

O ÁTOMOS DE UM ELÉTRON.

Vamos considerar um núcleo de carga $Z \cdot e$ ao redor do qual orbita um elétron de carga e .

$\rightarrow$ número de prótons
 $\hookrightarrow$ carga de cada próton

Esse sistema ligado gira em torno do seu centro de massa, que não é no núcleo, mas é próximo dele.

Porquê não é em torno do núcleo?

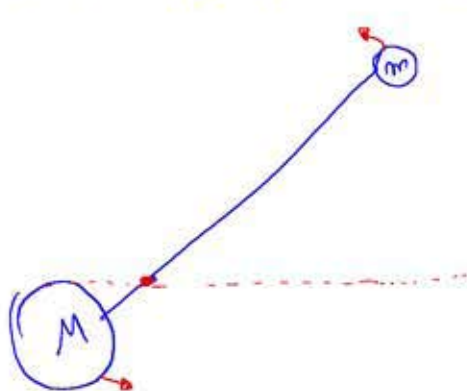
$\Rightarrow$ Faça um experimento mental.

Amarre dois objetos um em cada extremidade de um elástico.

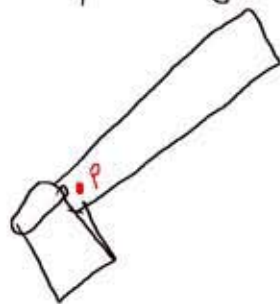


Com $M > m$

Gire-os e solte. Concluirá que os dois objetos irão girar em torno de um ponto mais próximo de M.



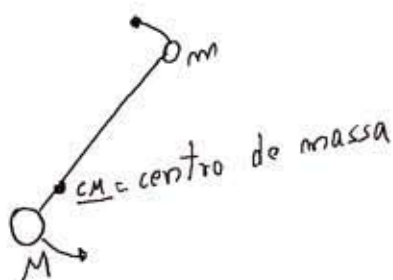
"Em torno de que região um machado gira quando jogado para cima?"



gira em torno de P.

O ponto P corresponde ao centro de massa.

Desta forma, um tratamento mais próximo do real deve considerar este tipo de movimento orbital.



obs: se $M \gg m$, então o próton fica estático e o elétron circunda, sendo o único a ter movimento.

"isso é verdade $M \gg m$ para átomos pesados.

Pode-se mostrar que o problema de um giro orbital de duas partículas em torno do seu centro de massa pode ser reduzido ao problema de uma única partícula com massa reduzida μ , dada por

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad (\text{Eq: Massa}),$$

em torno da distância entre os dois corpos.

ou seja, as equações são as mesmas e considera-se o giro de uma partícula em torno do núcleo. Mas devemos considerar a massa reduzida e não m .

⇒ E.S. fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\psi(x,t)] + V(x,t) \cdot \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x,t)]$$

$$\text{com } \mu = \frac{mM}{m+M} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{obs:} \\ \text{se } M \gg m \\ \Rightarrow \mu \cong m \end{array} \right.$$

"tecnicamente nada muda".

—||—

O movimento orbital de um elétron ao redor do núcleo é tridimensional. Portanto, devemos escrever a E.S. considerando as três coordenadas espaciais.

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

$\equiv$ significa definido como

⇒

$$\text{E.S. fica} \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 [\Psi] + V(x,y,z,t) \cdot \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi]$$

sendo $\Psi = \Psi(x,y,z,t)$.

Neste ponto já é possível, e aconselhável, separarmos as variáveis temporal e espaciais (exatamente como fizemos no caso da partícula livre).

Ou seja, $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot T(t)$ (Eq: separar variáveis tempo/espaço)

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot T(t) \cdot \nabla^2 [\psi(x, y, z)] + V(x, y, z) \cdot \psi(x, y, z) \cdot T(t) = i\hbar \psi(x, y, z) \frac{\partial}{\partial t} [T(t)]$$

dividindo tudo por $\psi(x, y, z) \cdot T(t)$, temos:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{\psi(x, y, z)} \cdot \nabla^2 [\psi(x, y, z)] + V(x, y, z)}_{\text{coordenadas espaciais}} = \underbrace{\frac{i\hbar}{T(t)} \cdot \frac{d}{dt} [T(t)]}_{\text{coord. temporal}}$$

Essa igualdade deve valer para quaisquer valores de (x, y, z) e t , escolhidos aleatoriamente, o que só é possível se cada lado for constante (independe das coordenadas escolhidas).

