

Erwin Schrödinger:

$$E_c + E_p = E$$

$$E_c \cdot \psi(x) + E_p \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_p \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Equação de onda a uma dimensão (x), independente do tempo: que traduz o comportamento de uma partícula descrita por uma onda (eq. de *Schrödinger*).

Resolvendo-a conhece-se a *função de onda* $\psi(x)$ e a *energia da partícula*, ambas quantificadas.

Significado físico (Born):

$\psi^2(x)$ – densidade de probabilidade de encontrar a partícula no ponto x

Aplicação a uma partícula numa caixa a uma dimensão:

Condições fronteira:

1) Para $x \in]0, L[$

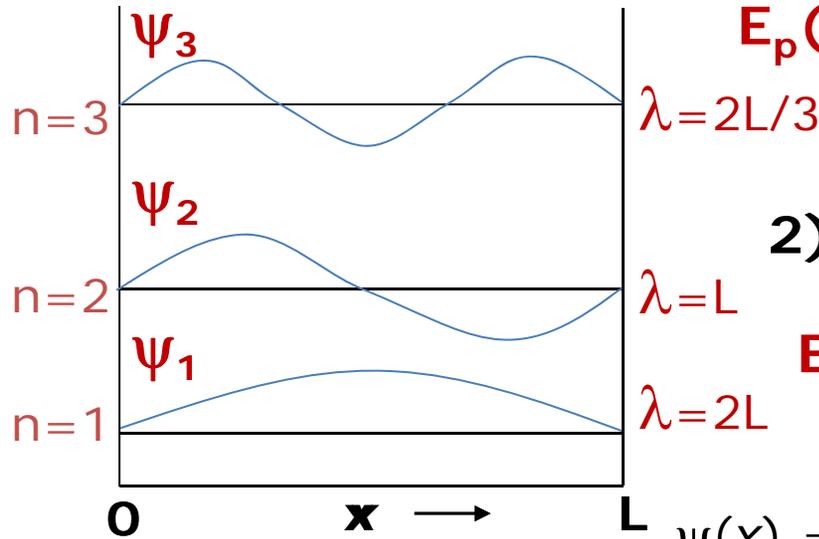
$$E_p(x) = 0 \rightarrow -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \times \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \times \psi(x)$$

$$\psi(x) \neq 0$$

2) Para $x=0$ e $x=L$

$$E_p = \infty \rightarrow \psi(x) = 0 \rightarrow \lambda = 2L/n$$

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



$$\psi(x) = A \sin Kx = A \sin(2\pi x/\lambda) = A \sin(n\pi x/L)$$

Ou:

$x=L$:

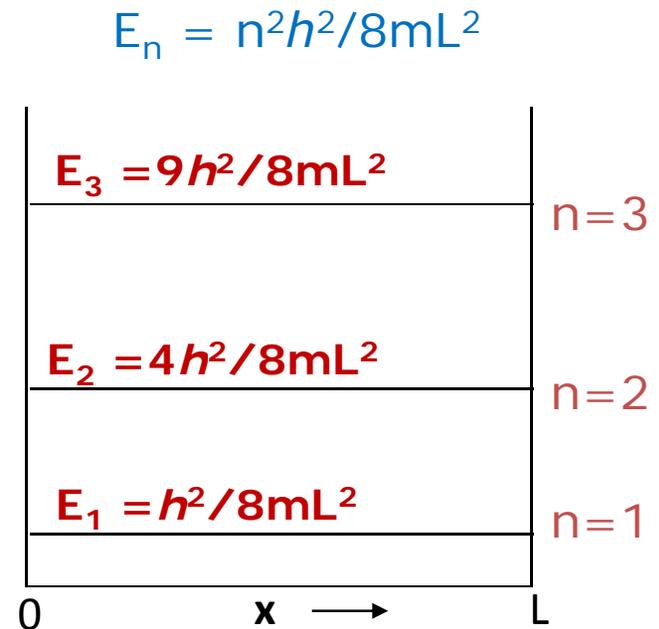
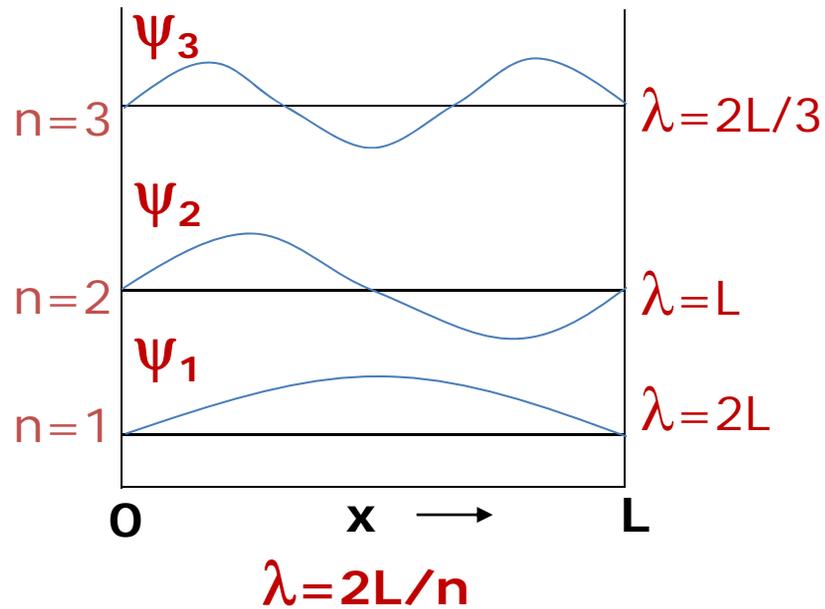
para que $\psi(x) = 0$, como $A \neq 0$ será: $\sin(KL) = 0 \rightarrow KL = n\pi$

