Universidade de São Paulo
Instituto de Física

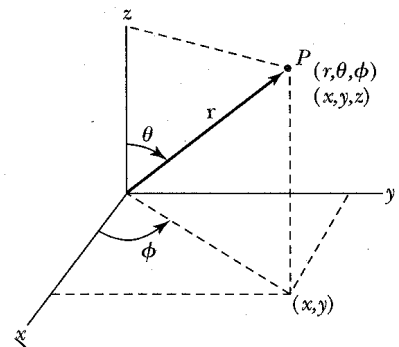
Física Moderna II

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto

1o. Semestre de 2011

A eq. de Schrödinger em coordenadas esféricas

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi$$



$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sen^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)+V\psi = E\psi$$

Separação de variáveis: $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$

Radial:

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

$$\lambda = \ell(\ell+1)$$

Angular:

$$-\frac{1}{Y(\theta,\phi)}\left(\frac{1}{sen\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\,\theta\frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right)=\lambda$$

Nova separação de variáveis

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = \frac{1}{\Theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + \lambda\sin^2\theta\,\Theta\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2$$

soluções oscilatórias da forma:

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}$$

, com m positivo ou negativo

$$-\left(\frac{1}{sen\,\theta}\frac{d}{d\theta}sen\,\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right) + \frac{m^2}{sen^2\theta}\Theta(\theta) = l(l+1)\Theta(\theta)$$

Soluções: Funções de Legendre

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = \frac{(sen\,\theta)^{|m|}}{2^\ell\,\ell}\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^{\ell+|m|}\left(\cos^2\theta - 1\right)^\ell$$

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)e^{im\phi}$$

$$\ell = 0,1,2,3.....$$

$$m_\ell = -\ell,-\ell+1,...,-2,-1,0,1,2,....\ell-1,\ell$$

Harmônicos esféricos normalizados $Y(\theta,\phi)=\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$

$\ell = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\ell = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\phi}$
$\ell = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta\, e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta\, e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta\, e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta\, e^{-2i\phi}$

São normalizados de acordo com a relação:

$$1 = \int_{\text{all } \Omega} |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 \, d\Omega$$

com $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\phi$

Quantização da energia
Resolução Eq. Radial

Até agora só tratamos da parte angular, que dependia apenas da simetria do problema, ou seja, do fato da força ser central. A dinâmica depende da forma de $V(r)$, e se manifesta na solução da parte radial:

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

$$\times\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}R\right.$$

$$\lambda_\ell=\ell(\ell+1),\ \ell=0,1,2,\ldots.$$

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

potencial efetivo: $$V_{\text{eff}}(r)=V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1)$$

Podemos escrever: $$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{2}{r}\left(\frac{dR}{dr}\right)+\frac{d^2R}{dr^2}\right]+V_{eff}.R=ER$$

Resolução Eq. Radial

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

Portanto as soluções $R(r)$ para um potencial $V_{eff}(r)$ devem apresentar as mesmas propriedades que as $\psi(x)$ para um potencial $V(x)$.

Cuidados necessários: x varia em $[-\infty, \infty]$ em 1D,
enquanto r varia em $[0, \infty]$ em 3D.

Como no caso em x, a eq. de Schrödinger deve apresentar uma família de soluções apropriadas, correspondendo a um conjunto de energias permitidas. Uma solução com energia E será aceitável se houver uma função $R(r)$ que seja contínua, unívoca e finita no intervalo $[0, \infty]$.

A dependência explícita de V_{eff} com ℓ é importante, pois mostra que a forma da eq. diferencial muda com a escolha de ℓ.

