

## 20 Átomo de hidrogênio

---

As funções de onda para os primeiros níveis de energia de um átomo hidrogenóide (que é um átomo com apenas um elétron) têm a forma geral:

$$\Psi_{nlm_l} = f_{nl}(r)g_{lm_l}(\theta)h_{m_l}(\varphi)$$

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 números inteiros maiores que zero; os valores de  $l$  só podem ser inteiros entre 0 a  $n - 1$  e os valores de  $m_l$  só podem ser inteiros entre  $-l$  e  $+l$ .

As equações a seguir são as funções de onda para o estado fundamental ( $n = 1$ ) e para o primeiro estado excitado ( $n = 2$ ). Nas equações,  $a_0$  é o raio de Bohr e  $Z$  é o número atômico. O script a seguir implementa um mecanismo de seleção dos números quânticos e de cálculo do valor da função de onda para valores das coordenadas espaciais  $r$  e  $\theta$ .

$$\begin{aligned}\Psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \\ \Psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\ \Psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \cos \theta \\ \Psi_{21\pm 1} &= \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}\end{aligned}$$

exemplo-20-1.html

```
<html>
<head>
<script src="atomo-de-hidrogenio.js"></script>
```

```

<script>
function calcPsi() {
  var n = parseInt(document.getElementById("n").value);
  var l = parseInt(document.getElementById("l").value);
  var m = parseInt(document.getElementById("m").value);
  var Z = parseInt(document.getElementById("Z").value);
  var r = parseFloat(document.getElementById("r").value);
  var t = parseFloat(document.getElementById("t").value)
    *Math.PI/180;

  // Alternativa 1
  var winRef1 = window.open('', '',
    'left=100,top=100,width=400,height=100,resizable=1');
  switch (n) {
    case 1:
      winRef1.document.write(p100(Z,r,t)); break;
    case 2:
      switch (l) {
        case 0:
          winRef1.document.write(p200(Z,r,t)); break;
        case 1:
          switch (m) {
            case 0: winRef1.document.write(p210(Z,r,t));break;
            case 1: winRef1.document.write(p211(Z,r,t));break;
          }
          break;
      }
      break;
  } // switch n

  // Alternativa 2
  var winRef2 = window.open('', '',
    'left=200,top=200,width=400,height=100,resizable=1');
  winRef2.document.write(eval("p" + n + l + m + "(Z,r,t)"));
}
</script>
</head>
<body>
<table width="400">
<tr>
<th><i>n</i></th>
<th><i>l</i></th>
<th>|<i>m</i><sub><i>l</i></sub>|</th>
<th><i>Z</i></th>
<th><i>r</i></th>
<th><i>θ</i></th>
<th>&nbsp;</th>
</tr>
<tr>
<td align="center">
<select id="n">
<option value="1"> 1 </option>
<option value="2"> 2 </option>
</select>
</td>
<td align="center">
<select id="l">
<option value="0">0</option>
<option value="1">1</option>
</select>

```

```

</td>
<td align="center">
  <select id="m">
    <option value="0">0</option>
    <option value="1">1</option>
  </select>
</td>
<td align="center">
  <input type="text" size="1" value="1" id="z">
</td>
<td align="center">
  <input type="text" size="1" value="1" id="r">
</td>
<td align="center">
  <input type="text" size="1" value="0" id="t">
</td>
<td align="center">
  <input type="button" value="OK" onClick="calcPsi()">
</td>
</tr>
</table>

</body>

<html>
</script>

```

Escolha os valores de  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $Z$ ,  $r$  e  $\theta$  e pressione OK. O script irá calcular o valor da função de onda para os parâmetros escolhidos e apresentá-lo em novas janelas (uma para cada alternativa de cálculo).

Resultado:

$n$	$l$	$ m_l $	$Z$	$r$	$\theta$	
<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="button" value="OK"/>

A listagem acima contém essencialmente três partes: (a) a instrução para a inclusão de um arquivo de script externo ao arquivo do documento; (b) um script declarado no arquivo do documento, como nos exemplos anteriores e (c) o corpo de um documento em HTML que contém mais elementos interativos.

