Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Departamento de Física
Prof. Nelson Canzian da Silva

FSC5506
Estrutura da Matéria I

Funções de onda para o átomo de hidrogênio

As funções de onda independentes do tempo para os primeiros níveis de energia do átomo de hidrogênio têm a forma geral:

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$$

onde n, ℓ e m_ℓ são o número quântico principal, o número quântico orbital e o número quântico magnético, respectivamente. Os valores de n só podem ser inteiros positivos; os valores de l só podem ser inteiros entre 0 a $n-1$, e os valores de m_ℓ só podem ser inteiros entre $-\ell$ e ℓ. As equações a seguir referem-se ao estado fundamental e ao primeiro estado excitado. Nas equações, a_0 é o raio de Bohr.

n,ℓ,m_ℓ	$R_{n,l}(r)$	$Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$
1,0,0	$2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2,0,0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2,1,0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{3}}\ \frac{r}{a_0}\ e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$
2,1,±1	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{3}}\ \frac{r}{a_0}\ e^{-r/2a_0}$	$\pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$

1. Mostre que $R_{n,l}(r)$ e $Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$ estão apropriadamente normalizadas.
2. Determine os valores de r para os quais as densidades de probabilidades radiais $P_{n,\ell}(r) = r^2|R_{n,\ell}(r)|^2$ são nulas.
3. Determine os valores de r e os valores de $P_{n,\ell}(r)$ para os quais $P_{n,\ell}(r)$ têm máximos. Como eles se comparam com os valores previstos para os raios das órbitas segundo a teoria de Bohr?
4. Calcule os valores de $P_{n,\ell}(r)$ para $a_0/2$, a_0, $2a_0$, $4a_0$ e $8a_0$ e esboce os gráficos das funções levando em consideração os valores calculados para determinar as escalas relativas.
5. Calcule o valor esperado de r ($\langle r\rangle$) para todos os estados da tabela acima.
6. Esboce gráficos polares das densidades de probabilidade angulares $|Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)|^2$.
7. Calcule a probabilidade de se encontrar o elétron em uma casca esférica de espessura 0,01a_0 em torno de a_0 para o estado fundamental. Assuma que a variação da função no intervalo seja desprezível.
8. Calcule a probabilidade de se encontrar o elétron em um volume com espessura 0,01a_0 em torno de a_0 e intervalos angulares de 1° em torno de $\theta = 0$° e $\phi = 0$° para todos os estados da tabela acima.

Dado: $\int x^n e^{ax}dx = \frac{e^{ax}}{a}\ \left(x^n - nx^{n-1}/a + n(n-1)x^{n-2}/a^2 - \ldots(-1)^n n!/a^n\right),\quad n>0$