de Hidrogênio.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R = E R$$

Funções de onda do estado estacionário do átomo de Hidrogênio

A solução dos estados estacionários são dadas por:

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

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

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = 1$$

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

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

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

Em coordenadas esféricas um elemento de volume é dado por:

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

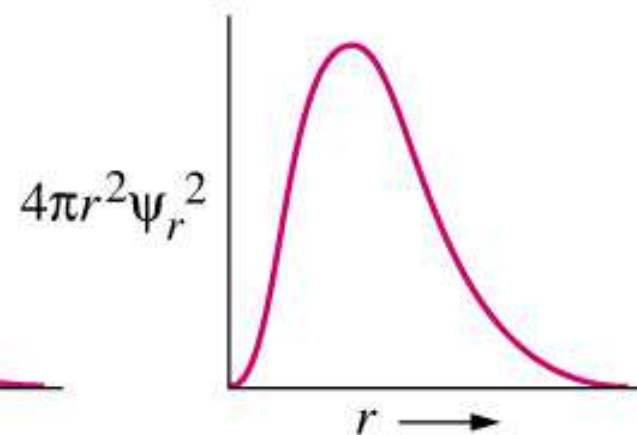
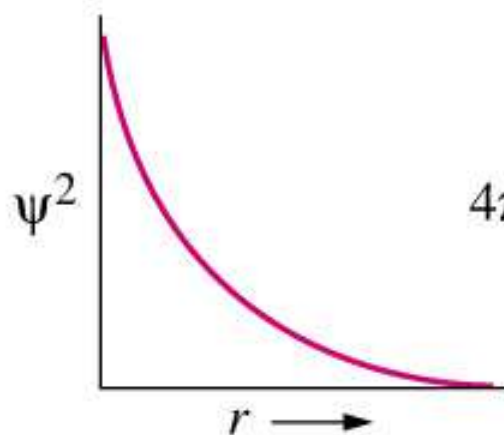
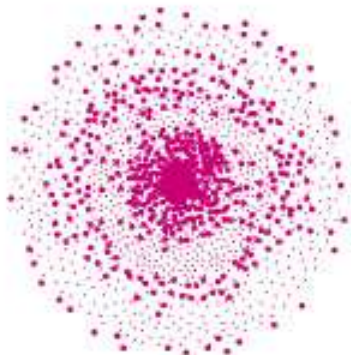
Estado Fundamental do átomo de Hidrogênio

O estado de menor energia (estado fundamental) é dado por:

$$n = 1, l = 0, m = 0$$

E a função do estado fundamental é:

$$\begin{aligned}\psi_{100}(r, \theta, \varphi) &= R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) \\ &= \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \times \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}\end{aligned}$$



Distribuição de probabilidade

Para um estado $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ a distribuição de probabilidade é dada por:

$$\begin{aligned} P_{nlm}(r, \theta, \varphi) &= |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 \\ &= |R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \\ &= R_{nl}^2(r) |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \end{aligned}$$

Como os esféricos harmonicos tem a propriedade: $\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = 1$

Podemos escrever:

$$\begin{aligned} \int_{\text{todo espaço}} P_{nlm}(r, \theta, \varphi) dV &= \\ \int_{\text{todo espaço}} P_{nlm}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi &= 1 \end{aligned}$$

Para obter uma função de probabilidade que só depende da variável r :

$$\begin{aligned} \int_{\text{todo espaço}} R_{nl}^2(r) |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi &= \\ \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^2 dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 &= \\ &= \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1 \end{aligned}$$

