

Capítulo 41 Estrutura Atômica

RODRIGO ALVES DIAS

Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

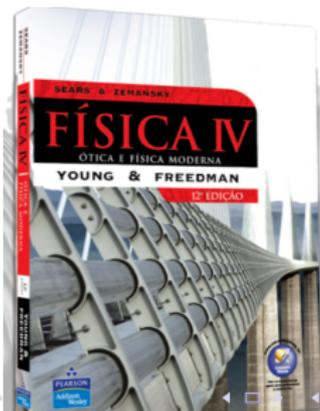
Livro texto: Física 3 - Eletromagnetismo

Autores: Sears e Zemansky

Edição: 12^a

Editora: Pearson - Addison and Wesley

20 de agosto de 2013



Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como descrever os estados de um átomo de hidrogênio em termos de números quânticos.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como descrever os estados de um átomo de hidrogênio em termos de números quânticos.
- ▶ De que forma os campos magnéticos afetam o movimento orbital dos elétrons.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como descrever os estados de um átomo de hidrogênio em termos de números quânticos.
- ▶ De que forma os campos magnéticos afetam o movimento orbital dos elétrons.
- ▶ Como sabemos que os elétrons são dotados de momento angular intrínseco.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como descrever os estados de um átomo de hidrogênio em termos de números quânticos.
- ▶ De que forma os campos magnéticos afetam o movimento orbital dos elétrons.
- ▶ Como sabemos que os elétrons são dotados de momento angular intrínseco.
- ▶ A maneira de analisar a estrutura de átomos com muitos elétrons.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como descrever os estados de um átomo de hidrogênio em termos de números quânticos.
- ▶ De que forma os campos magnéticos afetam o movimento orbital dos elétrons.
- ▶ Como sabemos que os elétrons são dotados de momento angular intrínseco.
- ▶ A maneira de analisar a estrutura de átomos com muitos elétrons.
- ▶ Como raios X emitidos por átomos revelam sua estrutura interna.

Quantização do momento angular orbital

- ▶ O vetor momento angular é definido por:
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}.$$

Quantização do momento angular orbital

- ▶ O vetor momento angular é definido por:
 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.
- ▶ O operador momento linear é definido por: $\vec{p} = -i\hbar\nabla$.

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

Quantização do momento angular orbital

- ▶ O vetor momento angular é definido por:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}.$$

- ▶ O operador momento linear é definido por: $\vec{p} = -i\hbar\nabla$.

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

- ▶ O operador momento angular será,

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Quantização do momento angular orbital

▶ O vetor momento angular é definido por:
 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

▶ O operador momento linear é definido por: $\vec{p} = -i\hbar\nabla$.

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

▶ O operador momento angular será,

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

▶ Em coordenadas polares $x = r \sin \theta \cos \phi$,
 $y = r \sin \theta \sin \phi$ e $z = r \cos \theta$.

$$L_x = -i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y = -i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

▶ Os valores possíveis do módulo do momento angular L são determinados por:

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (l = 0, 1, 2, \dots, n-1)$$

Número quântico orbital

Quantização do momento angular orbital

- Os valores permitidos para os componentes do vetor \vec{L} , digamos L_z são:

$$L_z = \hbar m_l, \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

Número quântico magnético

- Em coordenadas polares $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$ e $z = r \cos \theta$.

$$L_x = -i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cotg \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y = -i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cotg \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

- Os valores possíveis do módulo do momento angular L são determinados por:

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (l = 0, 1, 2, \dots, n-1)$$

Número quântico orbital

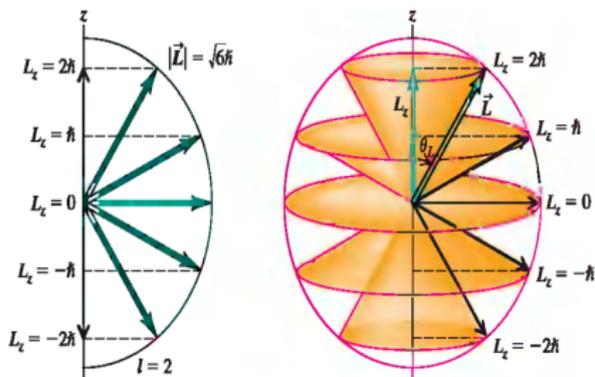
Quantização do momento angular orbital

- Os valores permitidos para os componentes do vetor \vec{L} , digamos L_z são:

$$L_z = \hbar m_l, \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

Número quântico magnético

- A componente L_z nunca pode ser igual a L (a menos que ambos sejam nulos).



$$\theta_L = \arccos \frac{L_z}{L}$$

- Em coordenadas polares $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$ e $z = r \cos \theta$.

$$L_x = -i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cotg \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y = -i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cotg \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

- Os valores possíveis do módulo do momento angular L são determinados por:

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (l = 0, 1, 2, \dots, n-1)$$

Número quântico orbital

- Para $l = 2$, $m_l = 0, \pm 1, \pm 2$
 $L = \sqrt{6}\hbar$, $L_z = 2\hbar$ e $\theta_L = 35,3^\circ$.

- A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Como a energia potencial é esfericamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Como a energia potencial é esfericamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- ▶ Usaremos essa simetria, fazendo $\psi(x,y,z) \rightarrow \psi(r,\theta,\phi)$.

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Como a energia potencial é esfericamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- ▶ Usaremos essa simetria, fazendo $\psi(x,y,z) \rightarrow \psi(r,\theta,\phi)$.

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

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

- ▶ Como a energia potencial é esféricamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- ▶ Usaremos essa simetria, fazendo $\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \theta, \phi)$.

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

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

- ▶ Como a energia potencial é esfericamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- ▶ Usaremos essa simetria, fazendo $\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \theta, \phi)$.

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

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\bar{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi$$

$$\bar{L}_{op}^2(\theta, \phi) \psi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Como a energia potencial é esfericamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- ▶ Usaremos essa simetria, fazendo $\psi(x,y,z) \rightarrow \psi(r,\theta,\phi)$.

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

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta,\phi)}{r^2}\psi$$

$$\vec{L}_{op}^2(\theta,\phi)\psi = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)T(\theta)P(\phi)$$

└ O Átomo de Hidrogênio

- A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

- Como a energia potencial é esfericamente simétrica, dependendo somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- Usaremos essa simetria, fazendo $\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \theta, \phi)$.

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

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi$$

$$\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) \psi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)T(\theta)P(\phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

- A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi$$

$$\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) \psi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) T(\theta) P(\phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

- A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o átomo de Hidrogênio é,

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi$$

$$\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) \psi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) T(\theta) P(\phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

$$\frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

$$\frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$\left[\frac{1}{T} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) - C \sin^2 \theta \right] = -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) + \frac{\tilde{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \tilde{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

$$\frac{1}{TP} \tilde{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$\left[\frac{1}{T} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) - C \sin^2 \theta \right] = -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

$$\frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = -m_l^2 P(\phi)$$

$$P(\phi) = e^{-im_l \phi}$$

- As $T(\theta)$ e $P(\phi)$ devem ser periódicas.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

$$\frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$\left[\frac{1}{T} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) - C \sin^2 \theta \right] = -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

$$\frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = -m_l^2 P(\phi)$$

$$P(\phi) = e^{-im_l \phi}$$

► $T(\theta) = T(\theta + \pi)$ e $P(\phi) = P(\phi + 2\pi)$.

$$P(0) = P(2\pi)$$

$$\cos(m_l 2\pi) - i \sin(m_l 2\pi) = 1$$

► As $T(\theta)$ e $P(\phi)$ devem ser periódicas.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) + \frac{\vec{L}_{op}^2(\theta, \phi)}{r^2} \psi \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

$$\frac{1}{TP} \vec{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$\left[\frac{1}{T} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) - C \sin^2 \theta \right] = -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

$$\frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = -m_l^2 P(\phi)$$

$$P(\phi) = e^{-im_l \phi}$$

▶ $T(\theta) = T(\theta + \pi)$ e $P(\phi) = P(\phi + 2\pi)$.

$$P(0) = P(2\pi)$$

$$\cos(m_l 2\pi) - i \sin(m_l 2\pi) = 1$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

▶ As $T(\theta)$ e $P(\phi)$ devem ser periódicas.