Novamente, vamos fazer a análise da listagem de trás para frente, começando pela parte em HTML. Esta . Note o uso do `<colgroup>` para atribuir a todas as colunas o mesmo alinhamento no centro.

A primeira parte contém apenas uma tabela com 2 linhas e 7 colunas. Na primeira linha da tabela, estão especificados os títulos de cada coluna, utilizando o elemento `<th>...</th>`, que automaticamente centraliza o conteúdo da célula e deixa-o em negrito. Na segunda linha, estão 7 controles interativos delimitados pelo elemento `<input>`: três do tipo `select/option`, três do tipo `text` e um do tipo `button`. O espaço não separável `&nbsp;` foi colocado na última célula da primeira linha para preencher o espaço acima do botão OK. Em uma tabela sem bordas isto não faz diferença, mas em uma tabela com bordas faz. Experimente colocar borda (`table border=1`) na tabela e veja o resultado com e sem o `&nbsp;`.

Nas opções das caixas de seleção, os parâmetros `value` dos elementos `option` foram ajustados para os valores possíveis de  $n$ ,  $l$  e  $m_l$  e estes valores serão utilizados no script para decidir qual função deverá ser utilizada nos cálculos.

A função `calcPsi()` é executada quando o botão OK é pressionado. Esta função está definida no script e tem essencialmente 2 partes: a coleta dos dados dos elementos interativos para a escolha e cálculo da função e a realização dos cálculos propriamente ditos, em duas versões.

Na coleta de dados, é utilizado o método `getElementById()` do objeto `document`, que recebe como parâmetro o `id` único definido no corpo do documento. Note também a conversão de graus para radianos e o uso dos métodos `parseInt()` e `parseFloat()`.

A primeira maneira de escolher e chamar a função apropriada é feita utilizando estruturas `switch/case` aninhadas. Se você implementar o caso  $n = 3$ , verá que isto pode ficar realmente confuso. Na ponta dos galhos está a chamada ao método `document.write()`, que por sua vez chama a função de onda apropriada explicitamente, passando-lhe os parâmetros coletados na primeira parte.

Antes de tomar a decisão, no entanto, é criada uma nova janela de documento. Isto é feito com o método `open` do objeto `window`. O primeiro parâmetro passado à função é o URL a ser carregado na janela. Como no caso a janela não é utilizada para carregar uma página de outro lugar mas como saída para os cálculos, este parâmetro é passado vazio (""). O segundo parâmetro é o nome da janela, pelo qual poderá ser referenciada posteriormente. O terceiro parâmetro contempla as características da janela. No exemplo, especificamos a posição (`left`, `top`), o tamanho (`width`, `height`) e a possibilidade de redimensionamento (`resizable`). Entre outras possibilidades estão: `status`, `toolbar`, `menubar` e `scrollbars`. Experimente os valores 0 e 1 para estas características e veja os resultados.

O método `window.open()` retorna uma referência para a janela, que é armazenado na variável `winRef1`. Todas as vezes que desejarmos acessar esta janela (para escrever nela, por exemplo), utilizamos esta referência, como é feito em `winRef1.document.write(...)`.

A segunda maneira de chamar a função de onda apropriada "monta" uma *string* com o identificador da função e seus parâmetros concatenando a letra "p" com os dígitos em  $n$ ,  $l$  e  $m$  e com a lista de parâmetros. Este literal é passado para o método `eval()`, que assume que é um trecho de código JavaScript válido para ser executado. Apesar de não tão direta, esta alternativa é obviamente a mais simples e enxuta, principalmente se forem muitas as funções de onda que puderem ser calculadas.

Nessa alternativa, uma nova janela com características semelhantes à primeira é criada e sua referência armazenada na variável `winRef2`.