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

Isso mostra que cada ℓ deve ter uma seqüência de soluções para E e $R(r)$ e que elas devem depender de um **par** de índices, correspondentes a dois números quânticos: $R_{n\ell}(r)$ e $E_{n\ell}$

Soluções para a equação radial

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

Este termo de derivadas é a contribuição radial para a energia cinética, isto é representa a contribuição do movimento do elétron em torno do núcleo

$$\frac{d^2(rR)}{dr^2}=\frac{d}{dr}\frac{d}{dr}(rR)=\frac{d}{dr}\left(R+r\frac{dR}{dr}\right)=\frac{dR}{dr}+\frac{dR}{dr}+r\frac{d^2R}{dr^2}$$

Ficando:

$$\frac{d^2(rR)}{dr^2}=r\left[\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{d^2R}{dr^2}\right]$$

Que leva a:

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1) \qquad V(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r}\frac{d^2}{dr^2}rR - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1)R = ER.$$

Soluções para a equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r}\frac{d^2}{dr^2}rR - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1)R = ER.$$

Vamos fazer mudanças de variáveis , introduzindo:

o raio de Bohr (a)

$$r = a\rho = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{Ze^2\mu}\rho$$

$$dr = a d\rho$$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{\hbar^2}{\mu a}$$

e a energia de Rydberg:

$$E = -\frac{\mu}{m_e}Z^2E_0\eta = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\eta.$$

Ficando:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu a^3\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}a\rho R - \frac{\hbar^2}{\mu a^2\rho}R + \frac{\hbar^2}{2\mu a^2\rho^2}\ell(\ell+1)R = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\eta R.$$

Que leva a:

$$\frac{d^2}{d\rho^2}\rho R + 2R - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho}R = \eta\rho R.$$

A solução deve tender a 0 no infinito e deve apresentar zeros. Então:

$$R = e^{-\sqrt{\eta}\rho}\frac{F(\rho)}{\rho}$$

sendo que o polinômio F deve obedecer à seguinte equação:

$$F'' - 2\sqrt{\eta}F' + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]F = 0$$

com

$$\sqrt{\eta} = \frac{1}{n}$$

sendo n a ordem do polinômio.

Assim, as funções são definidas por: $R_{n\ell} = e^{-\rho/n} \dfrac{F_{n\ell}(\rho)}{\rho}$ com $\rho = \dfrac{r}{a}$.

São as funções denominadas polinômios de Laguerre

Alguns exemplos de funções **radiais** normalizadas:

$n = 1$ $\quad \ell = 0 \quad$ $R_{10} = \dfrac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\rho}$

$n = 2$ $\quad \ell = 0 \quad$ $R_{20} = \dfrac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \dfrac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2}$

$\ell = 1 \quad$ $R_{21} = \dfrac{1}{2\sqrt{6a^3}} \rho e^{-\rho/2}$

$n = 3$ $\quad \ell = 0 \quad$ $R_{30} = \dfrac{2}{3\sqrt{3a^3}} \left(1 - \dfrac{2}{3}\rho + \dfrac{2}{27}\rho^2\right) e^{-\rho/3}$

$\ell = 1 \quad$ $R_{31} = \dfrac{8}{27\sqrt{6a^3}} \rho \left(1 - \dfrac{\rho}{6}\right) e^{-\rho/3}$

$\ell = 2 \quad$ $R_{32} = \dfrac{4}{81\sqrt{30a^3}} \rho^2 e^{-\rho/3}$

Assim, as soluções estacionárias devem apresentar a seguinte estrutura:

$$\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi,t) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)e^{-iE_{n\ell}t/\hbar}$$

R_{nl} (r) funções radiais (polinômios de Laguerre)

$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)e^{im\phi}$ São chamados de harmônicos esféricos

e E_{nl} autovalores de energia

E podemos notar que o nosso problema 3D requer, como esperado, o aparecimento de 3 números quânticos. Como vimos, ℓ e m estão associados à parte angular da função de onda:

e podemos assumir que n indica os níveis de energia para um dado ℓ, de tal forma que as energias cresçam com n, como no caso 1D. Sabemos que a energia de um estado aumenta com o número de nós da função. Isso deve também ser verdade para $rR(r)$, pois satisfazem eqs. análogas. Assim, n deve ser um número quântico dos nós radiais, indicando o número de nós na função $rR(r)$.