$\Rightarrow$ Chamaremos esta constante de E .

Assim, para a parte temporal temos:

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{d}{dt} [T(t)] = E$$

$$\Rightarrow \frac{1}{T(t)} \frac{d}{dt} [T(t)] = \frac{E}{i\hbar}$$

Obs: $\left\{ \begin{aligned} \frac{1}{i} &= \frac{1}{i} \cdot \frac{i}{i} = \frac{i}{\sqrt{-1} \cdot \sqrt{-1}} = \frac{i}{-1} = -i \\ &\rightarrow \text{desnecessário. É uma questão apenas estética.} \end{aligned} \right.$

$$\Rightarrow \frac{1}{T(t)} d[T(t)] = -\frac{jE}{\hbar} dt$$

Façamos, por questões estéticas, $T(t) = T$ (sem explicitar t).

$$\int \frac{1}{T} dT = -\frac{jE}{\hbar} \int dt$$

$$\Rightarrow \ln(T) = -\frac{jE}{\hbar} \cdot (t - t_0)$$

Para $t_0 = 0$ $\boxed{\ln(T) = -\frac{jE}{\hbar} t + C}$

Aplicando a exponencial dos dois lados:

$$e^{Im(t)} = e^{-\frac{iE}{\hbar}t + C}$$

$$t = e^C \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$t = Cte. \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \rightarrow \text{solução da parte temporal.}$$

Observe que a constante $\underline{C}$ resulta de duas integrais:

Uma de cada lado da equação. $\underline{C}$ pode assumir valores arbitrários e, no caso, está associado ao instante inicial de análise do fenômeno físico associado. Como temos a liberdade de iniciarmos uma observação no instante que nos for conveniente, então temos liberdade para a escolha de $\underline{C}$.

Como trata-se de uma exponencial complexa, $\underline{C}$ está associado a um ângulo de fase que deverá ser introduzido no resultado final. Por enquanto vamos incorporá-lo a uma constante que no decorrer do processo se confundirá com a amplitude da onda espacial.

Continuando, e escolhendo $C=0$; $e^C = A = 1$.

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Nos resta encontrar $\Psi(x, y, z)$, a parte espacial.

// Obtenção de $\Psi(x, y, z)$.

Da equação E.S. onde separamos as variáveis temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{\Psi(x, y, z)} \cdot \nabla^2 [\Psi(x, y, z)] + V(x, y, z) = E$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{Eq de Schrod.} \\ \text{espacial} \end{array} \right.$



$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{\psi(x,y,z)} \cdot \nabla^2[\psi(x,y,z)] + V(x,y,z) = E$$

Neste caso $V(x,y,z)$ = potencial de Coulomb.

Como o potencial de Coulomb tem simetria esférica (só depende do raio r),

$$V(r) = -\frac{Ze \cdot e}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \begin{cases} Ze = \text{carga do núcleo} \\ e = \text{" " " elétron} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ É adequado resolvermos a parte espacial em coordenadas esféricas.

∇^2 em coordenadas esféricas é dado por

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

$\hookrightarrow$ "Verificar isso"

$$\text{Então } \psi(x,y,z) \longrightarrow \psi(r,\theta,\varphi)$$

Novamente, vamos procurar uma solução do tipo $R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ ou seja, com as variáveis "separadas".

$$\Rightarrow \psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) = R \cdot \Theta \cdot \Phi$$

e a ES fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} [R \cdot \Theta \cdot \Phi] \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [R \cdot \Theta \cdot \Phi] + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} [R \cdot \Theta \cdot \Phi] \right) \right] \approx$$

$$\hookrightarrow +V(r) \cdot R \cdot \Theta \cdot \Phi = E \cdot R \cdot \Theta \cdot \Phi$$

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

(estudantes)

Dado o tamanho da equação acima, muitos se entregam e deixam de lado. Não façam isso; se não agora, façam quando tiverem tempo. O resultado é grandioso e não é tão complexo quanto parece.