Nas duas alternativas, são chamadas funções `p100(Z, r, T)`, `p200(Z, r, T)` etc. que não estão definidas no script. Estas funções estão definidas em um arquivo à parte chamado `atomo-de-hidrogenio.js`, que é carregado no documento utilizando o elemento `<script>` com o parâmetro `src` ajustado para o nome do arquivo. Esta estrutura faz com que o código do arquivo externo seja incluído no documento como se tivesse sido digitado nele. Este arquivo tem que estar na mesma pasta onde se encontra o documento. Arquivos em outras pastas podem ser incluídos utilizando o esquema usual de especificar caminhos. Por exemplo, se o arquivo `atomo-de-hidrogenio.js` estiver em uma pasta chamada `js` dentro da pasta onde o

documento se encontra, a referência é `js/atomo-de-hidrogenio.js`; se estiver uma nível acima, a referência é `../atomo-de-hidrogenio.js`.

O arquivo incluído contém a definição das funções de onda para o estado fundamental ( $\Psi_{100}$ ) e o primeiro estado excitado ( $\Psi_{200}$ ,  $\Psi_{210}$  e  $\Psi_{21\pm 1}$ ) do átomo de hidrogênio:

```
function p100(Z,r,theta) {
var a = 1;
return 1/Math.sqrt(Math.PI) * Math.pow((Z/a),(3/2)) *
Math.exp(-Z*r/a); }

function p200(Z,r,theta) {
var a = 1;
return 1/(4*Math.sqrt(2*Math.PI)) *
Math.pow((Z/a),(3/2)) * (2-Z*r/a) * Math.exp(-Z*r/2/a); }

function p210(Z,r,theta) {
var a = 1;
return 1/(4*Math.sqrt(2*Math.PI)) * Math.pow((Z/a),(3/2)) *
(Z*r/a) * Math.exp(-Z*r/2/a) * Math.cos(theta); }

function p211(Z,r,theta) {
var a = 1;
return 1/(8*Math.sqrt(2*Math.PI)) * Math.pow((Z/a),(3/2)) *
(Z*r/a) * Math.exp(-Z*r/2/a) * Math.sin(theta); }
```

Nas funções implementadas, escolhemos um sistema de unidades em que o raio de Bohr  $a_0$  é igual a 1, quando no Sistema Internacional seu valor é de aproximadamente 0.5 nanômetros. Isto foi feito para simplificar a entrada de dados para os valores de  $r$ , que devem ser digitados em unidades do raio de Bohr.

Um detalhe sobre a física: a função  $\Psi_{21\pm 1}$  têm um termo complexo,  $e^{\pm i\phi}$ , que não foi codificado na função `p211` do arquivo `js`. Em mecânica quântica, as grandezas físicas observáveis estão relacionadas a  $|\Psi_{21\pm 1}|^2 = \Psi_{21\pm 1}^* \Psi_{21\pm 1}$ , em que o termo complexo desaparece. No entanto, em outros tipos de cálculos ele deve ser considerado. Será colocado como exercício ao leitor implementar o código para lidar com estes termos complexos.

Note ainda que, apesar de as funções  $\Psi_{100}$  e  $\Psi_{200}$  não dependerem de  $\tau$  ( $\theta$ ), ele foi incluído como parâmetro para a generalização da chamada. Como nestas funções este parâmetro não é acessado, não importa que valor tem.

Finalmente, segue abaixo o que deve ser digitado em L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X para obter as funções de onda para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado:

```
\documentclass[10pt]{report}
\usepackage{graphicx}

\begin{document}

\section*{\'A}tomo de hidrog\^{e}nio}
```

```

\begin{eqnarray*}
\Psi_{100} &=& \frac{1}{\sqrt{\pi}} \\
&& \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \\
&& e^{-Zr/a_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} \ \ \ \\
\Psi_{210} &=& \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \\
&& \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \\
&& \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \\
&& e^{-Zr/2a_0} \\
&& \cos\theta \ \ \ \\
\Psi_{21\pm 1} &=& \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \\
&& \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \\
&& \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \\
&& e^{-Zr/2a_0} \\
&& \sin\theta \ \ ; \ e^{\pm i\phi} \ \ \ \\
\end{eqnarray*}
\end{document}