Mas como n se relaciona com l e m??????

Autofunções e Autovalores

Quero entender o que é isto: $$-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = \frac{1}{\Theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + \lambda\sin^2\theta\,\Theta\right)$$

A importância dos harmônicos esféricos fica mais clara quando lembramos os operadores do momento angular: $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$

exemplo

operador

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = -i\hbar\left(-sen\,\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{tg\,\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

Coordenadas esféricas

Os harmônicos esféricos são simultaneamente autofunções dos operadores L^2 e L_z :

$$L_z = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$ e $$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{sen\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(sen\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

$$L^2 \to -\hbar^2\Lambda^2$$ e $$L_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Assim os estados estacionários, associados a um potencial central, apresentam autofunções de L^2 e L_z tais que:

$$-\hbar^2\Lambda^2 Y_{\ell m} = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m} \quad \text{e} \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}.$$

momento angular orbital, associada a R(r), $\Theta(\theta)$ e ao módulo de L
número quântico magnético, associado a componente z do momento angular

1. os autovalores de L^2 são iguais a $\hbar^2\ell(\ell+1)$, sendo ℓ um inteiro não negativo

$$\boldsymbol{L_{op}^2\psi(r,\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)\psi(r,\theta,\phi)}$$

2. os autovalores de L_z são iguais a $\hbar m$, sendo m um inteiro tal que : $-\ell \le m \le \ell$

$$\boldsymbol{L_z\,\psi(r,\theta,\phi) = m\hbar\,\psi(r,\theta,\phi)}$$

Isso mostra que os valores possíveis de L^2 e de L_z são discretos **(quantizados)**, evidenciando a quantização do momento angular e da componente z do momento angular.

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

$$\boldsymbol{L_z = m_l\hbar} \quad m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots,$$

$$\mathbf{L} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\mathbf{\Lambda}$$

Porque o tratamento especial para L_z?

Vamos analisar as componentes cartesianas de L:

$$\Lambda_x = y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}, \quad \Lambda_y = z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}, \quad \text{e} \quad \Lambda_z = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}.$$

E assim,
$$\Lambda_x\Lambda_y - \Lambda_y\Lambda_x = -\Lambda_z,$$
$$\Lambda_y\Lambda_z - \Lambda_z\Lambda_y = -\Lambda_x,$$
$$\Lambda_z\Lambda_x - \Lambda_x\Lambda_z = -\Lambda_y.$$

Vamos assumir a existência de um estado no qual o vetor $\mathbf{L}$ tenha um valor bem definido, dado por $\hbar\left(\ell_x\hat{\mathbf{x}} + \ell_y\hat{\mathbf{y}} + \ell_z\hat{\mathbf{z}}\right)$

Se a nossa hipótese é verdadeira, então:
$$\frac{\hbar}{i}\Lambda_x\Psi = \hbar\ell_x\Psi,$$
$$\frac{\hbar}{i}\Lambda_y\Psi = \hbar\ell_y\Psi,$$
$$\frac{\hbar}{i}\Lambda_z\Psi = \hbar\ell_z\Psi.$$

Nesse caso, podemos escrever:

$$\ell_z\Psi = -i\Lambda_z\Psi = i\left(\Lambda_x\Lambda_y - \Lambda_y\Lambda_x\right)\Psi$$