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{R} \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = \frac{1}{TP} \tilde{L}_{op}^2(\theta, \phi) T(\theta) P(\phi) = C$$

$$\frac{1}{TP} \tilde{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$\left[\frac{1}{T} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) - C \sin^2 \theta \right] = -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

$$\frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = -m_l^2 P(\phi)$$

$$P(\phi) = e^{-im_l \phi}$$

$$\blacktriangleright T(\theta) = T(\theta + \pi) \text{ e } P(\phi) = P(\phi + 2\pi).$$

$$P(0) = P(2\pi)$$

$$\cos(m_l 2\pi) - i \sin(m_l 2\pi) = 1$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

► As $T(\theta)$ e $P(\phi)$ devem ser periódicas.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = CT(\theta)$$

↳ O Átomo de Hidrogênio

$$\frac{1}{TP} \tilde{L}_{op}^2(\theta, \phi) TP = \left[\frac{1}{T} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} \right] = C$$

$$\left[\frac{1}{T} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) - C \sin^2 \theta \right] = -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

$$\frac{\partial^2 P(\phi)}{\partial \phi^2} = -m_l^2 P(\phi)$$

$$P(\phi) = e^{-im_l \phi}$$

► $T(\theta) = T(\theta + \pi)$ e $P(\phi) = P(\phi + 2\pi)$.

$$P(0) = P(2\pi)$$

$$\cos(m_l 2\pi) - i \sin(m_l 2\pi) = 1$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

► As $T(\theta)$ e $P(\phi)$ devem ser periódicas.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = CT(\theta)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{C}{r^2} R(r)$$

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = CT(\theta)$$

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = CT(\theta)$$

- Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = C T(\theta)$$

► Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = CT(\theta)$$

- Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = C T(\theta)$$

- ▶ Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- ▶ Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
 ▶ Se $T(x) = (1 - x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = CT(\theta)$$

- Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
 ► Se $T(x) = (1 - x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.
 ► Logo, $T(x) = (1 - x^2)^{|m_l|/2} F(x)$ e assim,

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} - 2(m_l + 1)x \frac{\partial F(x)}{\partial x} + [C - m_l(m_l + 1)]F(x) = 0$$

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = C T(\theta)$$

- Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
 ► Se $T(x) = (1 - x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.
 ► Logo, $T(x) = (1 - x^2)^{|m_l|/2} F(x)$ e assim,

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} - 2(m_l + 1)x \frac{\partial F(x)}{\partial x} + [C - m_l(m_l + 1)] F(x) = 0$$

- Para uma solução com série de potência, $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$, obtemos a seguinte relação de recorrência,

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) = C T(\theta)$$

- Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
 ► Se $T(x) = (1 - x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.
 ► Logo, $T(x) = (1 - x^2)^{|m_l|/2} F(x)$ e assim,

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} - 2(m_l + 1)x \frac{\partial F(x)}{\partial x} + [C - m_l(m_l + 1)]F(x) = 0$$

- Para uma solução com série de potência, $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$, obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$a_{k+2} = \frac{(m_l + k)(m_l + k + 1) - C}{(k + 2)(k + 1)} a_k$$

Solução ▶ Para a parte angular em $T(\theta)$ Para, $x = \cos \theta$ temos $\partial x = -\sin \theta \partial \theta$ e $\sin^2 \theta = (1 - x^2)$ obtemos,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1 - x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- ▶ Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
- ▶ Se $T(x) = (1 - x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.
- ▶ Logo, $T(x) = (1 - x^2)^{|m_l|/2} F(x)$ e assim,

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} - 2(m_l + 1)x \frac{\partial F(x)}{\partial x} + [C - m_l(m_l + 1)]F(x) = 0$$

- ▶ Para uma solução com série de potência, $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$, obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$a_{k+2} = \frac{(m_l + k)(m_l + k + 1) - C}{(k + 2)(k + 1)} a_k$$

- ▶ Para limitar o polinômio em $k = k'$ fazemos $a_{k+2} = 0$ logo:
 $C = [m_l + k'][m_l + k' + 1]$ e definindo $l = m_l + k'$ e assim $C = l(l + 1)$.

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1-x^2) \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right] + \left[\frac{m_l^2}{(1-x^2)} - C \right] T(x) = 0$$

- ▶ Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
- ▶ Se $T(x) = (1-x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.
- ▶ Logo, $T(x) = (1-x^2)^{|m_l|/2} F(x)$ e assim,

$$(1-x^2) \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} - 2(m_l+1)x \frac{\partial F(x)}{\partial x} + [C - m_l(m_l+1)]F(x) = 0$$

- ▶ Para uma solução com série de potência, $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$, obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$a_{k+2} = \frac{(m_l+k)(m_l+k+1) - C}{(k+2)(k+1)} a_k$$

- ▶ Para limitar o polinômio em $k = k'$ fazemos $a_{k+2} = 0$ logo:
 $C = [m_l + k'] [m_l + k' + 1]$ e definindo $l = m_l + k'$ e assim $C = l(l+1)$.
- ▶ Temos $l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots$

Solução da parte angular em $T(\theta)$.

- ▶ Quando $x \rightarrow \pm 1$, temos uma singularidade que deve ser removida.
- ▶ Se $T(x) = (1 - x^2)^S F(x)$ obtemos $S = |m_l|/2$ para remover a singularidade.
- ▶ Logo, $T(x) = (1 - x^2)^{|m_l|/2} F(x)$ e assim,

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} - 2(m_l + 1)x \frac{\partial F(x)}{\partial x} + [C - m_l(m_l + 1)]F(x) = 0$$

- ▶ Para uma solução com série de potência, $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$, obtemos a seguinte relação de recorrência,

$$a_{k+2} = \frac{(m_l + k)(m_l + k + 1) - C}{(k + 2)(k + 1)} a_k$$

- ▶ Para limitar o polinômio em $k = k'$ fazemos $a_{k+2} = 0$ logo:
 $C = [m_l + k'][m_l + k' + 1]$ e definindo $l = m_l + k'$ e assim $C = l(l + 1)$.
- ▶ Temos $l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots$
- ▶ Logo, $T_{l, m_l}(\theta) = (\sin \theta)^{|m_l|} F_{l, m_l}(\cos \theta)$ onde, $F_{l, m_l}(\cos \theta)$ são os polinômios associados de Legendre.

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

► $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

- ▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$
- ▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

▶ Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

▶ Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

Solução da parte radial em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

▶ Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

$$f_0(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

▶ Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

$$f_0(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

$$\sum_{k=0}^N a_k r^k [k(k-1) - l(l+1)] = 0$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] R(r) = 0$$

$$\blacktriangleright \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \text{ e } \beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

\blacktriangleright Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

\blacktriangleright Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

$$f_0(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

$$\sum_{k=0}^N a_k r^k [k(k-1) - l(l+1)] = 0$$

$$k = l+1 \rightarrow f_0(r) \sim r^{l+1}$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

$$\blacktriangleright \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \text{ e } \beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

\blacktriangleright Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

\blacktriangleright Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

\blacktriangleright Para $r \rightarrow \infty$ $R(r) \rightarrow R_\infty(r) = f_\infty(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0 \quad \frac{\partial^2 f_\infty(r)}{\partial r^2} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_\infty(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

$$f_0(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

$$\sum_{k=0}^N a_k r^k [k(k-1) - l(l+1)] = 0$$

$$k = l+1 \rightarrow f_0(r) \sim r^{l+1}$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

▶ Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

▶ Para $r \rightarrow \infty$ $R(r) \rightarrow R_\infty(r) = f_\infty(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0 \quad \frac{\partial^2 f_\infty(r)}{\partial r^2} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_\infty(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_\infty(r)}{\partial r^2} + \alpha^2 f_\infty(r) = 0$$

$$f_\infty(r) \sim e^{-\alpha r}$$

$$f_0(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

$$\sum_{k=0}^N a_k r^k [k(k-1) - l(l+1)] = 0$$

$$k = l+1 \rightarrow f_0(r) \sim r^{l+1}$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ e $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$