Ou seja: $K = n\pi/L$ c/ $n = 1, 2, 3, \dots$ – número quântico

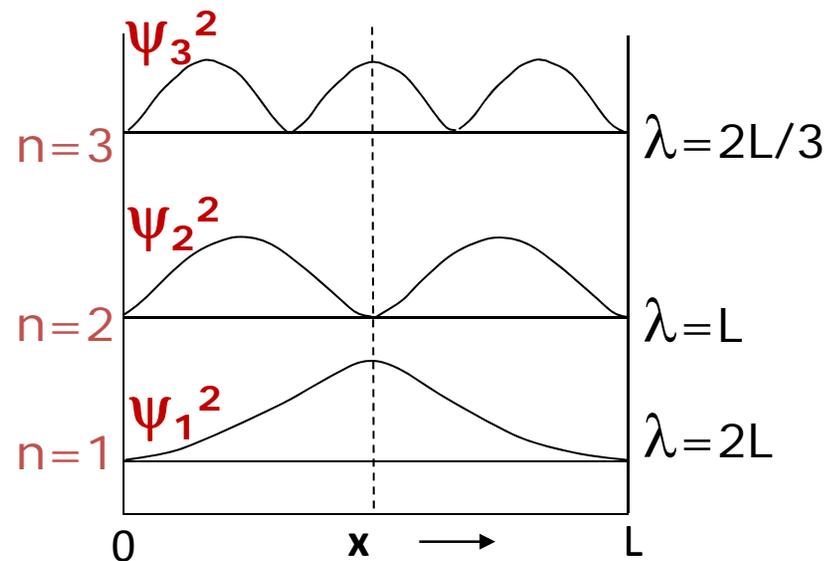
Funções de onda: $\psi_n(x) = A \sin(n\pi x/L)$

Energias: $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$

Quantificadas por 1 n° quântico
(1 dimensão)



Nº de nodos de ψ (excepto os extremos): **n-1**



Para o estado de menor E (n=1):
 A região de maior probabilidade de presença da partícula é no centro da caixa

APLICAÇÕES

Equação de Schrödinger a 3 dimensões

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_p \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

ψ – função de onda: $\psi(x, y, z)$

E – energia total da partícula

E_p – energia potencial da partícula

h – constante de Planck

m – massa da partícula



Por resolução da Eq. de Schrödinger:

- **Função de onda**, quantificada por **3** números quânticos - **orbital** (contém informação detalhada acerca do comportamento do electrão numa região do espaço)
- **Valor de energia** associado a cada função de onda (também quantificado)

Modelo Quântico do Átomo

Átomo de Hidrogénio e Átomos Hidrogenóides:

1 electrão: carga: $-e$

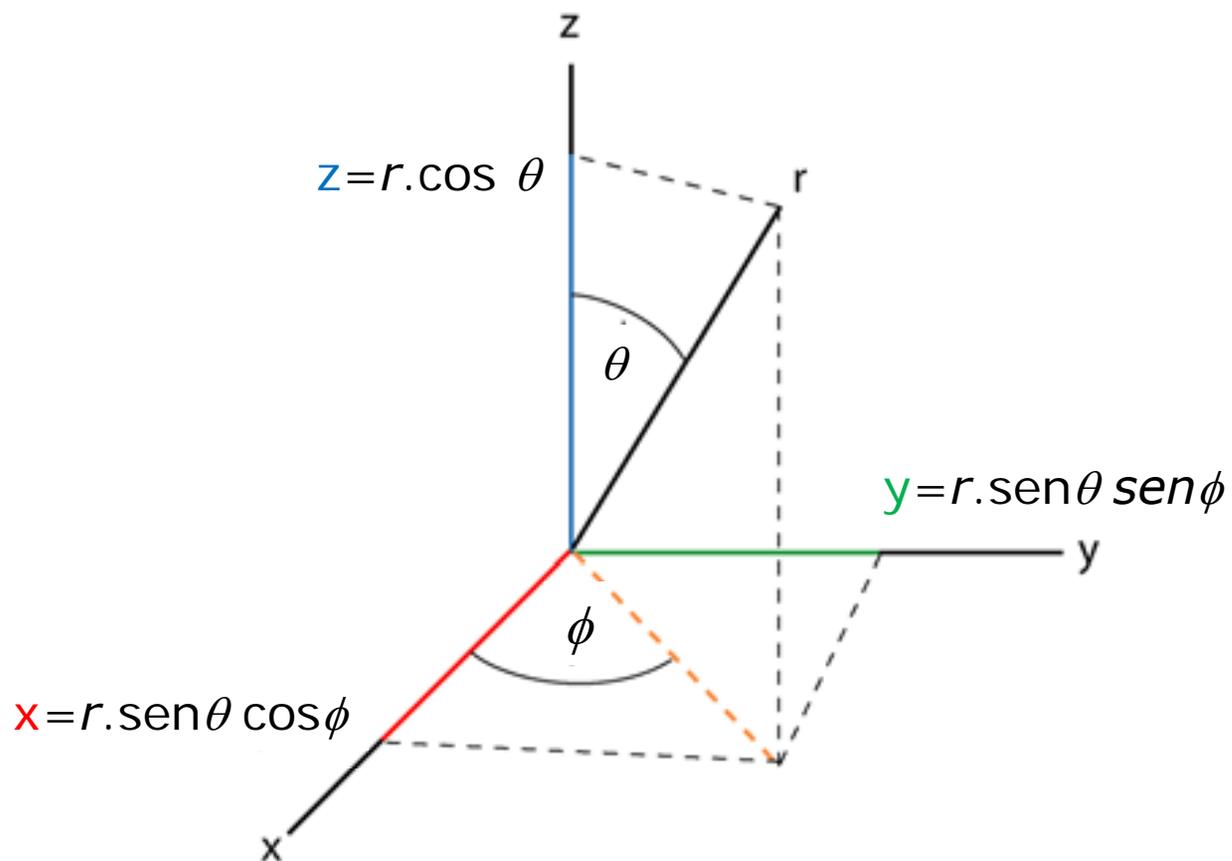
massa: m_e

Núcleo: carga: $+Ze$

massa: m_N

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \right) + E_p\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

Coordenadas Esféricas



Modelo Quântico do Átomo

Átomo de Hidrogénio e Átomos Hidrogenóides:

1 electrão: carga: $-e$

massa: m_e

Núcleo: carga: $+Ze$

massa: m_N

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + E_p \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Por transformação de coordenadas: $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$

$$\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times \Theta(\theta) \times \Phi(\phi) \\ = R(r) \times G(\theta, \phi)$$

Componente radial

Componente angular



Resolvendo a equação:

Ψ_{n,l,m_l} - Função própria ou orbital
(quantificada por 3 números quânticos)

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \times G_{l,m_l}(\theta, \phi)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ - n° quântico principal (nível ou camada: **K, L, M, N, ...**)

$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ - n° quântico azimutal - tipo de orbital: **s, p, d, f, ...**
(sub-nível)