Continuando //

Vamos, novamente, dividir a equação acima por $R\Theta\Phi$, e vamos manter dentro das derivadas apenas as funções afetadas pela derivação. Assim resulta que:

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

O procedimento agora é colocar variáveis separadas pelo sinal de igualdade, em seguida igualando cada lado a uma constante.

Obs: Observe que apesar de estarmos resolvendo uma equação maior o procedimento para a solução permanece o mesmo.

Vamos, de início separar o termo dependente de φ .

Para isso multipliquemos tudo por $-\frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot r^2 \sin^2(\theta)$

⇒

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2[\Phi]}{d\varphi^2} = -\frac{\sin^2(\theta)}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d[R]}{dr} \right) - \frac{\sin(\theta)}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d[\Theta]}{d\theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2(\theta) [E - V(r)]$$

Novamente, essa igualdade só é possível se cada lado for constante.

Por conveniência (devido à cálculos já realizados) chamaremos esta constante de

$$-m_l^2$$

Então "precisamos" resolver 2 equações:

(49)

$$\begin{cases} \frac{1}{\Phi} \frac{d^2}{d\varphi^2} [\Phi] = -m_l^2 & e \\ -\frac{\sin^2(\theta)}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin(\theta)}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d[\Theta]}{d\theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2(\theta) [E - V(r)] = -m_l^2 \end{cases}$$

Note que temos ainda uma equação envolvendo 2 variáveis (θ e R).
Vamos separá-las também. Depois nos preocuparemos em resolvê-las.

Parci aqui

continua.

— II —>

13/06/2010 // Continuação.

Vamos então separar as variáveis r e θ na equação acima:

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

Parece conveniente dividir tudo por $\sin^2(\theta)$, $\rightarrow$

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

Separando:

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

Novamente, cada lado deverá ser igualado a uma constante.
A constante pode ter qualquer forma. Já se sabe, após cá!

cálculos e análises realizadas, que uma forma adequada (50) que propicia maior facilidade nas análises é

$$l(l+1)$$

Ob: Essas formas para as constantes $(-m_l^2$ e $l(l+1))$ são adequadas a fim de produzirem soluções associadas a números inteiros. Se escolhêssemos constantes da forma habitual $(A$ ou $B \dots)$ as soluções sairiam associadas com valores não inteiros, o que não seria esteticamente favorável.

Temos então que:

$$\frac{1}{R} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = l(l+1) \quad e$$

$$-\frac{1}{\sin(\theta)\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d[\theta]}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} = l(l+1)$$

⇒ Juntando as três equações separadas temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Phi} \frac{d^2}{d\psi^2} [\Phi] = -m_l^2 \quad (1) \\ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = l(l+1) \quad (2) \\ -\frac{1}{\sin(\theta)\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d[\theta]}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} = l(l+1) \quad (3) \end{array} \right.$$

Resumindo: Temos que resolver as três equações diferenciais para $\Phi(\psi)$, $R(r)$ e $\theta(\theta)$ a fim de formar a solução total $\Psi(r, \theta, \psi) = R(r) \cdot \theta(\theta) \cdot \Phi(\psi)$ "Parte independente do tempo".

Solução das Equações

(51)

$\Phi(\psi)$ (equação 1)

$$\frac{d^2}{d\psi^2} [\Phi(\psi)] = -m_l^2 \Phi(\psi)$$

Obs: É uma equação diferencial do tipo:
 $y''(x) = -a \cdot y(x)$
portanto $y(x) = A e^{\alpha x}$

$$\rightarrow \Phi(\psi) = A e^{\alpha \psi}$$

$$\rightarrow \alpha^2 A e^{\alpha \psi} = -m_l^2 A e^{\alpha \psi}$$

$$\rightarrow \alpha = \pm i \sqrt{m_l^2} \quad \text{o que equivale a}$$

$$\alpha = \pm i |m_l| \quad \text{ou} \quad \alpha = \pm i m_l \quad \text{com } m_l \geq 0$$

O conjunto de soluções é, portanto:

$$\boxed{\Phi(\psi) = A e^{\pm i m_l \psi}}$$

Obs: As duas possibilidades de sinal (+ e -) representam as duas possibilidades de giro do elétron (horário ou anti-horário). Como o elétron não pode descrever as duas trajetórias angulares ao mesmo tempo, então podemos escolher um dos sinais para trabalhar e aumentamos as possibilidades para m_l para valores negativos. Isso nos garante a possibilidade para o elétron girar em um sentido ou em outro dependendo da escolha do sinal de m_l .