▶ Impondo as cond. de cont. que $R(r)$ deve se manter finito para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

▶ Para $r \rightarrow 0$ $R(r) \rightarrow R_0(r) = f_0(r)/r$,

▶ Para $r \rightarrow \infty$ $R(r) \rightarrow R_\infty(r) = f_\infty(r)/r$,

$$r^2 \frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} + [\alpha^2 r^2 + \beta r - l(l+1)] f_0(r) = 0 \quad \frac{\partial^2 f_\infty(r)}{\partial r^2} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_\infty(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_0(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_0(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f_\infty(r)}{\partial r^2} + \alpha^2 f_\infty(r) = 0$$

$$f_\infty(r) \sim e^{-\alpha r}$$

$$f_0(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

$$R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$$

$$\sum_{k=0}^N a_k r^k [k(k-1) - l(l+1)] = 0$$

$$k = l+1 \rightarrow f_0(r) \sim r^{l+1}$$

Solução da parte radia em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

► $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

$$\frac{\partial^2 g_l(r)}{\partial r^2} + 2 \left(\frac{l(l+1)}{r} - \alpha \right) \frac{\partial g_l(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} (\beta - \alpha(l+1)) g_l(r) = 0$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

► $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

$$\frac{\partial^2 g_l(r)}{\partial r^2} + 2 \left(\frac{l(l+1)}{r} - \alpha \right) \frac{\partial g_l(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} (\beta - \alpha(l+1)) g_l(r) = 0$$

$$g_l(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \rightarrow b_{j+1} = \frac{2\alpha[j+l+1-\beta/(2\alpha)]}{(j+2l+2)(j+1)} b_j$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

► $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

$$\frac{\partial^2 g_l(r)}{\partial r^2} + 2 \left(\frac{l(l+1)}{r} - \alpha \right) \frac{\partial g_l(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} (\beta - \alpha(l+1)) g_l(r) = 0$$

$$g_l(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \rightarrow b_{j+1} = \frac{2\alpha[j+l+1-\beta/(2\alpha)]}{(j+2l+2)(j+1)} b_j$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

► $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

$$\frac{\partial^2 g_l(r)}{\partial r^2} + 2 \left(\frac{l(l+1)}{r} - \alpha \right) \frac{\partial g_l(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} (\beta - \alpha(l+1)) g_l(r) = 0$$

$$g_l(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \rightarrow b_{j+1} = \frac{2\alpha[j+l+1 - \beta/(2\alpha)]}{(j+2l+2)(j+1)} b_j$$

► Para limitar a série em $j = j'$ então $b_{j+1} = 0 \rightarrow j' + 1 + l = \frac{\beta}{2\alpha} = n$.

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

► $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

$$\frac{\partial^2 g_l(r)}{\partial r^2} + 2 \left(\frac{l(l+1)}{r} - \alpha \right) \frac{\partial g_l(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} (\beta - \alpha(l+1)) g_l(r) = 0$$

$$g_l(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \rightarrow b_{j+1} = \frac{2\alpha[j+l+1 - \beta/(2\alpha)]}{(j+2l+2)(j+1)} b_j$$

► Para limitar a série em $j = j'$ então $b_{j+1} = 0 \rightarrow j' + 1 + l = \frac{\beta}{2\alpha} = n$.

$$E_n = - \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

► Onde $n = l + 1$, e $R_{n,l}(r) = e^{-\alpha r} r^l g_{n,l}(r)$.

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left[\alpha^2 + \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

▶ $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, $\beta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $R(r) = r^l e^{-\alpha r} g_l(r)$

$$\frac{\partial^2 g_l(r)}{\partial r^2} + 2 \left(\frac{l(l+1)}{r} - \alpha \right) \frac{\partial g_l(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} (\beta - \alpha(l+1)) g_l(r) = 0$$

$$g_l(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \rightarrow b_{j+1} = \frac{2\alpha[j+l+1-\beta/(2\alpha)]}{(j+2l+2)(j+1)} b_j$$

▶ Para limitar a série em $j = j'$ então $b_{j+1} = 0 \rightarrow j' + 1 + l = \frac{\beta}{2\alpha} = n$.

$$E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

▶ Onde $n = l + 1$, e $R_{n,l}(r) = e^{-\alpha r} r^l g_{n,l}(r)$.

▶ Com isso temos a função de onda total,

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = AR_{n,l}(r) T_{l,m_l}(\theta) P_{m_l}(\phi)$$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$g_l(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \rightarrow b_{j+1} = \frac{2\alpha[j + l + 1 - \beta/(2\alpha)]}{(j + 2l + 2)(j + 1)} b_j$$

- ▶ Para limitar a série em $j = j'$ então $b_{j+1} = 0 \rightarrow j' + 1 + l = \frac{\beta}{2\alpha} = n$.

$$E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

- ▶ Onde $n = l + 1$, e $R_{n,l}(r) = e^{-\alpha r} r^l g_{n,l}(r)$.
- ▶ Com isso temos a função de onda total,

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = AR_{n,l}(r) T_{l,m_l}(\theta) P_{m_l}(\phi)$$

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = Ar^l e^{-\alpha r} (\sin \theta)^{|m_l|} e^{-im_l \phi} F_{l,m_l}(\cos \theta) g_{n,l}(r)$$

- ▶ $|m_l| = 0, 1, 2, 3, \dots$
- ▶ $l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots$
- ▶ $n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots$

Solução da parte radiais em $R(r)$.

$$E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

- ▶ Onde $n = l + 1$, e $R_{n,l}(r) = e^{-\alpha r} r^l g_{n,l}(r)$.
- ▶ Com isso temos a função de onda total,

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = AR_{n,l}(r) T_{l,m_l}(\theta) P_{m_l}(\phi)$$

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = Ar^l e^{-\alpha r} (\sin \theta)^{|m_l|} e^{-im_l \phi} F_{l,m_l}(\cos \theta) g_{n,l}(r)$$

- ▶ Essas condições são expressas mais convenientemente como:
- ▶ $n = 1, 2, 3, \dots$ numero quântico principal
- ▶ $l = 0, +1, +2, n - 1$ numero quântico orbital
- ▶ $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ numero quântico magnético

Notação dos números quânticos

- ▶ Para cada nível de energia E_n existe mais de um estado distinto com a mesma energia, porém números quânticos diferentes.

Notação dos números quânticos

- ▶ Para cada nível de energia E_n existe mais de um estado distinto com a mesma energia, porém números quânticos diferentes.
- ▶ Denomina-se **degeneração** a existência de mais de um estado distinto com a mesma energia.

Notação dos números quânticos

- ▶ Para cada nível de energia E_n existe mais de um estado distinto com a mesma energia, porém números quânticos diferentes.
- ▶ Denomina-se **degeneração** a existência de mais de um estado distinto com a mesma energia.
- ▶ Os estados com diferentes valores do número quântico l são geralmente designados pelas seguintes letras:

$l =$	0	1	2	3	4	5
estado:	s	p	d	f	g	h

Notação dos números quânticos

- ▶ Para cada nível de energia E_n existe mais de um estado distinto com a mesma energia, porém números quânticos diferentes.
- ▶ Denomina-se **degeneração** a existência de mais de um estado distinto com a mesma energia.
- ▶ Os estados com diferentes valores do número quântico l são geralmente designados pelas seguintes letras:
- ▶ A extensão radial da função de onda cresce com o número quântico principal n

$l =$	0	1	2	3	4	5
estado:	s	p	d	f	g	h

Notação dos números quânticos

- ▶ Para cada nível de energia E_n existe mais de um estado distinto com a mesma energia, porém números quânticos diferentes.
- ▶ Denomina-se **degeneração** a existência de mais de um estado distinto com a mesma energia.
- ▶ Os estados com diferentes valores do número quântico l são geralmente designados pelas seguintes letras:

$l =$	0	1	2	3	4	5
estado:	s	p	d	f	g	h

- ▶ A extensão radial da função de onda cresce com o número quântico principal n
- ▶ Chamamos de camada uma região do espaço associada com um n particular.