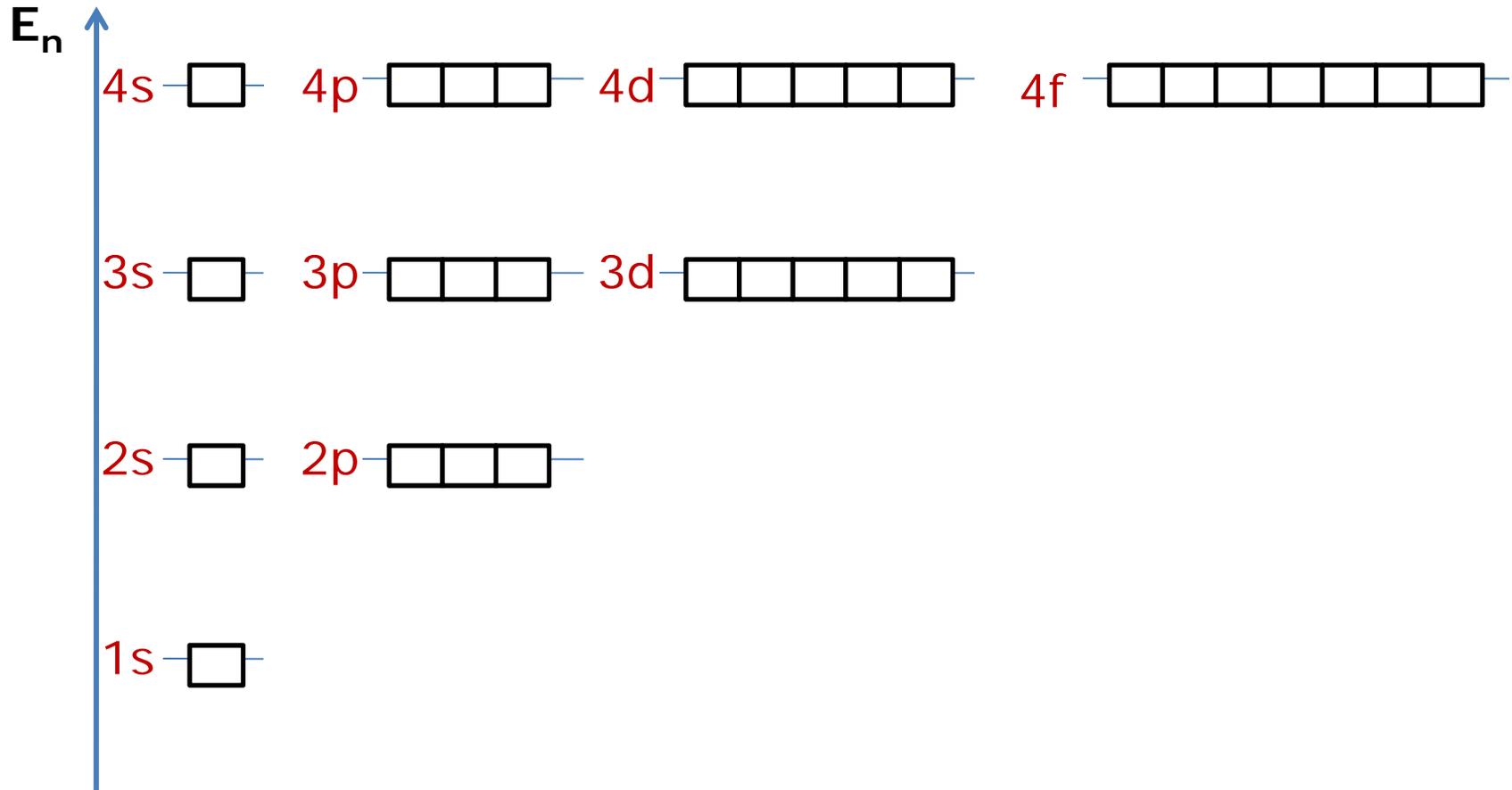
$m_l = -l, -l+1, -l+2, \dots, +l$ - n° quântico magnético - simetria da orbital

n	1	2		3		
l	0	0	1	0	1	2
m_l	0	0	-1, 0, +1	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2
Tipo de orbital	1s	2s	2p	3s	3p	3d
Função de onda	Ψ_{100}	Ψ_{200}	Ψ_{21m_l}	Ψ_{300}	Ψ_{31m_l}	Ψ_{32m_l}
Número de orbitais para cada l (sub-nível)	1	1	3	1	3	5
Número de orbitais para cada n (nível)	1	4		9		

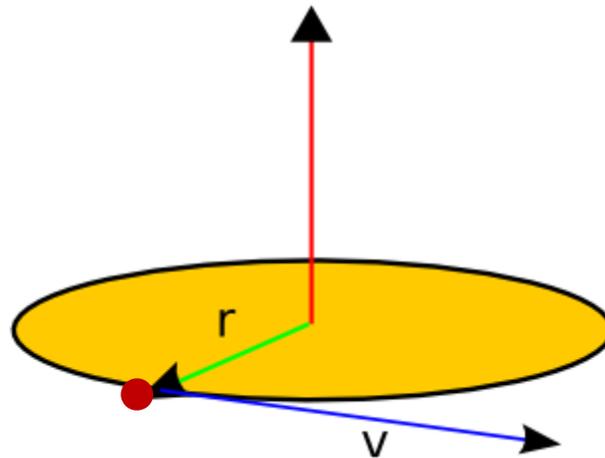
Para um átomo hidrogenóide:

A energia **E** é quantificada apenas pelo número quântico principal, **n**:

$$E_n = - \text{constante} \times Z^2/n^2$$



Momento angular = $|\vec{L}| = m \times v \times r$



$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

$$\hbar = h/2\pi$$

$$|\vec{L}_z| = m_l \hbar$$

Algumas funções próprias:

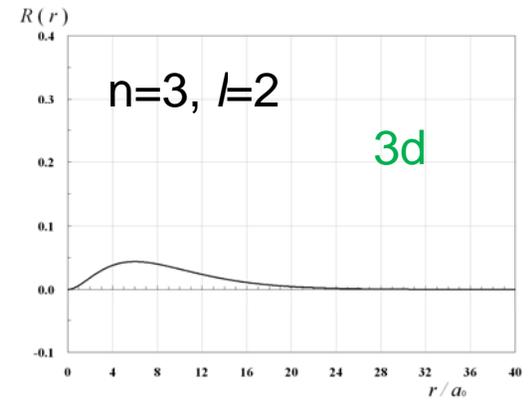
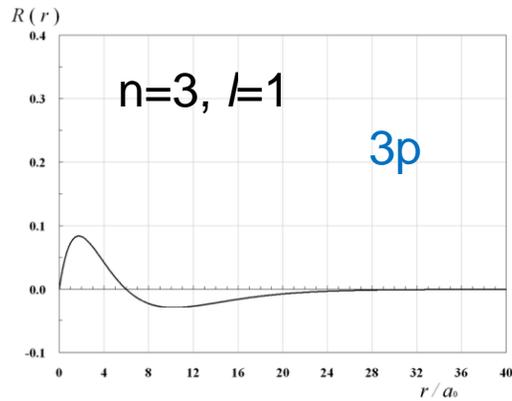
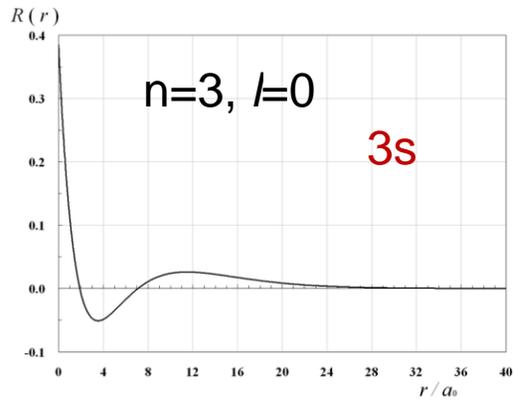
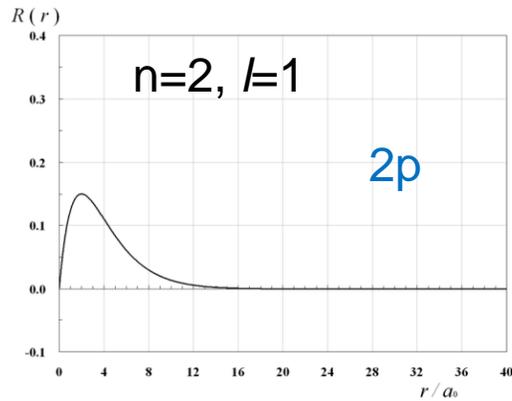
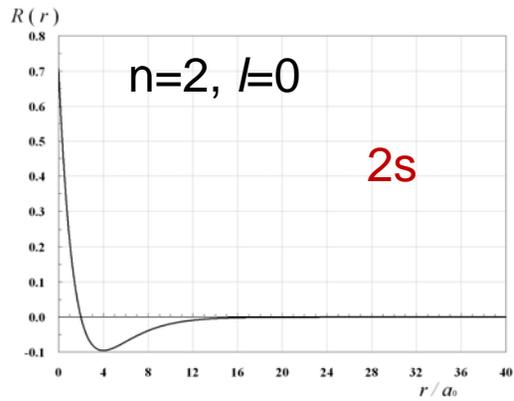
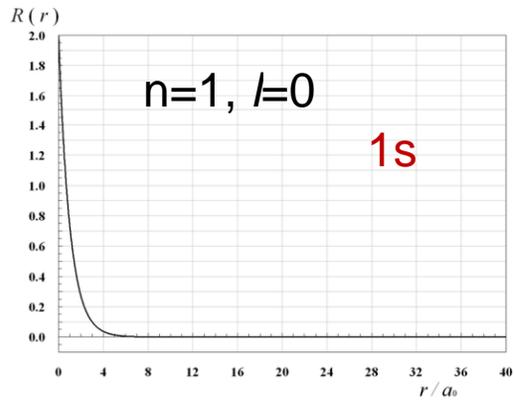
$$1s \quad \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$$

$$2s \quad \psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) \exp(-Zr/2a_0)$$

$$2p \quad \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) \exp(-Zr/2a_0) \cos\theta$$

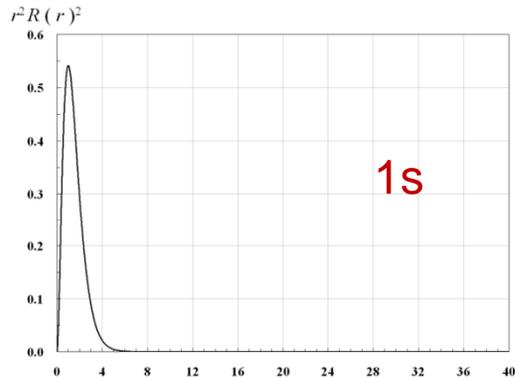
$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) \exp(-Zr/2a_0) \sin\theta \exp(\pm i\phi)$$

Representação gráfica da função de onda radial: $R(r)$

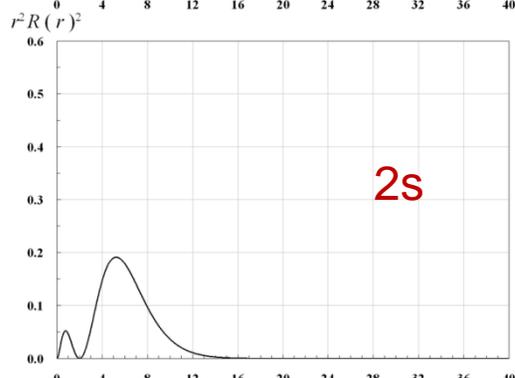


Representação gráfica da função de probabilidade radial: $4\pi r^2 R^2(r) dr$

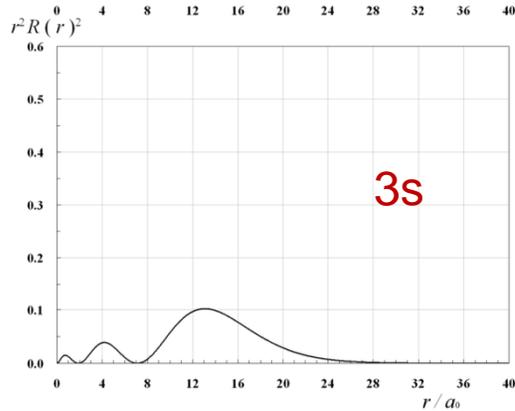
Densidade de probabilidade radial: $R^2(r)$