Definimos assim:

$$p_{nl}(r) = R_{nl}^2(r) r^2$$

Que possui a propriedade:

$$\int_0^\infty p_{nl}(r) \, dr = 1$$

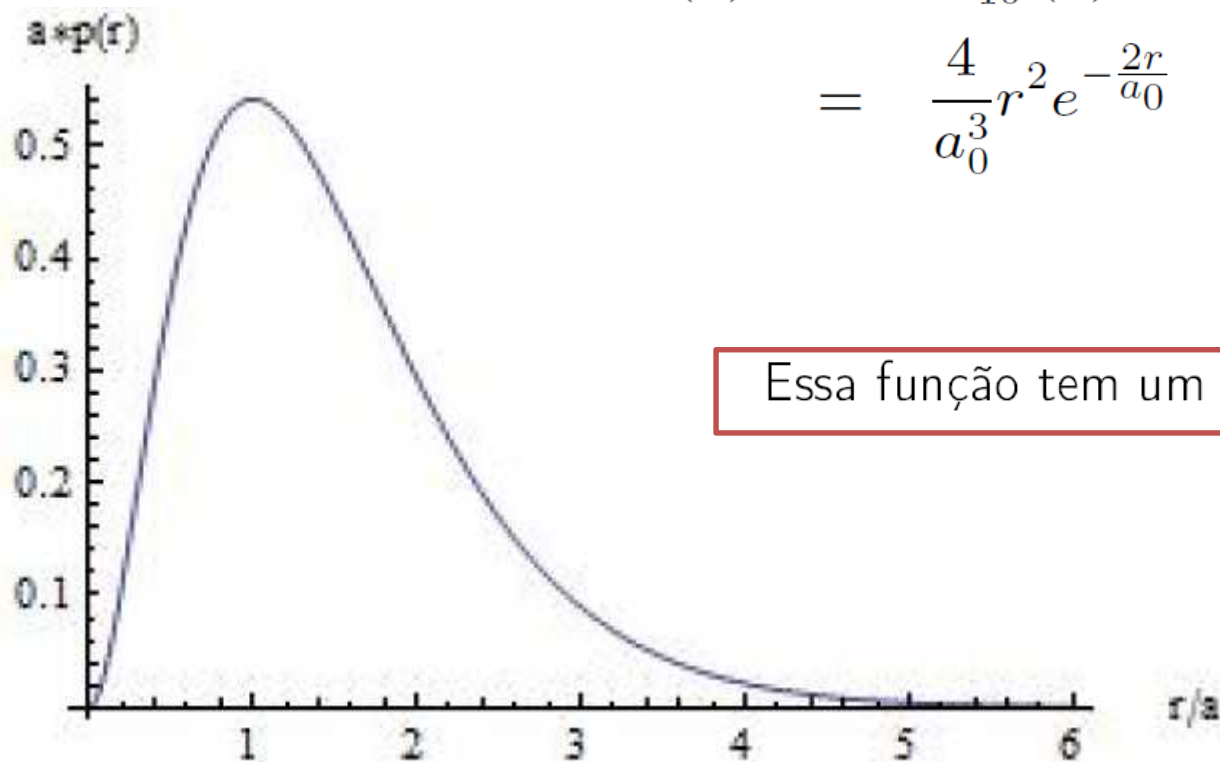
Densidade de Probabilidade para o Estado Fundamental

Por exemplo, para os estado fundamental escrevemos:

$$\begin{aligned} P_{100}(r, \theta, \varphi) &= |\psi_{100}(r, \theta, \varphi)|^2 \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \end{aligned}$$

E a distribuição de probabilidade radial é dada por:

$$\begin{aligned} p_{10}(r) &= R_{10}^2(r) r^2 \\ &= \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \end{aligned}$$



Essa função tem um máximo em $r = a_0$.