Notação dos números quânticos

- ▶ Para cada nível de energia E_n existe mais de um estado distinto com a mesma energia, porém números quânticos diferentes.
- ▶ Denomina-se **degeneração** a existência de mais de um estado distinto com a mesma energia.
- ▶ Os estados com diferentes valores do número quântico l são geralmente designados pelas seguintes letras:

$l=$	0	1	2	3	4	5
estado:	s	p	d	f	g	h

- ▶ A extensão radial da função de onda cresce com o número quântico principal n
- ▶ Chamamos de camada uma região do espaço associada com um n particular.
- ▶ É comum empregar as seguintes letras:

$n=$	1	2	3	4
camada:	K	L	M	N

Distribuições de probabilidade do elétron

- ▶ As ψ_{n,l,m_l} fornece uma distribuição de probabilidade de encontrar o elétron em torno do núcleo.

Distribuições de probabilidade do elétron

- ▶ As ψ_{n,l,m_l} fornece uma distribuição de probabilidade de encontrar o elétron em torno do núcleo.
- ▶ Vamos considerar a distribuição de probabilidade radial $P(r)$, onde $P(r)dr$ é probabilidade de encontrar a partícula dentro da camada radial de espessura dr , portanto:

Distribuições de probabilidade do elétron

- ▶ As ψ_{n,l,m_l} fornece uma distribuição de probabilidade de encontrar o elétron em torno do núcleo.
- ▶ Vamos considerar a distribuição de probabilidade radial $P(r)$, onde $P(r)dr$ é probabilidade de encontrar a partícula dentro da camada radial de espessura dr , portanto:

$$P(r)dr = |\psi_{n,l,m_l}|^2 dV = |\psi_{n,l,m_l}|^2 4\pi r^2 dr$$

Distribuições de probabilidade do elétron

- ▶ As ψ_{n,l,m_l} fornece uma distribuição de probabilidade de encontrar o elétron em torno do núcleo.
- ▶ Vamos considerar a distribuição de probabilidade radial $P(r)$, onde $P(r)dr$ é probabilidade de encontrar a partícula dentro da camada radial de espessura dr , portanto:

$$P(r)dr = |\psi_{n,l,m_l}|^2 dV = |\psi_{n,l,m_l}|^2 4\pi r^2 dr$$

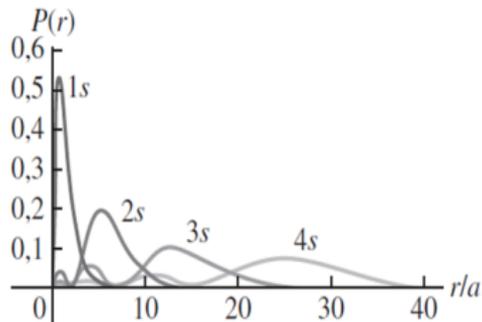
$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = Ar^l e^{-\alpha r} (\sin \theta)^{|m_l|} e^{-im_l \phi} F_{l,m_l}(\cos \theta) g_{n,l}(r)$$

Distribuições de probabilidade do elétron

$$P(r)dr = |\psi_{n,l,m_l}|^2 dV = |\psi_{n,l,m_l}|^2 4\pi r^2 dr$$

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = Ar^l e^{-\alpha r} (\sin \theta)^{|m_l|} e^{-im_l \phi} F_{l,m_l}(\cos \theta) g_{n,l}(r)$$

n	l	m_l	ψ_{n,l,m_l}
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$

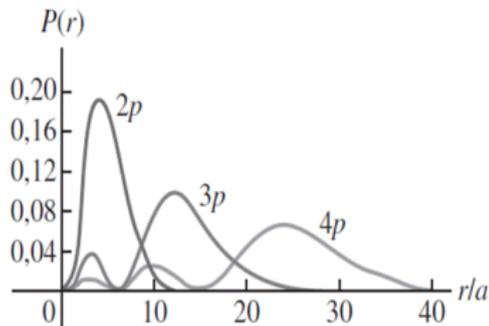


Distribuições de probabilidade do elétron

$$P(r)dr = |\psi_{n,l,m_l}|^2 dV = |\psi_{n,l,m_l}|^2 4\pi r^2 dr$$

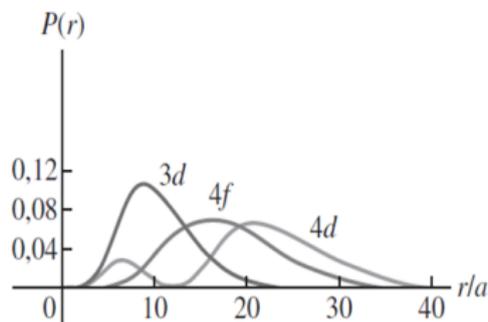
$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = Ar^l e^{-\alpha r} (\sin \theta)^{|m_l|} e^{-im_l \phi} F_{l,m_l}(\cos \theta) g_{n,l}(r)$$