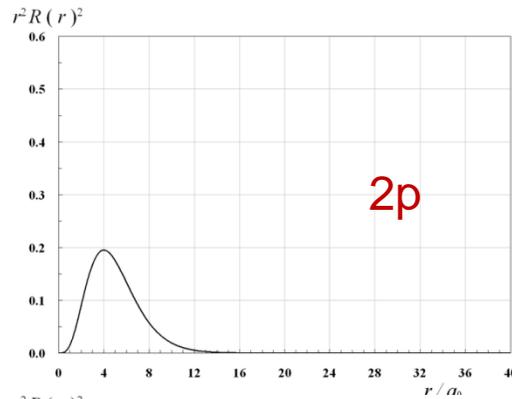
1s



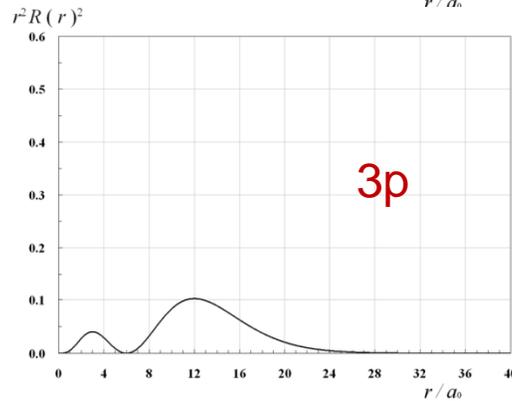
2s



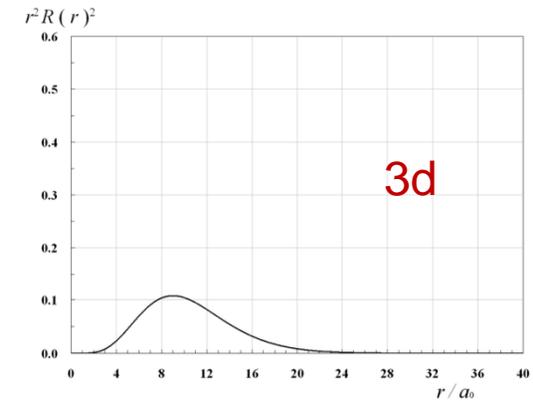
3s



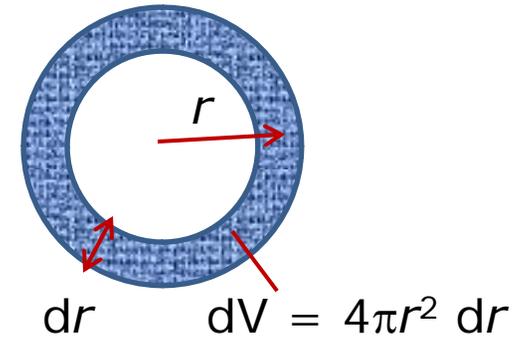
2p



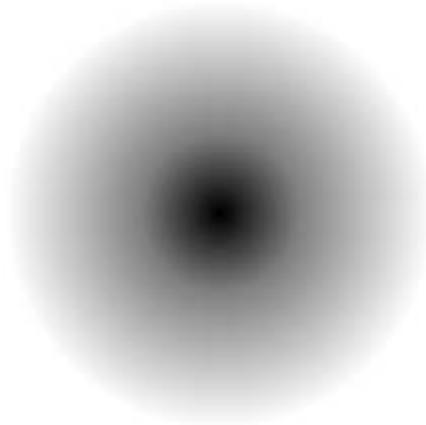
3p



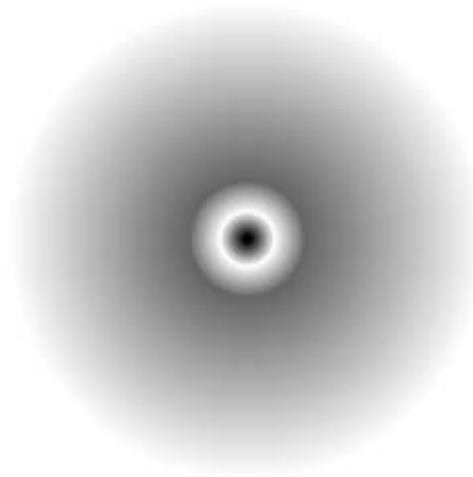
3d



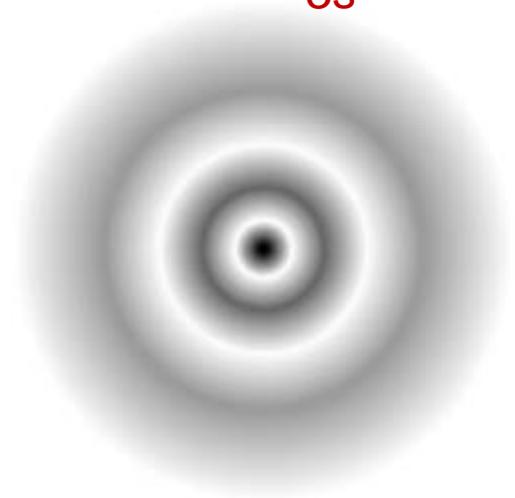
1s



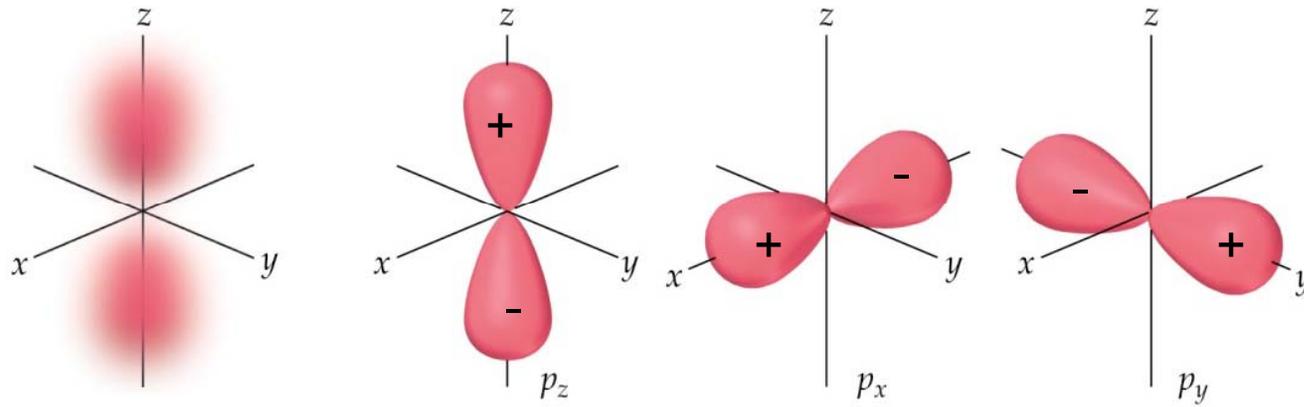