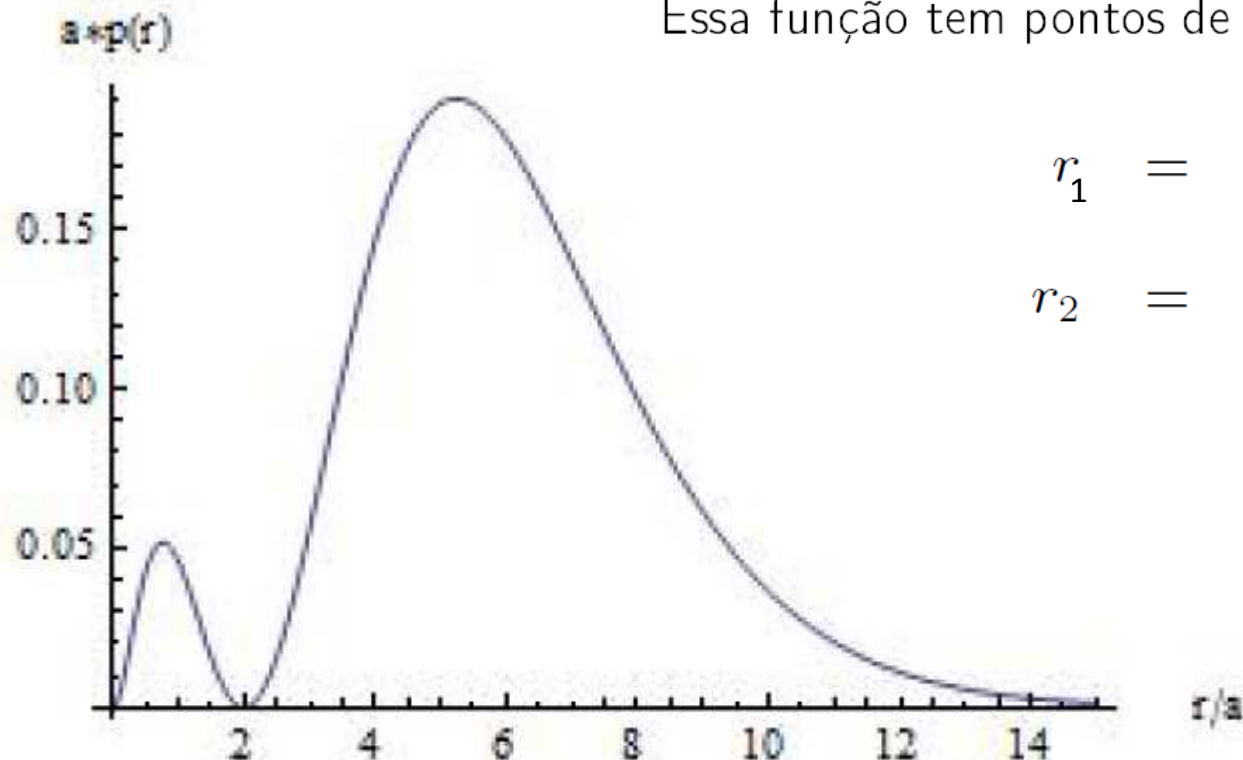
Determine os máximos da densidade de probabilidade para o estado do átomo de Hidrogênio com $n=2$ e $l=0$.

Para o estado $n = 2$, $l = 0$, $m = 0$ tem-se

$$\begin{aligned} p_{20}(r) &= R_{20}^2(r) r^2 \\ &= \frac{1}{2a_0^3} r^2 \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \end{aligned}$$

Essa função tem pontos de máximo em

$$\begin{aligned} r_1 &= (3 - \sqrt{5}) a_0 \approx 0.77a_0 \\ r_2 &= (3 + \sqrt{5}) a_0 \approx 5.23a_0 \end{aligned}$$