n	l	m_l	ψ_{n,l,m_l}
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$

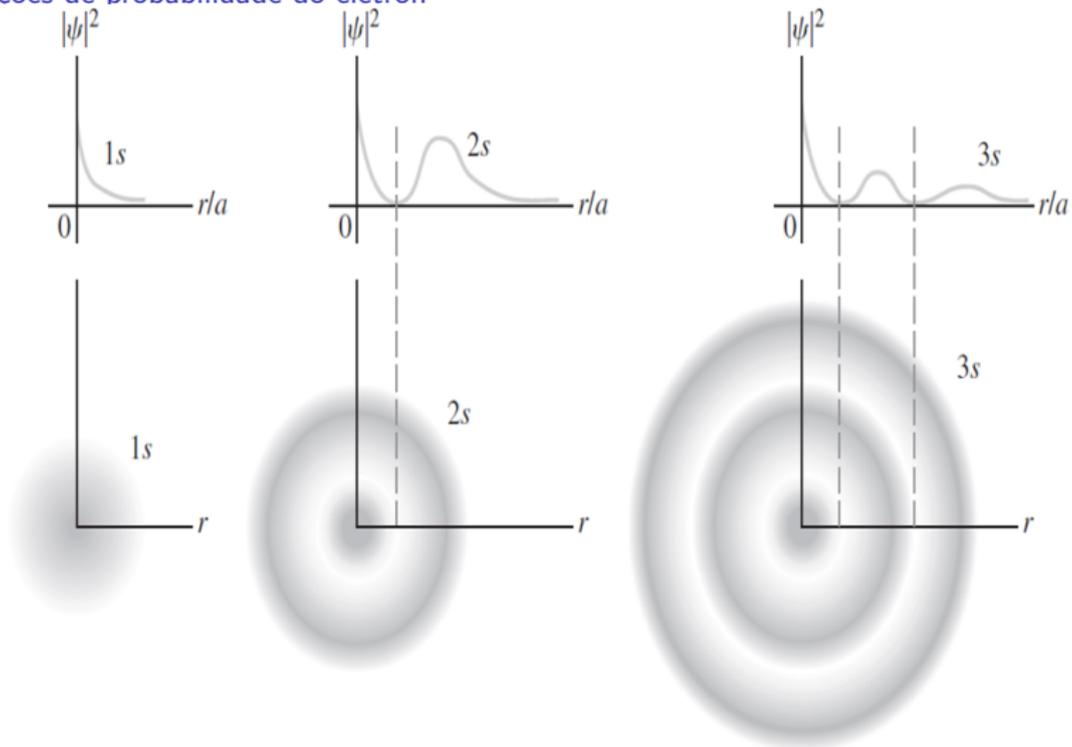


Distribuições de probabilidade do elétron

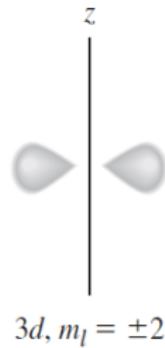
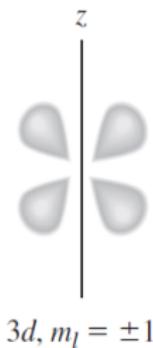
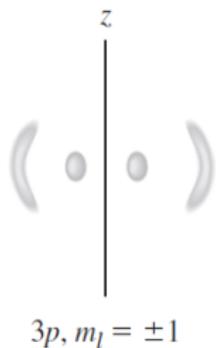
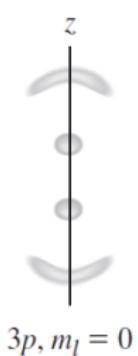
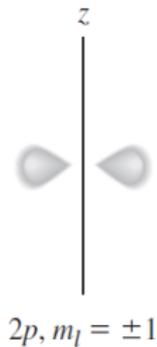
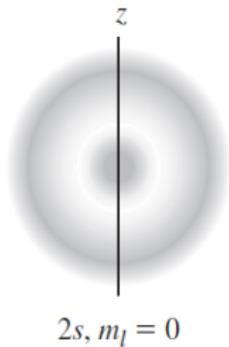
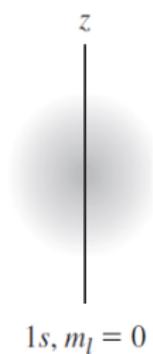
n	l	m_l	ψ_{n,l,m_l}
3	2	-2,-1,0,+1,+2	$\psi_{320} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
4	2	-2,-1,0,+1,+2	$\psi_{420} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
4	3	-3,-2,-1,0,+1,+2,+3	$\psi_{430} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$



Distribuições de probabilidade do elétron



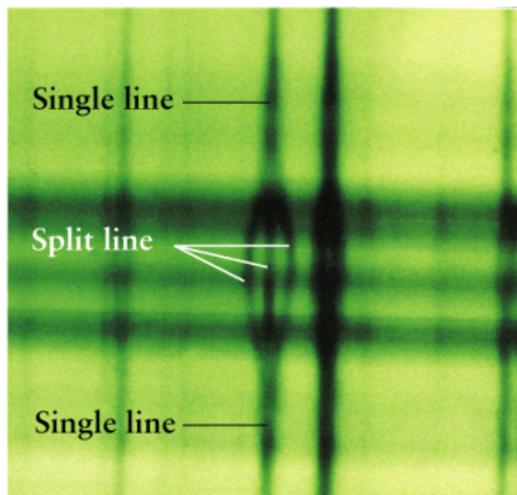
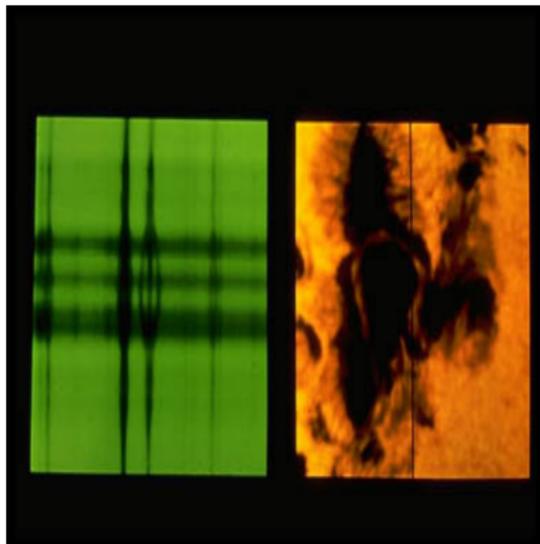
Distribuições de probabilidade do elétron



- ▶ O **efeito Zeeman** é o desdobramento dos níveis de energia e das correspondentes linhas espectrais quando os átomos são colocados na presença de um campo magnético.

↳ O Efeito Zeeman

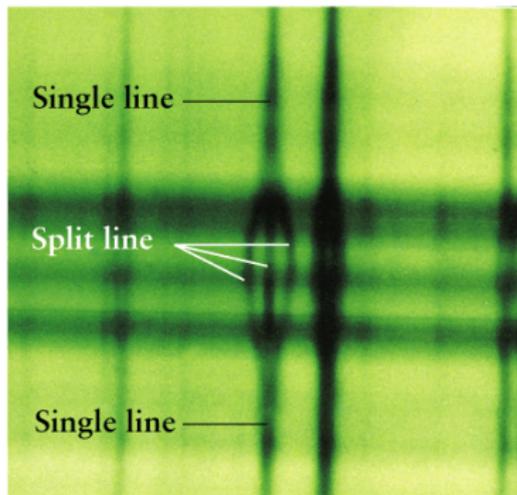
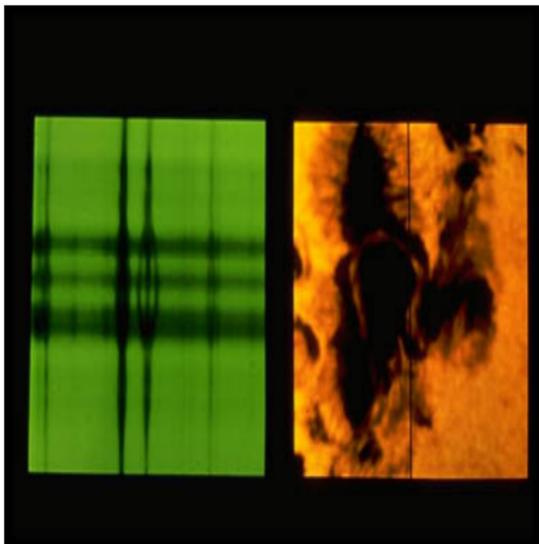
- ▶ O **efeito Zeeman** é o desdobramento dos níveis de energia e das correspondentes linhas espectrais quando os átomos são colocados na presença de um campo magnético.
- ▶ Esse efeito confirma experimentalmente a quantização do momento angular.



b

↳ O Efeito Zeeman

- ▶ O **efeito Zeeman** é o desdobramento dos níveis de energia e das correspondentes linhas espectrais quando os átomos são colocados na presença de um campo magnético.
- ▶ Esse efeito confirma experimentalmente a quantização do momento angular.
- ▶ Mostra também porque m_l é chamado de numero quântico magnético.

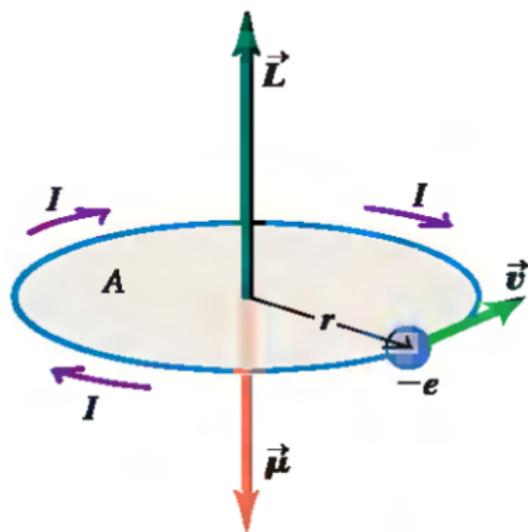


b

Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

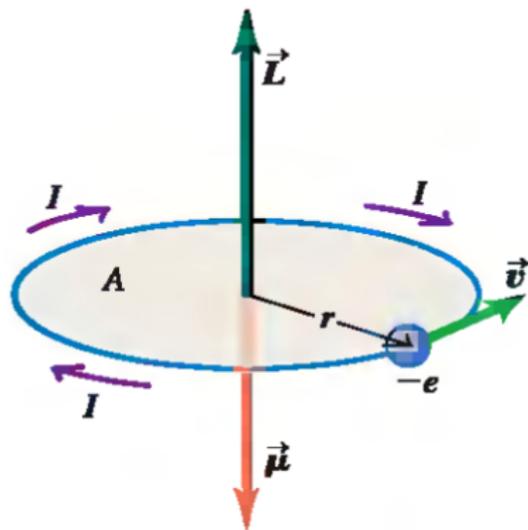


Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$



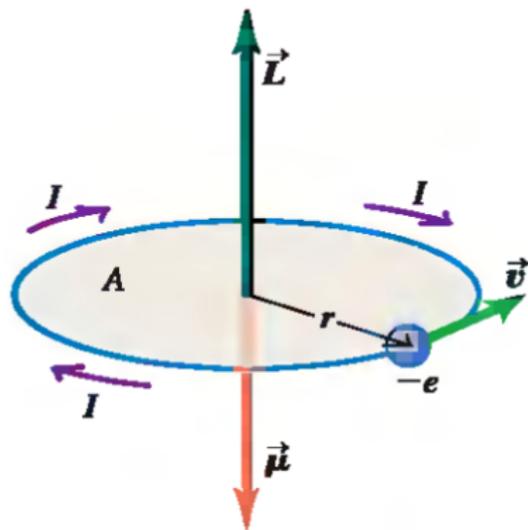
Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$



Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

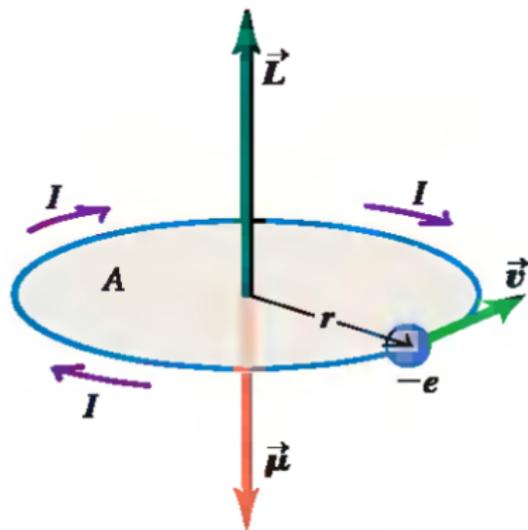
$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r} (\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$



Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

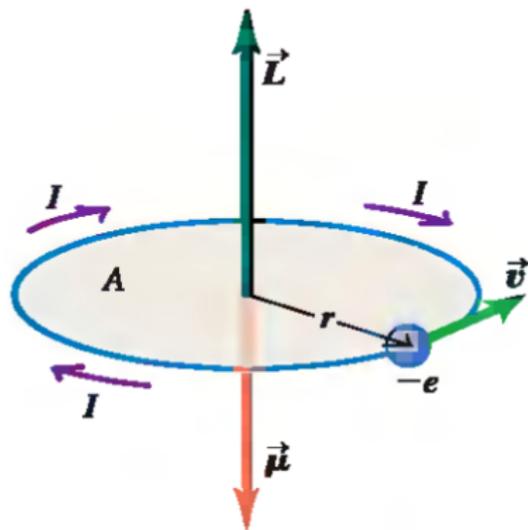
$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r} (\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$

$$L = mvr = n\hbar$$



Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

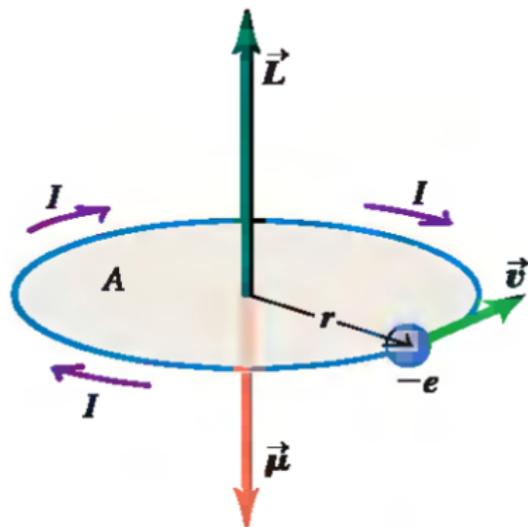
$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r} (\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$

$$L = mvr = n\hbar$$

$$\mu = \frac{e}{2m} L = \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$



Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r}(\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$

$$L = mvr = n\hbar$$

$$\mu = \frac{e}{2m}L = \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}$$

Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r}(\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$

$$L = mvr = n\hbar$$

$$\mu = \frac{e}{2m}L = \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}$$

- ▶ Suponha que $\vec{B} = B\hat{k}$ assim, $U = -\mu_z B$.

Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r}(\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$

$$L = mvr = n\hbar$$

$$\mu = \frac{e}{2m}L = \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}$$

- ▶ Suponha que $\vec{B} = B\hat{k}$ assim, $U = -\mu_z B$.
- ▶ $\mu_z = -\frac{e}{2m}L_z$ como $L_z = m_l\hbar$ obtemos:

$$\mu_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

Momento magnético de um elétron em órbita

- ▶ Uma espira plana de área \vec{A} com uma corrente I possui um momento magnético $\vec{\mu} = I\vec{A}$.
- ▶ Quando $\vec{\mu}$ é colocado na presença de \vec{B} sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$.
- ▶ A energia potencial será: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

$$I = \frac{e}{T}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$I = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = IA$$

$$\mu = \frac{ev}{2\pi r}(\pi r^2) = \frac{evr}{2}$$

$$L = mvr = n\hbar$$

$$\mu = \frac{e}{2m}L = \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}$$

- ▶ Suponha que $\vec{B} = B\hat{k}$ assim, $U = -\mu_z B$.

- ▶ $\mu_z = -\frac{e}{2m}L_z$ como $L_z = m_l\hbar$ obtemos:

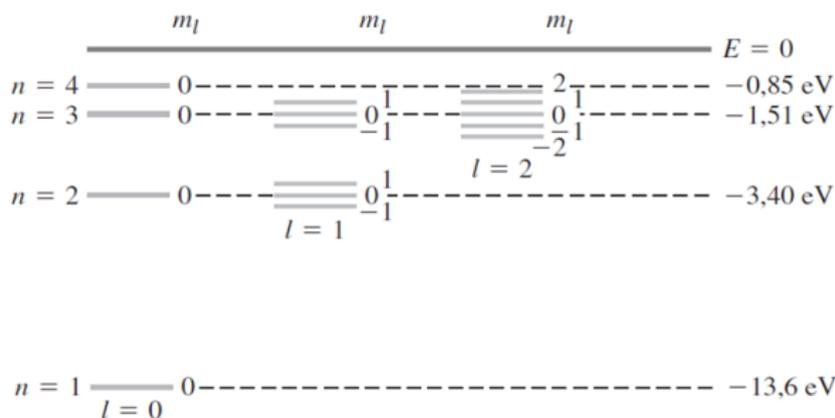
$$\mu_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

$$U = m_l \frac{e\hbar}{2m} B = m_l \mu_B B \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l)$$

Momento magnético de um elétron em órbita

$$\mu_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

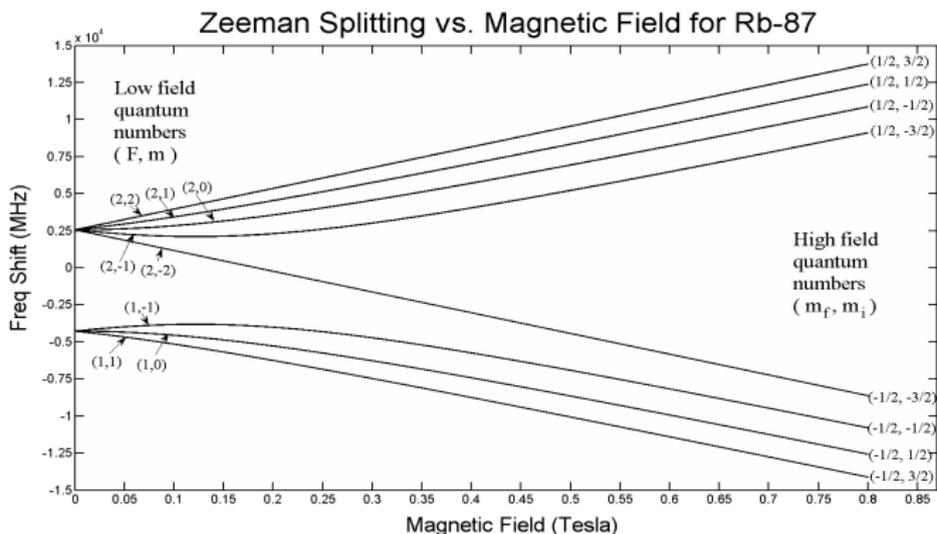
$$U = m_l \frac{e\hbar}{2m} B = m_l \mu_B B \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l)$$