2s



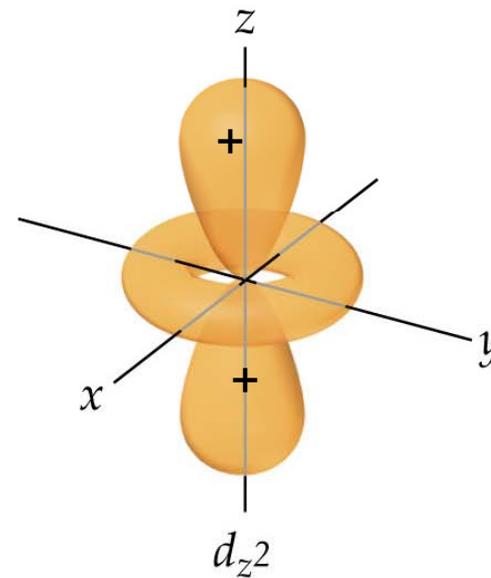
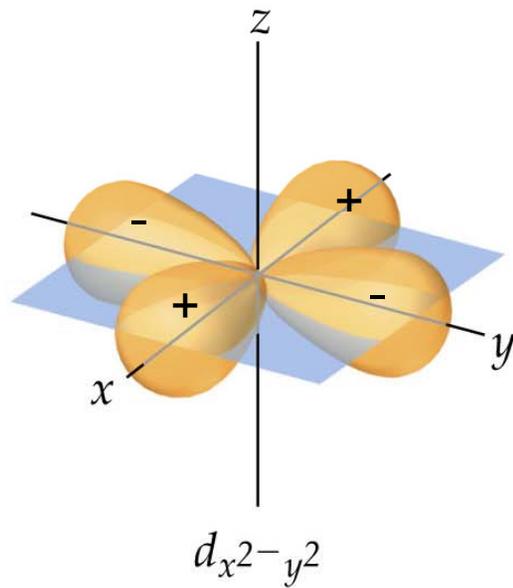
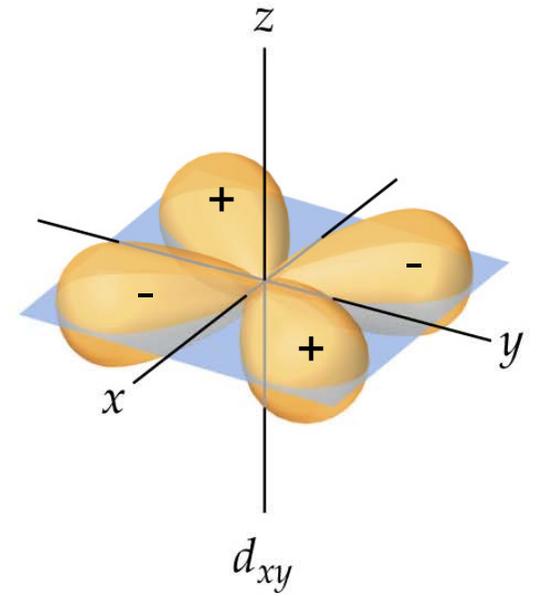
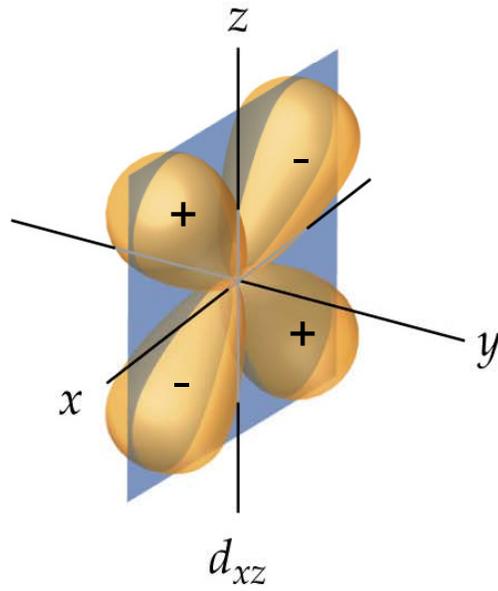
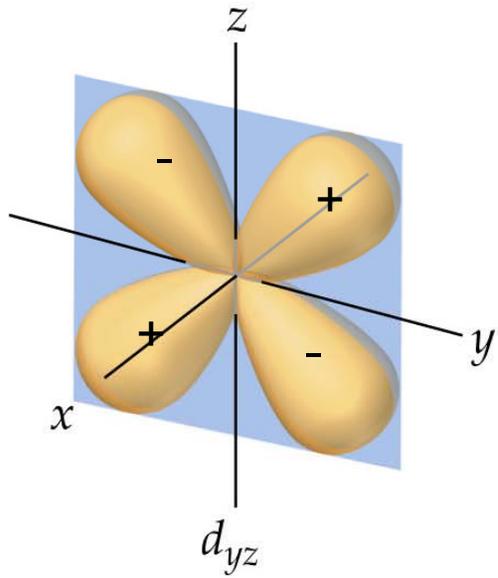
3s



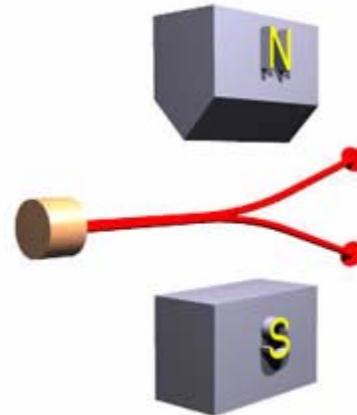
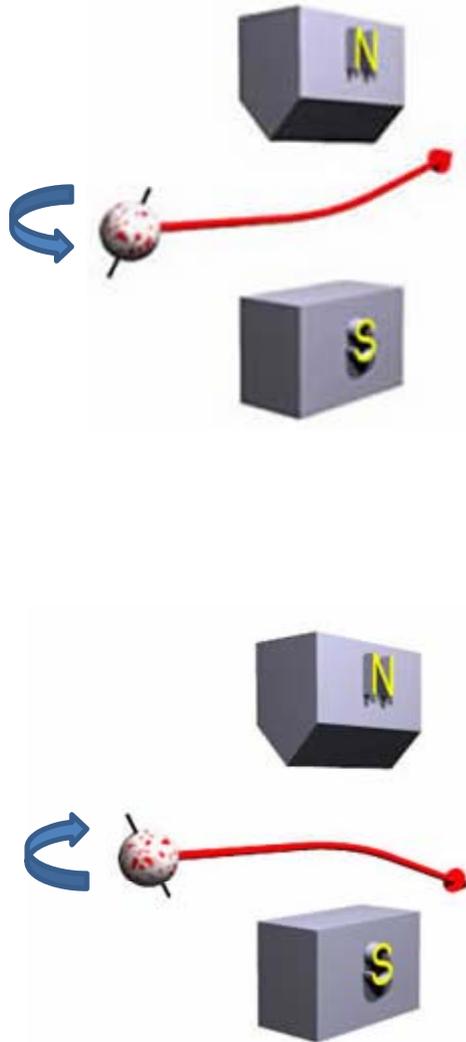
Superfícies $\Theta^2(\theta)$ $\Phi^2(\phi)$ das orbitais p :