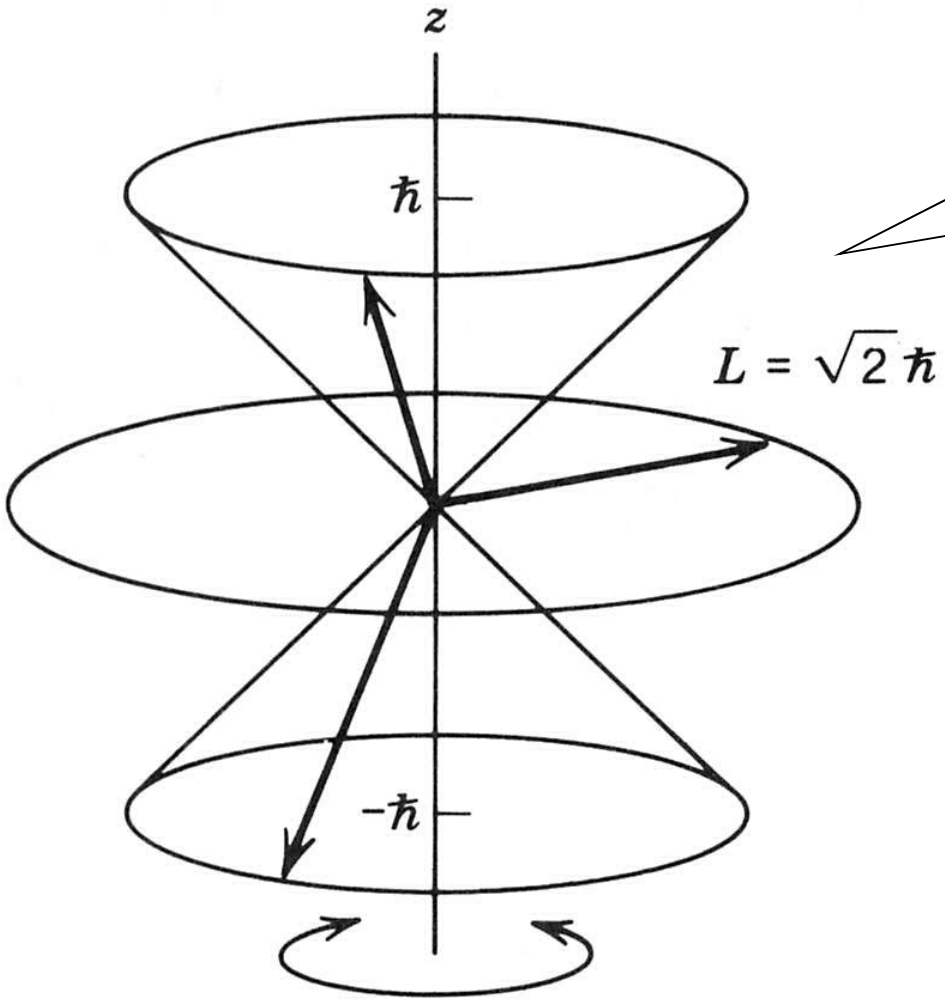
o que leva a: $\ell_z\Psi = i\left(i\ell_x i\ell_y - i\ell_y i\ell_x\right)\Psi$

mostrando que ℓ_z se anula nesse estado.

De maneira análoga podemos mostrar que ℓ_x e ℓ_y também se anulam.
Portanto um estado pode ter o vetor $\mathbf{L}$ com valor bem definido, desde que esse valor seja 0.

Apenas uma das observáveis L_x, L_y ou L_z pode ser determinada com incerteza nula e a escolhida foi L_z. A figura abaixo mostra os valores do momento angular para o caso $\ell = 1$.

Modelo vetorial do átomo ilustrando as orientações possíveis de **L** no espaço e os valores possíveis de L_z



incerto

Não confundir com precessão!

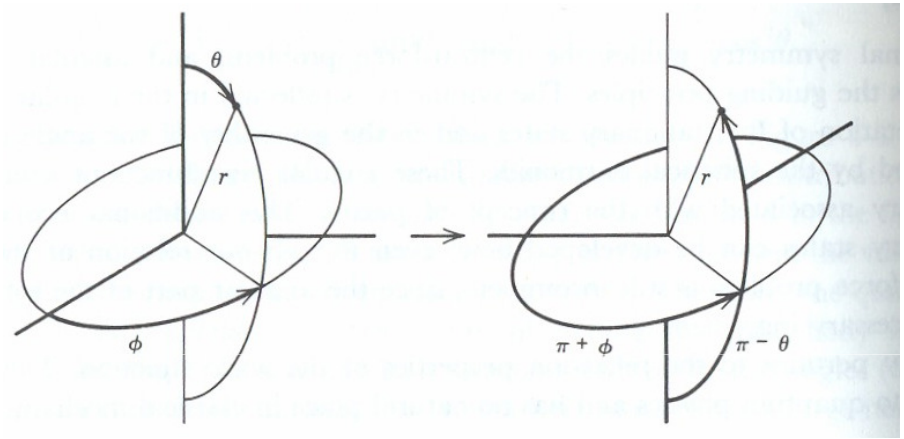
O vetor momento angular nunca aponta no sentido do eixo z (a maior componente possível neste eixo é m, que é sempre menor que o módulo do vetor) .