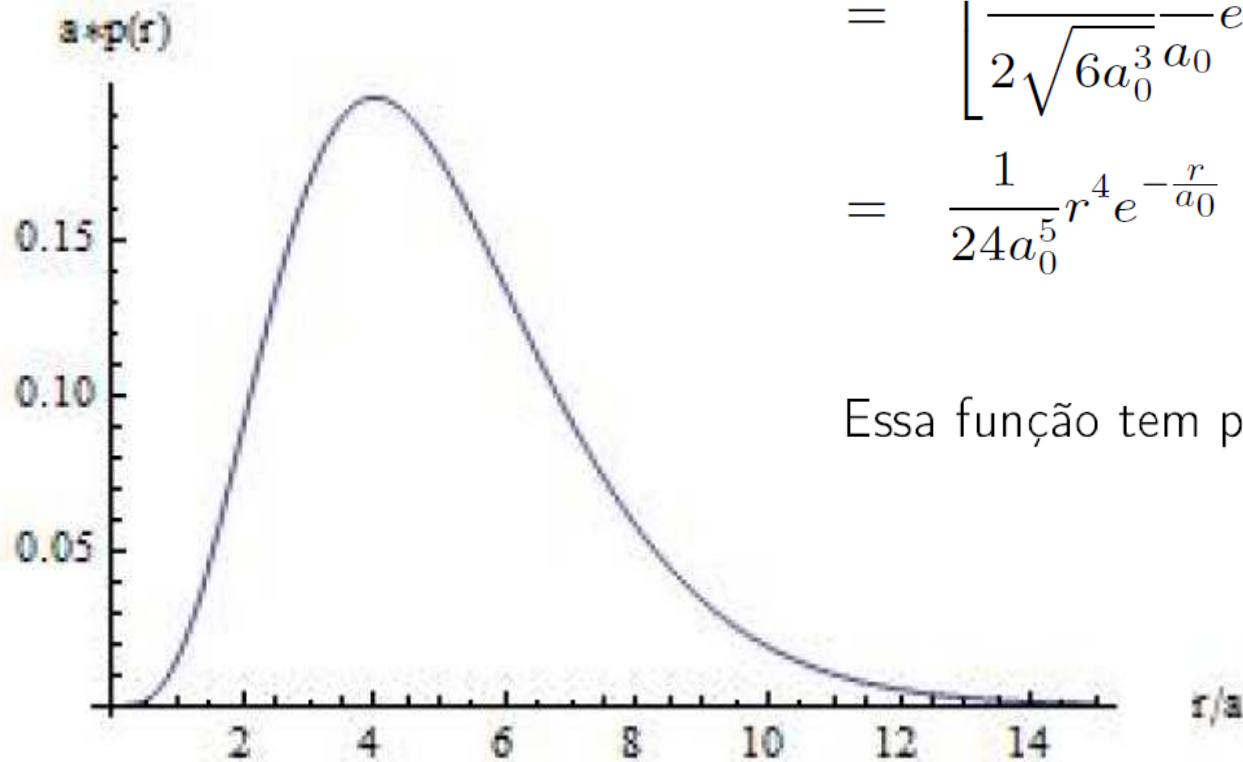
Determine os máximos da densidade de probabilidade para o estado do átomo de Hidrogênio com $n=2$ e $l = 1$.

Para o estado $n = 2$, $l = 1$, para os três valores $m = -1, 0, 1$ tem-se

$$\begin{aligned} p_{21}(r) &= R_{21}^2(r) r^2 \\ &= \left[\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \right]^2 r^2 \\ &= \frac{1}{24a_0^5} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} \end{aligned}$$

Essa função tem pontos de máximo em

$$r = 4a_0$$



Resolva as questões 27, 29 e 30 da lista 2.

Exercício para casa

Valores médios e variância radial.

Considerando o **estado fundamental** do átomo de Hidrogênio. Determine os valores das grandezas:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r p_{nl}(r) dr$$

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^{\infty} r^2 p_{nl}(r) dr$$

Calcule também a variância radial dada por: $\sigma_r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2$

Discuta qual o significado físico de cada um dos valores calculados e também como estes valores se relacionam com o valor mais provável determinado em aula para o estado fundamental

Para a solução deste problema precisamos resolver integrais do tipo:

$$\int_0^{+\infty} r^m e^{-\frac{r}{\alpha}} dr = ? \quad \text{Com } m = 1, 2, 3, \dots$$

Este tipo de problema pode ser resolvido por partes. Pode-se mostrar que:

$$\int_0^{+\infty} r^m e^{-\frac{r}{\alpha}} dr = m! \alpha^{m+1}, m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Isso pode ser verificado por indução. Veja nota de aula no site.