Superfícies $\Theta^2(\theta)$ $\Phi^2(\phi)$ das orbitais **d**:



Spin do electrão



Momento angular de spin: \vec{S}

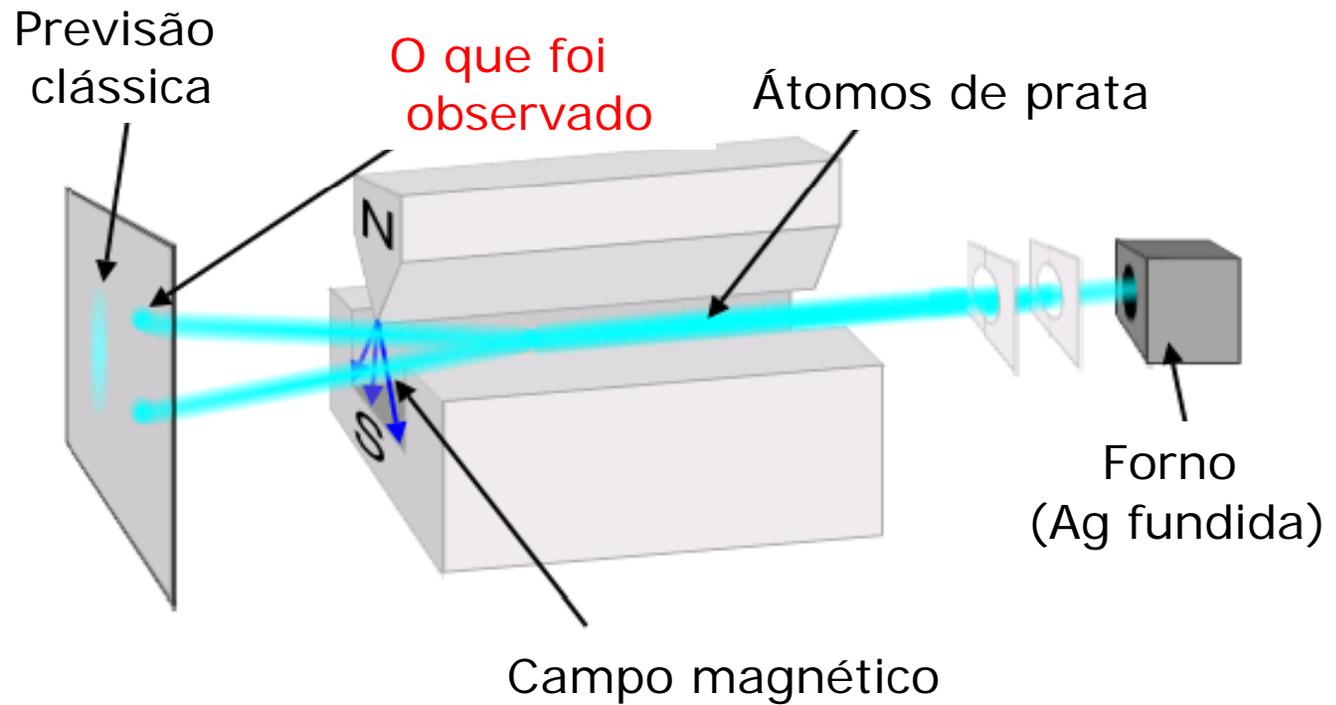
$|\vec{S}|$ quantificado pelo número quântico de spin: **$s=1/2$**

$|\vec{S}_z|$ quantificado pelo número quântico magnético de spin: **$m_s=\pm 1/2$**

Spin dos electrões- Quantificação

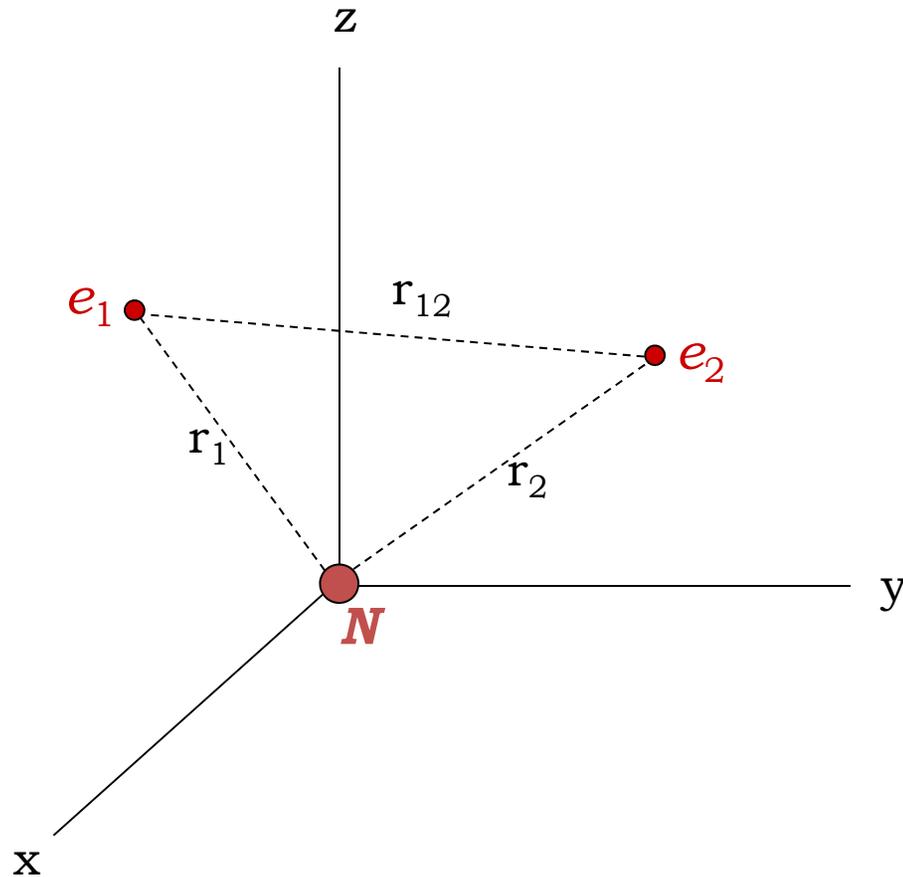
Experiência de Stern-Gerlach (1922)