Assim, escolhendo $A e^{i m_l \psi}$ como solução temos

$$\boxed{\Phi(\psi) = A e^{i m_l \psi}} \quad \text{com } m_l \text{ qualquer}$$

✓

Observem que é uma solução oscilatória (exponencial complexa, do tipo seno ou cosseno). Como os ângulos ψ e $(\psi + 2\pi)$ representam o mesmo ponto no espaço em ψ . Então $\Phi(\psi) = \Phi(\psi + 2\pi)$ para todo ψ .

Aplicando esta condição temos:

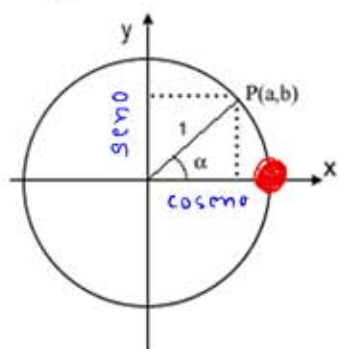
$$A e^{im_1\psi} = A e^{im_1(\psi+2\pi)}$$

Como a igualdade é para todo ψ , escolhemos $\psi = 0$.

$$\Rightarrow 1 = \cos(2\pi m_1) + i \sin(2\pi m_1)$$

Então, basta escolhermos $2\pi m_1$ que zere todos os senos e faça todos os cossenos iguais a 1.

Trigonometricamente queremos o ponto , abaixo.



, isso acontecer se $\alpha = 2\pi \cdot (\text{número inteiro})$

$$\Rightarrow 2\pi m_1 = 2\pi \cdot m$$

$m_1 = \text{número inteiro, negativo ou positivo.}$

$\Rightarrow$ A solução da equação diferencial em ψ é:

$$\boxed{\Phi(\psi) = A e^{im_1\psi}} \quad , \quad \text{com } m_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \text{ etc...} \quad \boxed{\phantom{\Phi(\psi) = A e^{im_1\psi}}}$$

"Solução quantizada em ψ ".

Solução da E.S. associada à variável θ

(50)



$$-\frac{1}{\sin(\theta)\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d[\Theta]}{d\theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} = l(l+1) \quad \text{Eq.}(\theta)$$

De início observe que esta equação está acoplada à equação $\Phi(\varphi)$ através da constante m_l . Então, como os m_l possíveis são

$$m_l = \dots -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

então a equação em θ só faz sentido para esses valores de m_l .

Observe também que $\Theta(\theta)$ depende simultaneamente de duas constantes, m_l e $l(l+1)$. Por isso é comum se escrever $\Theta_{l,m_l}(\theta)$.

Pode-se mostrar que a Eq.(\theta) é uma equação diferencial de Legendre, um tipo particular de equações diferenciais para as quais as soluções são conhecidas:

Obs: (Estudar solução das equações de Legendre)

A equação acima não está numa forma explícita de Legendre. Podemos colocá-la na forma de Legendre como segue:

Fazendo $u = \cos(\theta)$, considerando $\Theta(\theta)$ como $P(u)$,

e rearranjando a Eq.(\theta) temos $\Rightarrow$

$$\sin(\theta) \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) \cdot \sin^2(\theta) - m_l^2 \right] \Theta = 0$$

$$\div \sin^2(\theta)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{\sin(\theta)} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \cdot \frac{d\Theta}{d\theta} \right)}_{1^\circ \text{ termo}} + \left(\frac{l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)}}{\sin^2(\theta)} \right) \Theta = 0$$

Se $u = \cos(\theta)$ 1º termo

$$\Rightarrow du = -\sin(\theta) d\theta \Rightarrow d\theta = -\frac{1}{\sin(\theta)} du$$