Obs: O valor obtido acima só é válido nestes limites de integração definidos, caso a integral seja requisitada para valores r_1 e r_2 diferentes dos dados acima, a integral deve ser calculada para estes limites específicos.

Degenerescência

A energia do elétron no átomo de Hidrogênio não dependem dos números quânticos l e m

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0 n^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

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

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

Obs: Nesta aula, ainda não iremos tratar do spin, mas para o elétron o spin poderá assumir dois valores distintos e isso resulta em $2.n^2$ estados degenerados.

Qual é a função de onda do estado com $n=2$, $l=1$ e $m=-1$? Quantos estados degenerados temos para $n=2$ (sem levar em conta o spin)?

Para o estado $n = 2, l = 1, m = -1$ A função de onda é:

$$\begin{aligned}\psi_{2,1,-1} &= R_{2,1}(r) Y_{1,-1}(\theta, \varphi) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^3} r e^{-\frac{r}{2a_0}} \times \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi} \\ &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^3} r e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta e^{-i\varphi}\end{aligned}$$

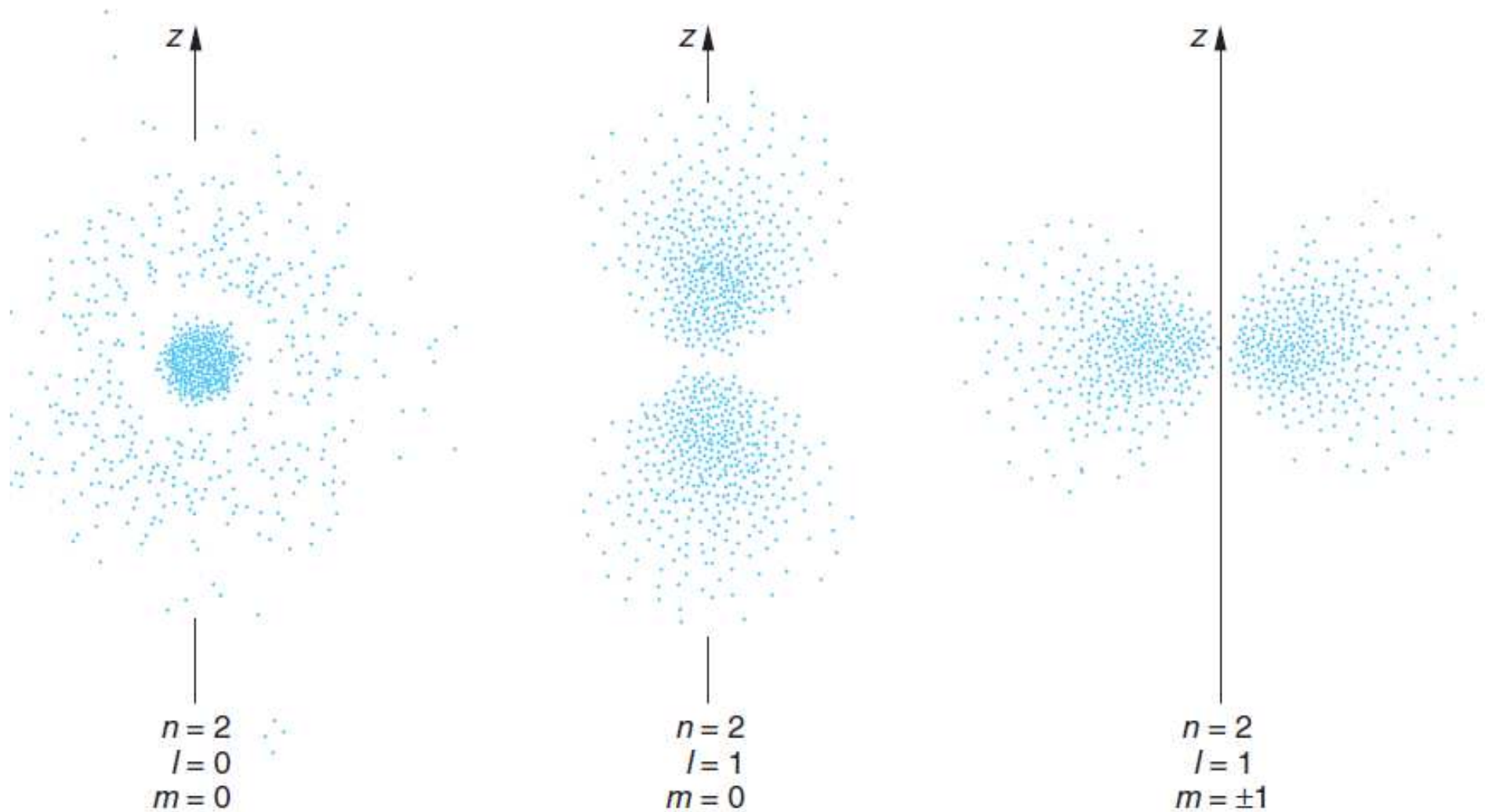
Observe que a energia depende apenas do número quântico n , portanto para cada estado com $n > 1$, teremos estados degenerados. Assim, para $n=2$ temos