Isto se deve ao princípio de indeterminação do momento angular, o que diz que é impossível determinar com precisão absoluta duas componentes do momento angular (L_x e L_y)

As autofunções angulares exibem uma simetria associada a Paridade

esta relacionada as propriedades de reflexão das funções de onda

Eixo cartesiano é invertido,os ângulos polares são medidos a partir de uma nova direção z como $\pi-\theta$ e o ângulo azimutal é medido a partir de um novo x como $\pi+\phi$



Operação de inversão de coordenadas. No caso de coordenadas esféricas:

$r \to r$; $\theta \to \pi - \theta$; e $\phi \to \pi + \phi$.

A paridade dos harmônicos esféricos é dada por:

$$Y_{\ell m}(\pi-\theta,\pi+\phi) = \Theta_{\ell m}(\pi-\theta)e^{im(\pi+\phi)}$$

$$= (-1)^{\ell+m}\Theta_{\ell m}(\theta)(-1)^{m}e^{im\phi} = (-1)^{\ell}Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Dessa forma, vemos que os estados estacionários, além das propriedades associadas ao momento angular, têm paridade bem definida, que é determinada apenas por ℓ: estados com ℓ par, têm paridade par e com ℓ ímpar, paridade ímpar.

Então podemos tirar uma primeira conclusão a respeito do problema de forças centrais:

devem existir funções de onda que sejam autofunções **simultâneas** da energia, do quadrado do momento angular e de sua componente z.

Isso significa que podemos determinar essas 3 quantidades ao mesmo tempo.

Devemos também notar que o número quântico m não aparece como índice da energia quantizada. Isso é assim porque ele não aparece na equação diferencial e portanto as soluções correspondentes não podem depender dele. Isso indica a existência de uma degenerescência, uma vez que $E_{n\ell}$ não depende de m. Para cada valor de $E_{n\ell}$ existem $2\ell + 1$ funções de onda diferentes, uma para cada possível valor de m.

Essa degenerescência é mais uma conseqüência da simetria rotacional da força central. A força não provê uma direção natural para a escolha do eixo z, e, portanto, observáveis como a energia não podem depender de m, o número quântico associado a essa escolha.

TAMBÉM, quando a força é central a energia **NÃO** depende de ℓ , a energia só é função de n $= E_n$

O problema 3D requer, como esperado, o aparecimento de 3 números quânticos. Como vimos, ℓ e m estão associados à parte angular da função de onda e para cada valor de $E_{n\ell}$ existem $2\ell + 1$ funções de onda diferentes, uma para cada possível valor de m. Dessa forma, a degenerescência do nível n, será: $d_n = n^2$