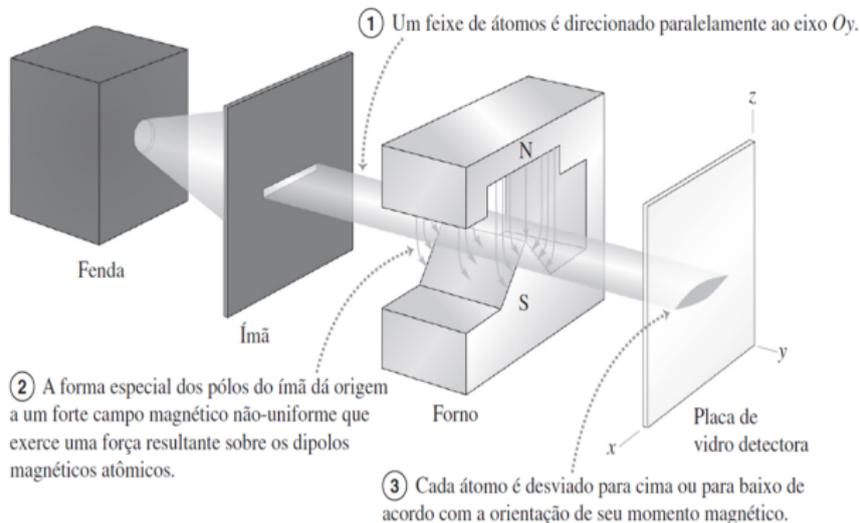


Momento magnético de um elétron em órbita

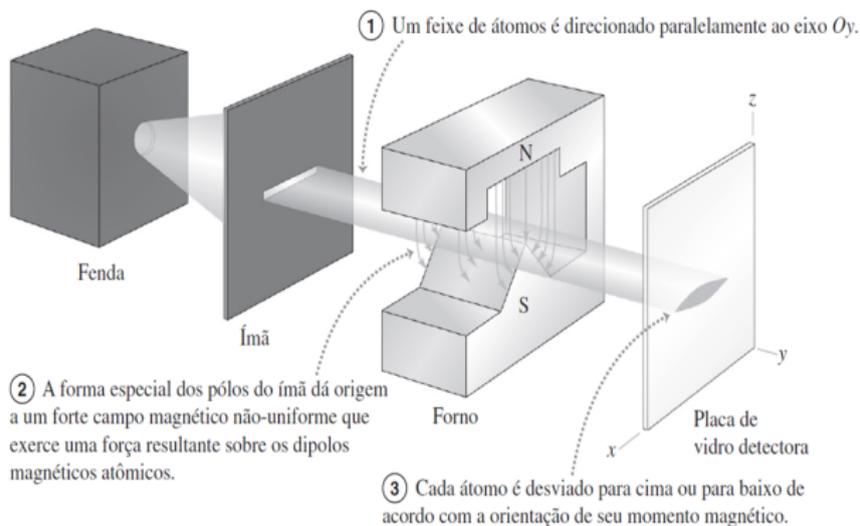
$$\mu_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

$$U = m_l \frac{e\hbar}{2m} B = m_l \mu_B B \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l)$$



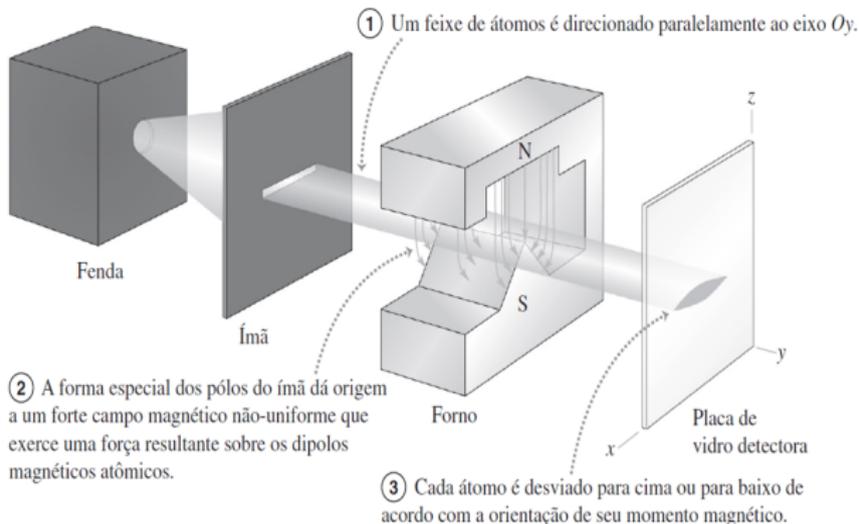


$$S_z = m_s \hbar, \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$



$$S_z = m_s \hbar, \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

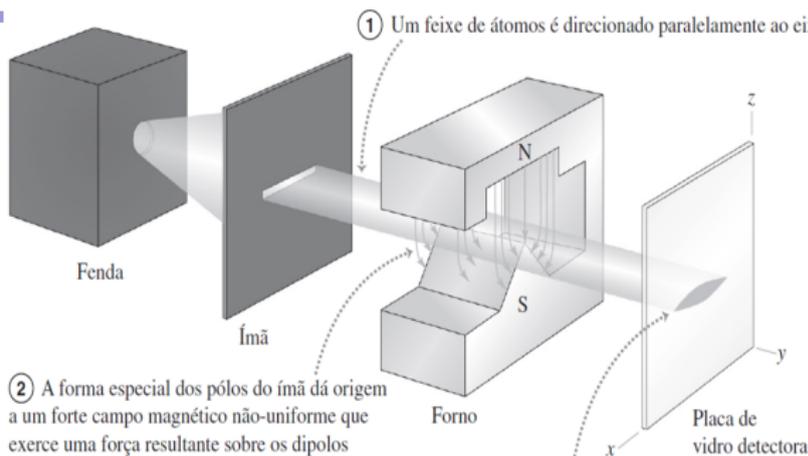
$$S = \sqrt{m_s(m_s + 1)} \hbar$$



$$S_z = m_s \hbar, \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

$$S = \sqrt{m_s(m_s + 1)} \hbar$$

$$\mu_z = -(2,00232) \frac{e}{2m} S_z$$



① Um feixe de átomos é direcionado paralelamente ao eixo Oy .

② A forma especial dos pólos do ímã dá origem a um forte campo magnético não-uniforme que exerce uma força resultante sobre os dipolos magnéticos atômicos.

③ Cada átomo é desviado para cima ou para baixo de acordo com a orientação de seu momento magnético.

$$S_z = m_s \hbar, \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

$$S = \sqrt{m_s(m_s + 1)} \hbar$$

$$\mu_z = -(2,00232) \frac{e}{2m} S_z$$

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \pm m_s (2,00232) \frac{e\hbar}{2m} B$$

Acoplamento Spin-órbita

- ▶ O momento de dipolo magnético de spin pode produzir desdobramento dos níveis de energia mesmo na ausência de campos magnéticos externos.

Acoplamento Spin-órbita

- ▶ O momento de dipolo magnético de spin pode produzir desdobramento dos níveis de energia mesmo na ausência de campos magnéticos externos.
- ▶ A energia de interação pode ser escrita em termos do produto escalar dos vetores \vec{L} e \vec{S} .