$$n = 2 \Rightarrow \begin{cases} l = 0, m = 0 \\ l = 1 \Rightarrow \begin{cases} m = -1 \\ m = 0 \\ m = 1 \end{cases} \end{cases} \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi_{2,0,0} = R_{2,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \varphi) \\ \psi_{2,1,-1} = R_{2,1}(r) Y_{1,-1}(\theta, \varphi) \\ \psi_{2,1,0} = R_{2,1}(r) Y_{1,0}(\theta, \varphi) \\ \psi_{2,1,1} = R_{2,1}(r) Y_{1,1}(\theta, \varphi) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{TOTAL DE 4} \\ \text{ESTADOS} \end{array}$$

(Ainda não discutimos o spin!)

$$E_2 = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{4} = \frac{E_1}{4}$$

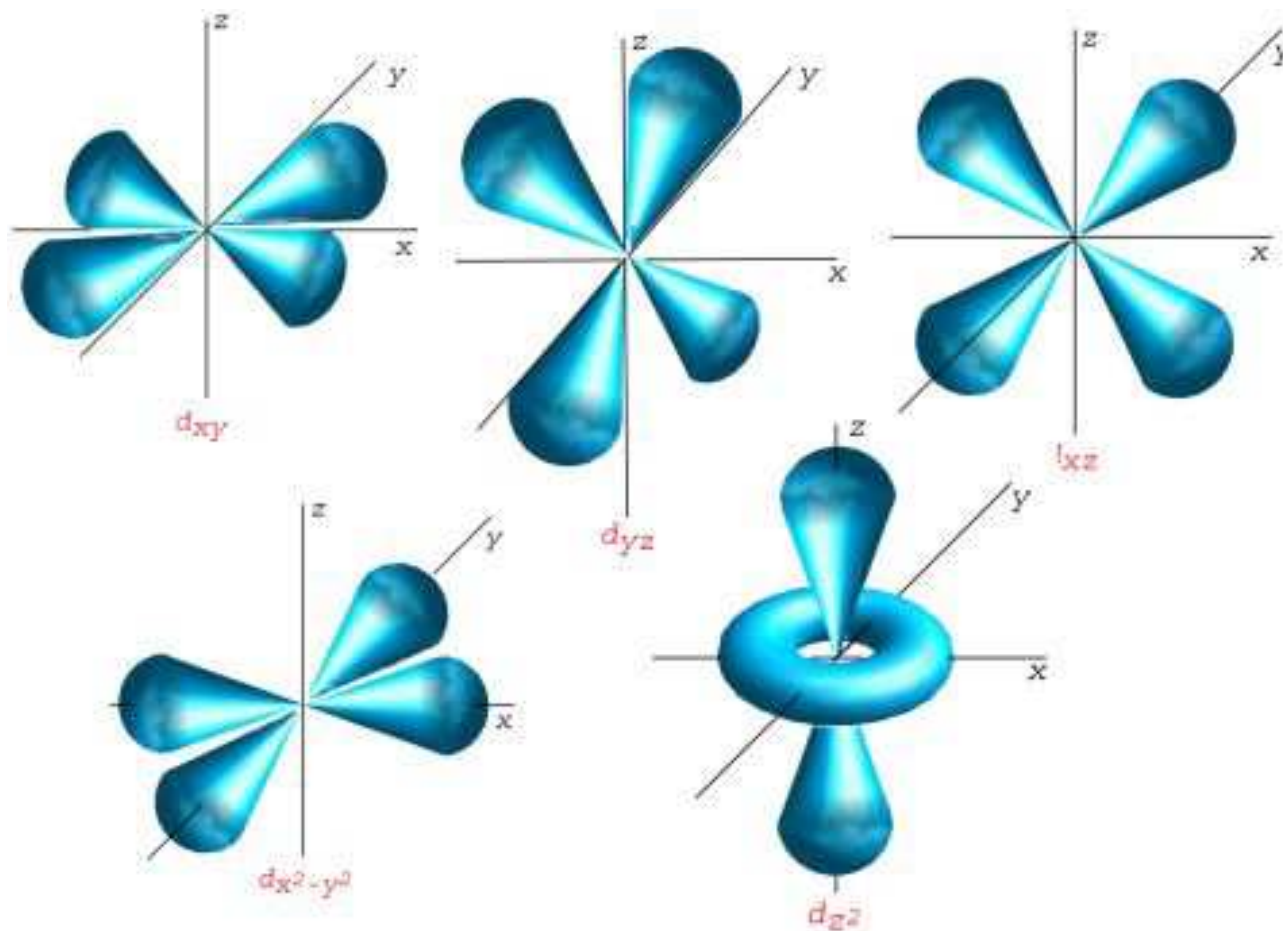
Distribuição de densidade de probabilidade para funções de onda com $n = 2$



