Aula 22.11.2011

galdino

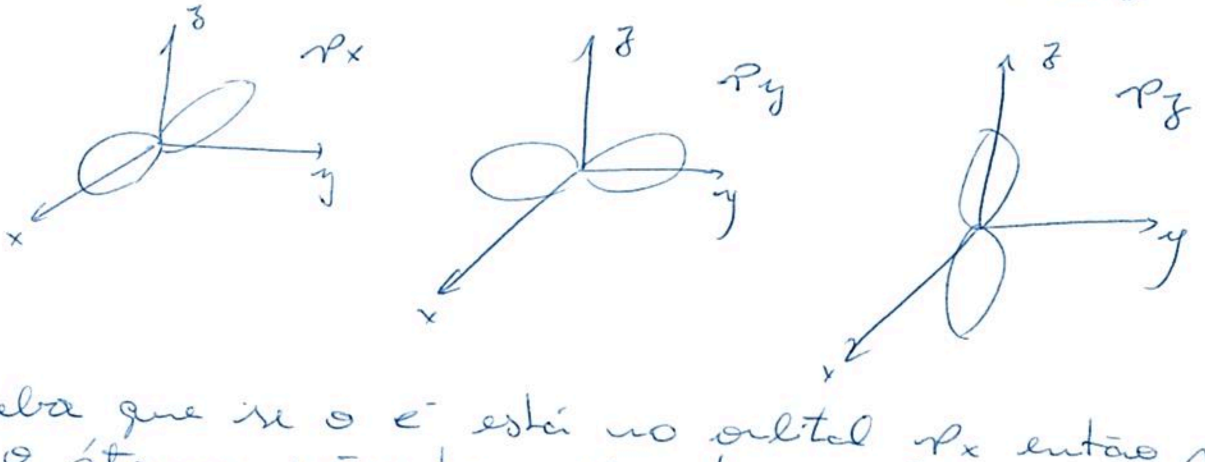
Porque os átomos são esféricos?

Para mais informações ver: J. Chem. Educ., 1965, 42(3), p145 por Ronald C. Johnson e R.R. Rettew.

↳ esse artigo sofreu uma correção importante, ver: J. Chem. Educ., 1965, 42(7), p397 por Irwin Cohen

O átomo de H no seu estado fundamental é intuitivamente esférico dado que o e^- está no orbital 1s e esse orbital é simetricamente esférico.

Vamos imaginar o átomo de H no seu primeiro estado excitado. Vamos supor que o e^- ~~possui um~~ está em um orbital p (momento angular $l = 1$). Em qual dos orbitais p o e^- se encontra?



Perceba que se o e^- está no orbital p_x então parece que o átomo não tem simetria esférica, pois o orbital não tem simetria esférica.

Perceba que se ~~os~~ o e^- está ~~no orb~~ em um orbital p então ele está em uma combinação linear dos orbitais p_x, p_y, p_z, pois se o átomo está isolado então as energias de p_x, p_y e p_z são iguais.

Para facilitar vamos imaginar um átomo com 3 e^- cada um em ~~um~~ um dos orbitais p_x, p_y e p_z (isso facilita as contas porque se fosse apenas 1 e^- ia ter uns termos a mais que dão um pouco de trabalho - mas nem tanto)

A forma desse átomo está relacionada com a prob. de achar um e^- em determinada posiç, ou seja o formato do átomo é dado por

$$|\Psi_{p_x}|^2 + |\Psi_{p_y}|^2 + |\Psi_{p_z}|^2 \qquad (1)$$

Desconsiderando a parte radial e escrevendo os orbitais em termos de harmonicos esfericos a eq (1) pode ser escrita como

$$|Y_1^0|^2 + |Y_1^1|^2 + |Y_1^{-1}|^2 \qquad (2)$$

Usando $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$, $Y_1^{+1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\phi}\sin\theta$,

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{-i\phi}\sin\theta \qquad (3)$$

temos que,

$$\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta + \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta + \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta = \boxed{\frac{3}{4\pi}} \qquad (4)$$

Perceba que o resultado (4) não depende de θ ou ϕ mostrando que a prob. de achar um e^- não depende da direç (apenas da distância do núcleo).
Esse raciocinio é válido para átomos isolados.