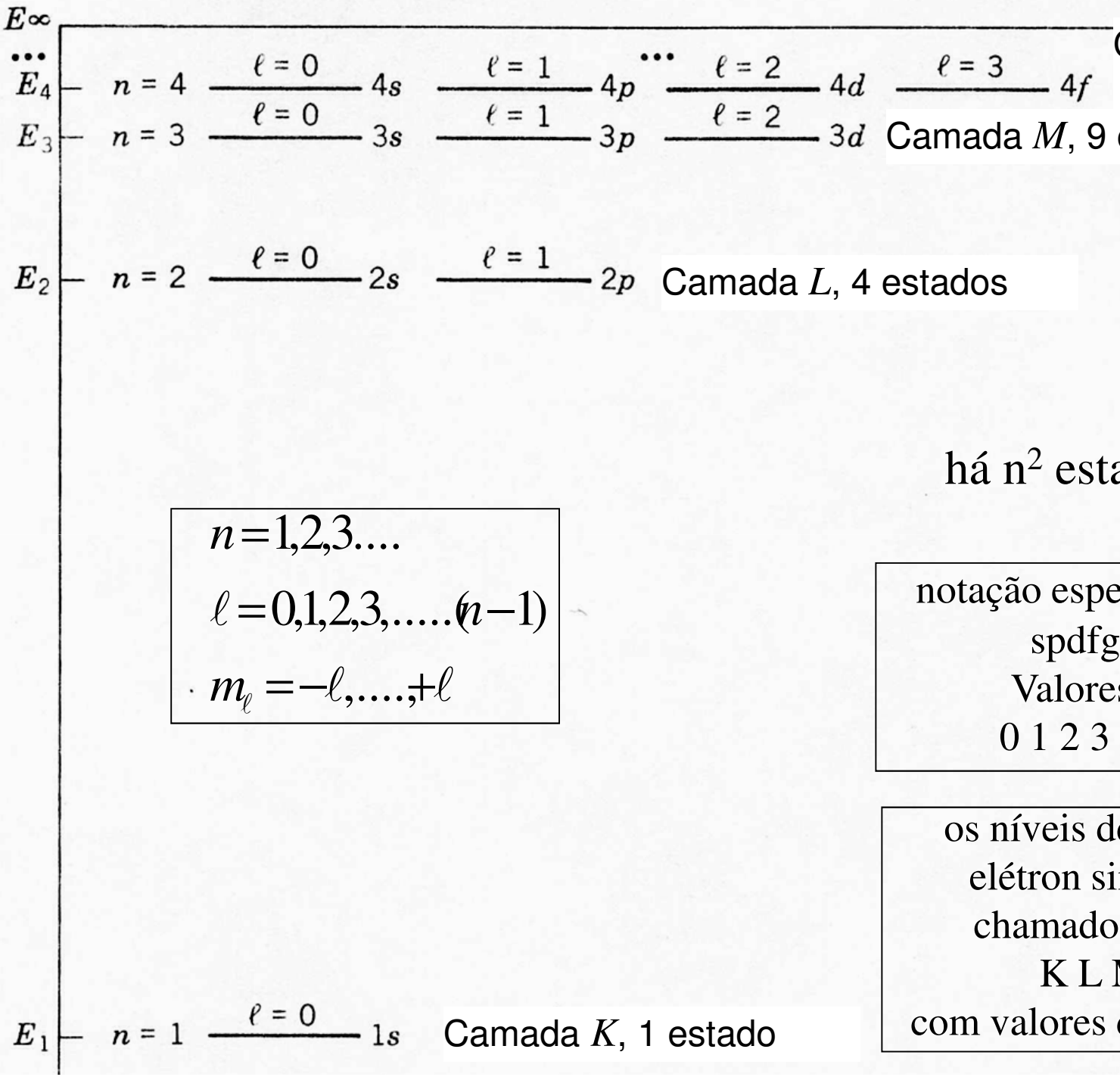
degenerescência

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi,t) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)e^{-E_{nl}t/\hbar}$$

No caso do átomo de H – força central E= E_n

$\boldsymbol{n} = 1, \boldsymbol{l} = 0, \boldsymbol{m} = 0$ $\quad \psi_{100} = R_{10}Y_{00}e^{-E_1 t/\hbar}$ estado não degenerado

$$\left.\begin{array}{ll} \boldsymbol{n} = 2, \boldsymbol{l} = 0, \boldsymbol{m} = 0 & \psi_{200} = R_{20}Y_{00}e^{-E_2 t/\hbar} \\ \boldsymbol{l} = 1; \boldsymbol{m} = 1,0,-1 & \psi_{21m} = R_{21}Y_{1m}e^{-E_2 t/\hbar} \end{array}\right\} \text{4 estados degenerados}$$