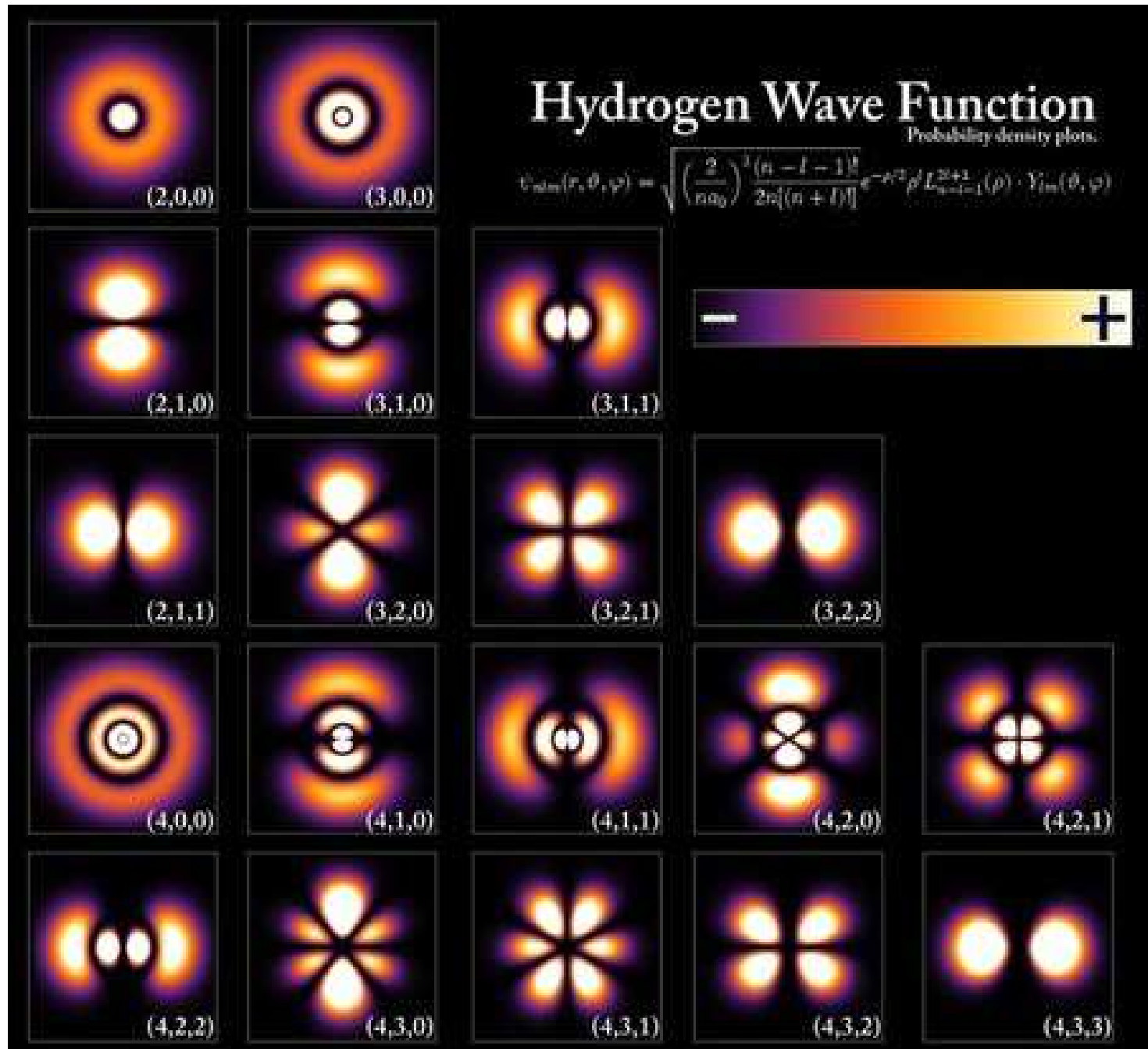
Todos estes estados tem o **mesmo** valor de energia.