"usar esse $d\theta$ "

$$\Rightarrow (1^\circ \text{ termo}) \cdot \underbrace{\frac{1}{\sin(\theta)}}_{\leftarrow \frac{du}{\sin(\theta)}} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \cdot \underbrace{\frac{dP(u)}{d\theta}}_{\leftarrow \frac{du}{\sin(\theta)}} \right)$$

$$= \frac{d}{du} \left(\sin^2(\theta) \cdot \frac{dP(u)}{du} \right)$$

mas se $u = \cos(\theta) \Rightarrow u^2 = \cos^2(\theta)$

como $\sin^2(\theta) = 1 - \cos^2(\theta)$

$$\Rightarrow \sin^2(\theta) = 1 - u^2$$

1º termo é: $\frac{d}{du} \left((1 - u^2) \cdot \frac{dP(u)}{du} \right)$ e a equação

total pode ser escrita como:

$$\boxed{\frac{d}{du} \left[(1 - u^2) \cdot \frac{dP(u)}{du} \right] + \left[\frac{l(l+1) - \frac{m_l^2}{(1 - u^2)}}{(1 - u^2)} \right] \cdot P(u) = 0}$$

Trata-se de uma equação associada do tipo Legendre.

A solução deste tipo de equação é do tipo:

"Colocaremos esta solução em um documento separado"

$$\Theta_{l,m_l}(\theta) = \sin^{|m_l|}(\theta) \cdot F_{l,m_l}[\cos(\theta)]$$

onde $F_{l,m_l}[\cos(\theta)]$ são os chamados polinômios de

Legendre em $\cos(\theta)$, cuja forma depende do número quântico $\underline{l}$ e do módulo do número quântico $\underline{m_l}$.

Inserindo os valores possíveis de m_l , encontra-se que os números $\underline{l}$ assumem valores do tipo:

$$l = |m_l|, |m_l|+1, |m_l|+2, |m_l|+3, \dots$$

— || —

Solução para a E.S. associada ao raio $\underline{r}$
 $R(r)$.

$$\left[\frac{1}{R} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = l(l+1) \right]$$

Na forma acima a E.S. radial não tem um aspecto "amismador". Contudo, rearranjando é possível chegarmos a uma forma mais comum, como segue:

multiplicar por $\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \cdot R$ e por (-1)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \cdot l(l+1) \right] \cdot R = E \cdot R$$



Derivando o primeiro termo temos:

(56)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[r^2 \frac{d^2(R)}{dr^2} + 2r \frac{d(R)}{dr} \right] = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2(R)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d(R)}{dr} \right]$$

Assim, a equação radial tem a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2(R)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d(R)}{dr} \right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1) \right] R = E R$$

Observe (compare) que esta equação difere da forma da equação de Schrödinger unidimensional (espacial).

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

apenas pela presença da derivada primeira.

Embora o potencial pareça diferente, na verdade podemos considerar um potencial efetivo dado por

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1)$$

No mais, definindo uma nova função $\chi(r) = r \cdot R(r)$ e substituindo $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ na equação principal resulta:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) \right] + V_{\text{eff}}(r) \cdot \frac{\chi(r)}{r} = E \cdot \frac{\chi(r)}{r}$$

⊗ x

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot r \left[\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) \right] + V_{\text{eff}}(r) \cdot \chi(r) = E \cdot \chi(r)$$

Vamos rearranjar o 1º termo:

(5v7)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot r \left[\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) \right]$$

com $\chi(r) = r \cdot R(r)$

$$\rightarrow r \frac{d}{dr} \left[\frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) \right] + 2 \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right)$$

$$r \frac{d}{dr} \left[\frac{r \chi'(r) - \chi(r)}{r^2} \right] + 2 \cdot \left[\frac{r \chi'(r) - \chi(r)}{r^2} \right]$$

$$r \left[\frac{r^2 (r \chi''(r) + \cancel{\chi'(r)} - \cancel{\chi'(r)}) - [r \chi'(r) - \chi(r)] \cdot 2r}{r^4} + \frac{2 \chi'(r)}{r} - \frac{2 \chi(r)}{r^2} \right]$$

$$= \frac{r^4 \chi''(r) - 2r^3 \chi'(r) + 2r^2 \chi(r)}{r^4} + \frac{2 \chi'(r)}{r} - \frac{2 \chi(r)}{r^2}$$

$$= \chi''(r) - \frac{2 \cancel{\chi'(r)}}{r} + \frac{2 \cancel{\chi(r)}}{r^2} + \frac{2 \cancel{\chi'(r)}}{r} - \frac{2 \cancel{\chi(r)}}{r^2}$$

$$= \chi''(r)$$

Portanto a equação radial de Schrödinger pode ser reescrita na forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2}{dr^2} \right] \chi(r) + V_{\text{eff}}(r) \chi(r) = E \chi(r)$$

↳ mesma forma da equação unidimensional.
mas aqui $r \geq 0$.