Acoplamento Spin-órbita

- ▶ O momento de dipolo magnético de spin pode produzir desdobramento dos níveis de energia mesmo na ausência de campos magnéticos externos.
- ▶ A energia de interação pode ser escrita em termos do produto escalar dos vetores \vec{L} e \vec{S} .
- ▶ $U \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$.

Combinação dos momentos angulares orbital e de spin

- ▶ O momento angular orbital e o momento angular de spin podem se combinar de diversas maneiras:

Combinação dos momentos angulares orbital e de spin

- ▶ O momento angular orbital e o momento angular de spin podem se combinar de diversas maneiras:
- ▶ O momento angular total será definido por: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

Combinação dos momentos angulares orbital e de spin

- ▶ O momento angular orbital e o momento angular de spin podem se combinar de diversas maneiras:
- ▶ O momento angular total será definido por: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.
- ▶ De forma que: $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ e $j = |l \pm 1/2|$.

Combinação dos momentos angulares orbital e de spin

- ▶ O momento angular orbital e o momento angular de spin podem se combinar de diversas maneiras:
- ▶ O momento angular total será definido por: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.
- ▶ De forma que: $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ e $j = |l \pm 1/2|$.
- ▶ $j = |l + 1/2|$ componentes z paralelas.

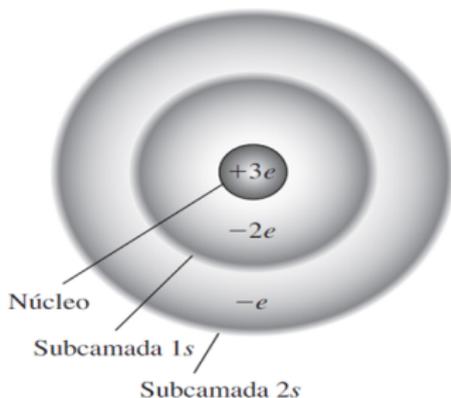
Combinação dos momentos angulares orbital e de spin

- ▶ O momento angular orbital e o momento angular de spin podem se combinar de diversas maneiras:
- ▶ O momento angular total será definido por: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.
- ▶ De forma que: $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ e $j = |l \pm 1/2|$.
- ▶ $j = |l + 1/2|$ componentes z paralelas.
- ▶ $j = |l - 1/2|$ componentes z anti-paralelas.

└ Átomos com muitos Elétrons e Princípio de Exclusão

- ▶ Esse princípio afirma que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico em um dado sistema.

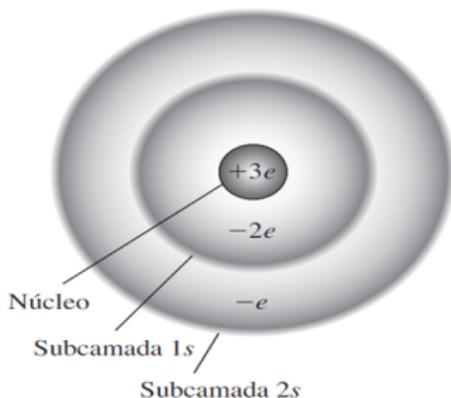
Em média, o elétron em $2s$ está consideravelmente mais longe do que os elétrons em $1s$. Em consequência, ele sofre a ação de uma carga nuclear total de aproximadamente $+3e - 2e = +e$ (em vez de $+3e$)

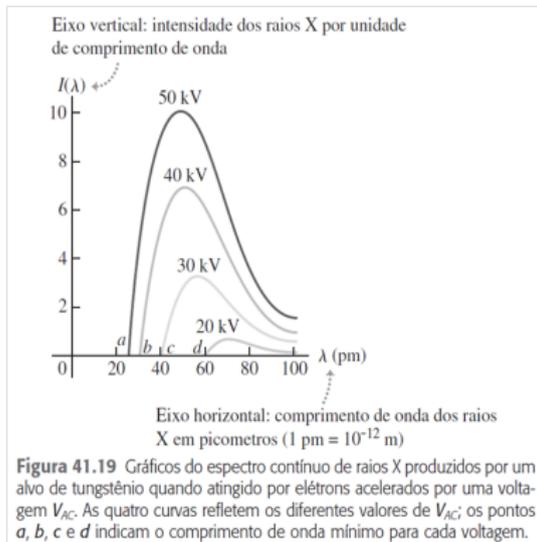


Átomos com muitos Elétrons e Princípio de Exclusão

- ▶ Esse princípio afirma que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico em um dado sistema.
- ▶ Dois elétrons não podem ter os mesmos valores para os quatro números quânticos (n, l, m_l, m_s) .

Em média, o elétron em $2s$ está consideravelmente mais longe do que os elétrons em $1s$. Em consequência, ele sofre a ação de uma carga nuclear total de aproximadamente $+3e - 2e = +e$ (em vez de $+3e$)





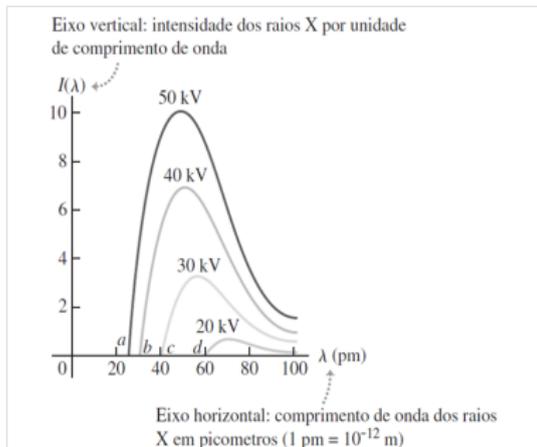


Figura 41.19 Gráficos do espectro contínuo de raios X produzidos por um alvo de tungstênio quando atingido por elétrons acelerados por uma voltagem V_{AC} . As quatro curvas refletem os diferentes valores de V_{AC} ; os pontos a , b , c e d indicam o comprimento de onda mínimo para cada voltagem.

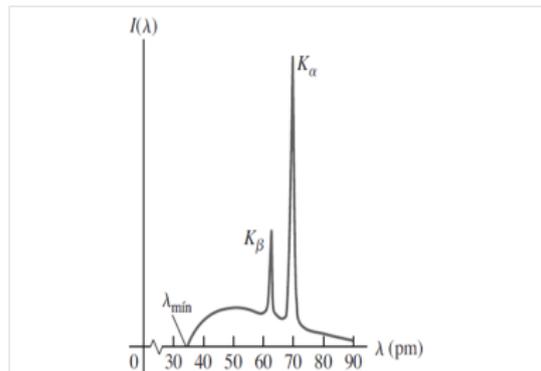
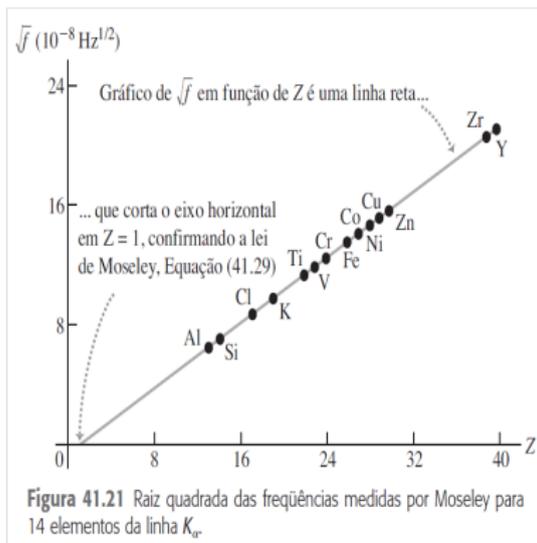


Figura 41.20 Gráficos da intensidade dos raios X por unidade de comprimento de onda em função do comprimento de onda para raios X produzidos por uma voltagem de aceleração de 35 kV e um alvo de molibdênio. A curva é contínua como no caso da Figura 41.19, mas apresenta dois fortes picos superpostos correspondentes ao espectro característico dos raios X desse elemento.



$$f = (2,48 \times 10^{15} \text{ Hz})(Z - 1)^2$$