[Ag:5s¹]



Átomos polieletrónicos:

ÁTOMO DE HÉLIO



Não é possível obter uma solução analítica para a eq. de Schrödinger

Preenchimento Electrónico:

No estado de energia mínima do átomo, os electrões distribuem-se pelas orbitais ocupando as de **menor energia** e seguindo o princípio de “construção” - **energia crescente**.

As energias das orbitais podem prever-se pela **Regra empírica de Wiswesser:**

As orbitais de mais baixa energia são aquelas que:

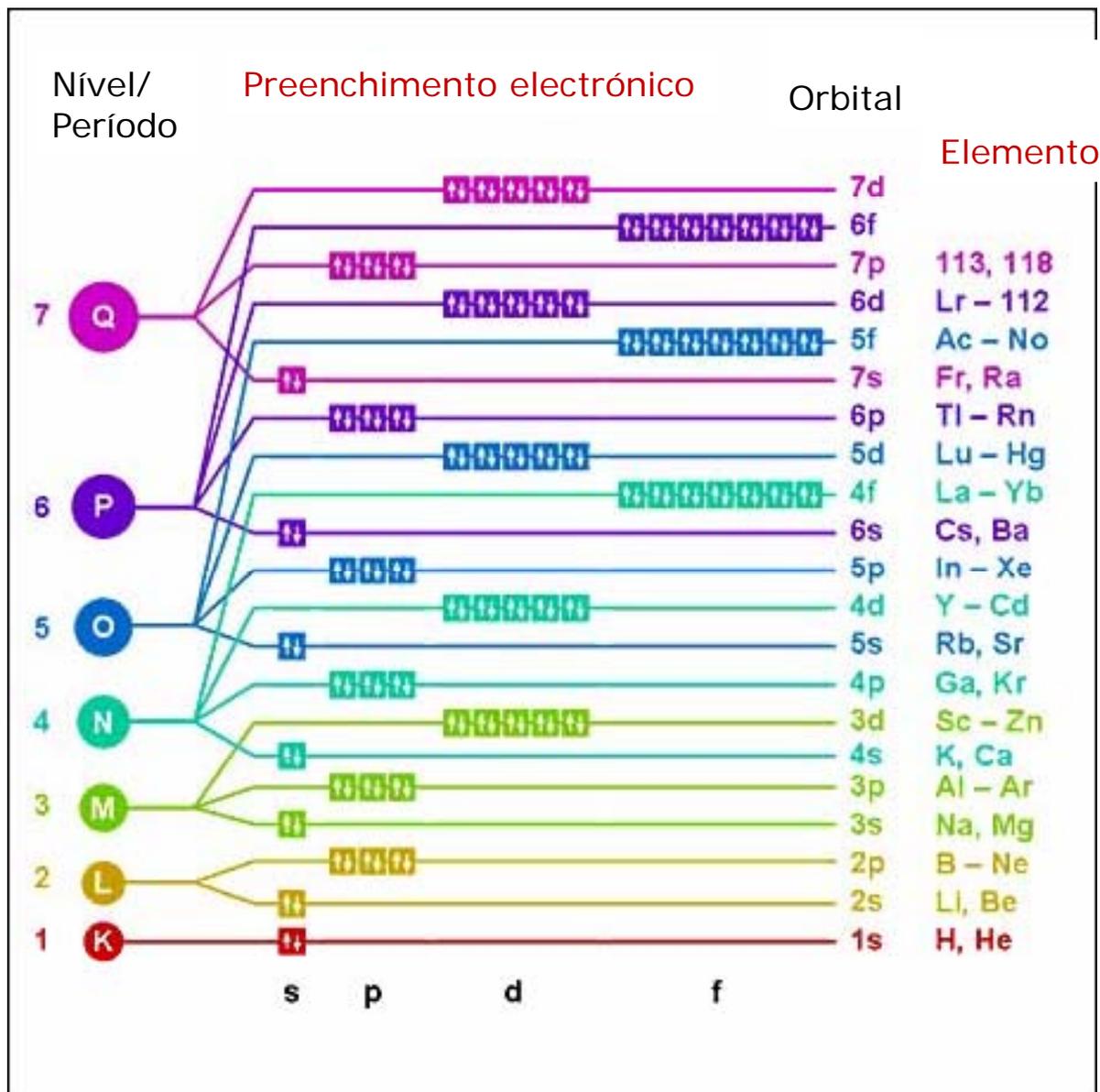
- têm menor valor da soma $(n+l)$;
- para o mesmo valor de $(n+l)$ a de menor n

Princípio de Exclusão de Pauli

1ª Regra de Hund

ENERGIAS DAS ORBITAIS ATÔMICAS

$$E = E(n, l)$$



Sumário 3

- **Equação de Schrödinger a uma Dimensão Independente do Tempo**
- **Interpretação de Born do Quadrado da Função de Onda**
- **Resolução para uma Partícula numa Caixa de Energia Potencial**

Modelo Quântico do Átomo

- **Equação de Schrödinger a três Dimensões**
 - Coordenadas Esféricas
- **Solução da Equação de Schrödinger. Funções próprias**
 - Números Quânticos: n , l e m_l
 - Representações gráficas das Funções de onda (Orbitais)

Sumário 3 – Cont.

- **Átomos de Hidrogénio e Hidrogenóides**

- Funções de distribuição radial
- Energias das orbitais
- Diagrama de energias das orbitais atómicas
- Spin do electrão. Números quânticos s e m_s

- **Átomos Polieletrónicos**

- **Configuração Electrónica. Regras de preeenchimento de orbitais:**

- Princípio de energia mínima;
- Regra de Wiswesser;
- Princípio de exclusão de Pauli;
- 1ª regra de Hund

Teoria: Capítulo 1, pag. 17-20
Capítulo 2