Em suma, resolver a equação radial e^- como resolver a equação unidimensional com $x \geq 0$, o que equivale a colocar uma barreira potencial infinita na origem e situar o elétron do lado positivo.

Claro que temos um fator que aumente a dificuldade da solução, que é a forma do potencial

Lembrando:

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1)$$

Que no caso e^-

$$V_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1)$$

Do tipo $V_{\text{eff}} = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^2}$

Fisicamente o 2º termo do potencial efetivo vem da energia cinética, que depende de (r) . Vale ressaltar que temos 3 possibilidades "qualitativas" para V_{eff} : 1) Estado ligado, 2) Espalhamento, ou seja, não ligado $E_c > 0$ quando $E_p \rightarrow 0$; 3) Limite entre estado ligado e não ligado. Veremos isso mais adiante.

"Outro aspecto do potencial efetivo"

Onde ocorre seu valor mínimo?

$$V_{\text{eff}} = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^2}$$

$$\frac{dV_{\text{eff}}}{dr} = \frac{\cancel{r} + A}{r^2} + \frac{\cancel{r^2} \cdot 0 - B \cdot 2r}{r^4} = +\frac{A}{r^2} - \frac{2B}{r^3}$$

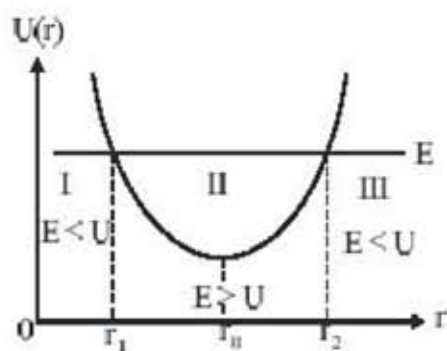
$$\frac{d(V_{\text{eff}})}{dr} = 0 \quad A = \frac{2B}{r} \quad \Rightarrow \quad r = \frac{2B}{A}, \text{ no caso}$$

$$r_{(\text{min})} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu \cdot \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}}$$

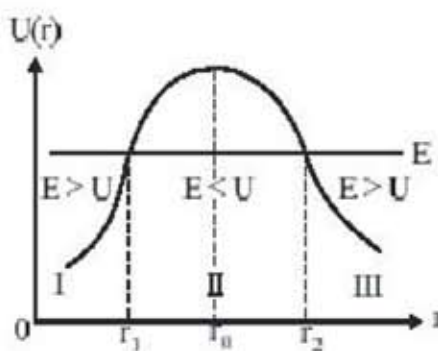
$$\Rightarrow r_{(\text{min})} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 l(l+1)}{\mu \cdot Ze^2}$$

Significado: 1º) Como já vimos l é quantizado pois está associado a valores específicos de m_l . então os raios de estabilidade (mínimo potencial) também são quantizados, em acordo com o postulado de Bohr.

2º) Se V_{eff} possui mínimo, para um dado valor de l , então tem uma forma parecida com o potencial de 1 oscilador harmônico (partícula oscilando em torno do ponto de mínimo potencial). Parece que a solução da equação radial se assemelha à solução da equação de Schrödinger para um potencial do tipo $\frac{1}{2}kx^2$, ou seja de um oscilador harmônico.



(a)



(b)

O potencial efetivo $V_{eff}(r)$ está representado na figura acima.

Camsei, parei aqui, agora vou tomar uma cerveja.

Vejam que não é uma tarefa tão simples chegar às soluções da E.S. para o átomo de Hidrogênio. Mas toda essa tentativa de explicar passo a passo serve para quem tiver curiosidade sobre a solução. Para os que não têm essa finalidade (ou não têm tempo para tantos detalhes), basta estudar os resultados finais, tal como os químicos (em geral) fazem.

Te' mais
(continua.)
↓