```

## Exercícios

1. As equações para os estados com  $n = 3$  são:

$$\Psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$\Psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos\theta$$

$$\Psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$\Psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$\Psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}$$

$$\Psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

Digite estas equações no formato L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X no site:

<http://www.codecogs.com/components/equationeditor/equationeditor.php>

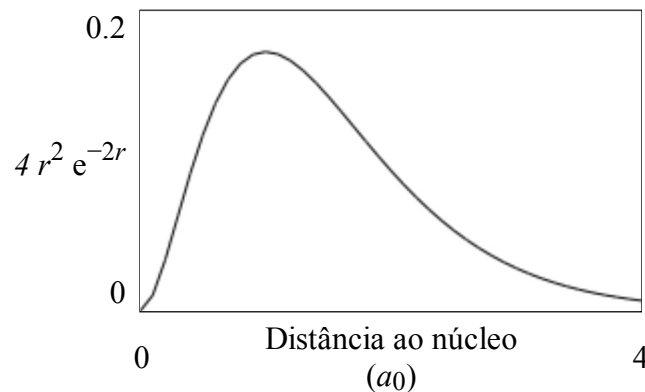
e veja se consegue reproduzi-las.

2. Modifique o script acima para incluir o caso  $n = 3$ .

3. Faça com que o script acima emita um aviso quando o usuário escolher valores inválidos para  $l$  e  $m_l$ , ou seja, quando  $l > n - 1$  e quando  $|m_l| > l$ .
4. Modifique o script para que também receba como parâmetro o valor de  $\varphi$  e retorne os valores da parte real e da parte imaginária da função de onda. Lembre-se que  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$ .
5. Modifique o script para que imprima 10 valores igualmente espaçados entre 0 e  $r$  para a função de onda escolhida.
6. Em mecânica quântica, as grandezas físicas observáveis estão relacionadas ao módulo quadrado da função de onda  $|\Psi_{nlm_l}|^2 = \Psi_{nlm_l}^* \Psi_{nlm_l}$ . No caso da posição de um elétron no estado fundamental de um átomo de hidrogênio ( $Z = 1$ ), a probabilidade de encontrá-lo a uma certa distância  $r$  (em unidades de  $a_0$ ) do núcleo é dada por:

$$P(r) = 4r^2 e^{-2r}$$

- a. Faça um gráfico desta probabilidade para valores de  $r$  entre 0 e 5.



- b. Represente a densidade de probabilidade de se encontrar o elétron em um plano que passa pelo núcleo atômico.

Na figura abaixo, a probabilidade é representada pela densidade de pontos por unidade de área. O canvas escolhido tem  $500 \times 500$  pixels e representa distâncias indo de  $-4$  a  $4$  unidades de  $a_0$ , para que você possa compará-lo com o gráfico acima, que tem 250 pixels de largura e vai de 0 a 4. Note que a densidade de pontos no centro é nula, cresce à medida que a distância cresce, atinge o máximo e então começa a diminuir, como esperado, segundo a função acima.

Para fazer a densidade de pontos, foi feito um laço `for` para o raio variando de 0 a 4 em passos  $dr = 0.1$ . Para cada raio, foi gerado um número  $N$  proporcional a  $4r^2 e^{-2r}$ , que representa o número de pontos em um anel de área  $(2\pi r)dr$ . Para distribuí-los aleatoriamente, sorteamos um ângulo  $\varphi$  e com ele calculamos as coordenadas  $x = r \cos \varphi$  e  $y = r \sin \varphi$ , que serão as coordenadas do centro de um pequeno círculo desenhado no canvas. Para evitar que os pontos parecessem estar distribuídos em círculos concêntricos, flutuamos levemente o raio antes de calcular  $x$  e  $y$ .