Camada N, 16 estados

Camada M, 9 estados

Camada L, 4 estados

Camada K, 1 estado

$$d_n = n^2$$

há n^2 estados distintos

$$n = 1, 2, 3 \ldots$$
$$\ell = 0, 1, 2, 3, \ldots (n-1)$$
$$m_\ell = -\ell, \ldots, +\ell$$

notação espectroscópica
spdfgh....
Valores de l
0 1 2 3 4 5....

os níveis de energia do elétron simples são chamados camadas
K L M N...
com valores de n 1 2 3 4 ...

Átomos com 1 elétron

Parte radial da eq. de Schrödinger, com autovalor de energia E:

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

Vamos inicialmente nos concentrar nos casos em que $\ell = m = 0$, o que nos restringe aos harmônicos esféricos Y_{00} (que são constantes): (isto seria o estado fundamental n=1)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{2}{r}\left(\frac{dR}{dr}\right)+\frac{d^2R}{dr^2}\right]-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}R=ER$$

Potencial Coulomb

Como a solução deve tender a 0, quando r tende a infinito, podemos tentar uma função que decaia exponencialmente:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(R''+\frac{2}{r}R'\right)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R=ER.$$

$$R(r)=Ae^{-r/a}$$

$$R(r) = Ae^{-r/a}$$

Temos, então, que:

$$R' = -\frac{A}{a}e^{-r/a} = -\frac{R}{a} \quad \text{e} \quad R'' = \frac{A}{a^2}e^{-r/a} = \frac{R}{a^2}$$

Substituindo na equação:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar}\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = E$$

$$\left(\frac{1}{a^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\right) + \left(\frac{2\mu Ze^2}{4\pi\varepsilon_o\hbar^2} - \frac{2}{a}\right)\frac{1}{r} = 0$$

Essa igualdade vale para qualquer r, desde que o coeficiente de $1/r$ se anule:

$$\left(\frac{2\mu Ze^2}{4\pi\varepsilon_o\hbar^2} - \frac{2}{a}\right) = 0$$

O que fornece um valor para o parâmetro a:

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{Ze^2\mu}$$

Que é o raio de Bohr:

autovalores da energia:

$$\left(\frac{1}{a^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\right) = 0 \Longrightarrow E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$$

Coincide com a expressão de Bohr para o estado fundamental do H.

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{(Ze^2\mu)^2}{(4\pi\varepsilon_o\hbar^2)^2} = -\frac{Z^2e^4\mu}{(4\pi\varepsilon_o)^2 2\hbar^2}$$

$$E_n = -\frac{Z^2e^4\mu}{(4\pi\varepsilon_o)^2 2\hbar^2 n^2}$$

Escrevendo em termos da energia de Rydberg, E_0:

$$E = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 E_0, \quad \text{onde} \quad E_0 = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2}$$

Assim, a função de onda para o estado fundamental pode ser escrita como:

usando $$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad R_{10} = \sqrt{\frac{4}{a^3}}\, e^{-r/a}$$

$$\Psi_{100} = R_{10} Y_{00} = e^{-r/a} \sqrt{\frac{4}{a^3}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{-iE_1^{Bohr} t/\hbar}$$

E a energia: $$E_{10} = E_1^{\text{Bohr}} = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 E_0$$

podemos verificar a constante de normalização:

$$\int |\Psi_{100}|^2 \, d\tau = \int d\Omega \int_0^\infty r^2 \, dr \frac{e^{-2r/a}}{\pi a^3} \qquad d\tau = r^2 \, dr \sin\theta \, d\theta \, d\phi = r^2 \, dr \, d\Omega$$

$$= \frac{4\pi}{\pi a^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} \, dr = \frac{4}{a^3} 2! \left(\frac{a}{2}\right)^3 = 1$$

Ela vai aparecer bastante!

Lembrando que: $$\int_0^\infty r^n e^{-r/r_0} \, dr = n! \, r_0^{n+1}$$