Regressar ao applet

Átomo de hidrogénio

A equação de Schrödinger do átomo de hidrogénio escreve-se em coordenadas esféricas sob a forma:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\,\mathrm{tg}\,\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]=0 \quad (1)$$

A função de onda nunca deverá ser infinita e a uma grande distância do núcleo deve ser nula.
Para resolução desta equação, utiliza-se o método de separação das variáveis, com:

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r).\Theta(\theta).\Phi(\varphi) \quad (2)$$

Após essa mudança de variáveis e depois da divisão por R.Θ.Φ, vem:

$$\frac{R''}{R}+\frac{2}{r}\frac{R'}{R}+\frac{1}{r^2}\frac{\Theta''}{\Theta}+\frac{1}{r^2\mathrm{tg}\theta}\frac{\Theta'}{\Theta}+\frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\Phi''}{\Phi}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]=0 \quad (3)$$

O estudo desta equação mostra que para obter um segundo membro nulo é preciso que:

$$\frac{\Phi''}{\Phi}=-m^2 \quad \text{e} \quad \frac{\Theta''}{\Theta}+\frac{1}{\mathrm{tg}\theta}\frac{\Theta'}{\Theta}-\frac{m^2}{\mathrm{sen}^2\,\theta}=-\ell(\ell+1)$$

Como o valor da função de onda deve ser a mesma, se φ aumenta 2 π é preciso que m seja um número inteiro , o que leva a:

$$\Phi = A\cos m\varphi + B\,\mathrm{sen}\, m\varphi$$

A equação (3) fica:

$$\frac{R''}{R}+\frac{2}{r}\frac{R'}{R}+-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]=0 \quad (4)$$

É a parte radial que leva à integração dos polinómios de Laguerre : $L_n^{\ell}(r)$.
É também possível calcular numericamente esta função. Em lugar de estudar R(r), estuda-se o produto r.R(r), cujo quadrado é proporcional à probabilidade de presença radial.
A forma adimensional da equação é:

$$\frac{d^2(r.R)}{dr^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}(r.R)+\frac{2}{r}(r.R)-E.(r.R)=0$$

Esta equação contém termos em **1 / r** e não pode ser integrada numericamente para **r** próximo de zero.
Como os polinómios de Laguerre contêm um termo em r^{ℓ} , efectua-se uma última alteração de variável colocando $R = r^{\ell}.\rho$
Para calcular numericamente o produto **r.R**, é preciso integrar numericamente a equação:

$$\frac{d^2\rho}{dr^2}=-E\rho-2\frac{\rho+(\ell+1)\frac{d\rho}{dr}}{r}$$

A **parte angular** (em Θ) corresponde à equação:

$$\frac{\Theta''}{\Theta}+\frac{1}{\mathrm{tg}\theta}\frac{\Theta'}{\Theta}-\frac{m^2}{\mathrm{sen}^2\,\theta}=-\ell(\ell+1)$$

Efectuam-se alterações nas variáveis $\cos\theta = x$ e $\Theta=(1-x^2)^{\alpha}.y(x)$ com $\alpha = |m| / 2$
Isto leva a longos cálculos na equação:

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2}-2(|m|+1)x\frac{dy}{dx}+\left[\ell(\ell+1)-|m|(|m|+1)\right]y=0$$

Procuramos uma solução sob a forma de série.

A convergência da solução para todos os valores de **x** exige que a série seja limitada, ou seja, que ℓ seja inteiro e que a solução seja um polinómio de grau $\ell - |m|$ com $|m| \leq \ell$.

Estes são os polinómios de Legendre $P_\ell^m(\cos\theta)$ e a solução da parte angular escreve-se na forma

$$\Theta = \operatorname{sen}^{|m|}\theta . P_\ell^m(\cos\theta) \ .$$

Temos por exemplo $\ell = 2$ e $m = \pm 1$ $\Theta = a_1 . \operatorname{sen}\theta . \cos\theta$, $\ell = 2$ e $m = 0$ $\Theta = a_0 .(1 - 5\cos^2\theta)$.

No final, os valores permitidos pela energia são:

$$E = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2}$$

A função de onda é: $\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r).\Theta(\theta).\Phi(\varphi)$

Nela intervêm três inteiros **n**, ℓ e **m** que são os números quânticos.