Na próxima aula, discutiremos sobre a representação gráfica das funções de onda do átomo de Hidrogênio:

Os Orbitais



Diferentes orbitais para o átomo de UM elétron



Na aula de hoje (19/11/19)

- Equação de Schrodinger em três dimensões;
- O cubo quântico (coordenadas cartesianas);
- O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas);
- Separação de variáveis;
- A quantização de Momento Angular e Energia.

Na próxima aula (26/11/19)

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



Perguntas, dúvidas, comentários, aflições?

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 1)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
1	24/09 (Ter)	1	Apresentação a disciplina; Evidências experimentais da teoria quântica : radiação do Corpo Negro.
	---	---	-----
2	01/10 (Ter)	2	Evidências experimentais da teoria quântica: efeito foto-elétrico, efeito Compton, espectros atômicos
	03/10 (Qui)	3	Modelos atômicos, Modelo quântico de Bohr, Experimento de Franck-Hertz, Hipótese de de Broglie e ondas de matéria.
3	08/10 (Ter)	4	Revisitando ondas; interferência (fótons e elétrons) e interferômetros; dualidade onda-partícula e princípio de complementaridade; Princípio de incerteza de Heisenberg.
	---	---	-----
4	15/10 (Ter)	5	Interferômetros e fótons únicos, polarização da luz, postulados da física quântica e notação de Dirac
	17/10 (Qui)	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	22/10 (Ter)	7	Mecânica Quântica Ondulatória, Determinação eurística da Equação de Schrodinger, propriedades da equação de Schrodinger e funções de ondas.
	---	---	-----
6	29/10 (Ter)	P1	Primeira Avaliação
	31/10 (Qui)	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)	10	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 princípios de informação quântica. Requisitos essenciais de um computador quântico.
9	19/11 (Ter)	12	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.
	---	---	-----
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
	---	---	-----
12	10/12 (Ter)	Psub\REC	Avaliação Substitutiva ou Avaliação de Recuperação
13			
	14 a 21/9		Lançamento de conceitos e faltas