

O átomo de hidrogênio

Introdução à Química Moderna

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

1 Uma partícula em um potencial de força central

Uma força central é derivada de uma energia potencial esfericamente simétrica, isto é:

$$V = V(r) \quad (1)$$

onde r é a distância da partícula para a origem. Definimos a força como:

$$\mathbf{F} = -\nabla V(r) = \frac{\partial V}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial V}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial V}{\partial z} \mathbf{k} \quad (2)$$

Como o potencial é uma função de r , é mais conveniente descrever esse sistema em coordenadas esféricas, em que:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta. \end{aligned} \quad (3)$$

Em coordenadas esféricas, as derivadas da energia potencial são mais simples. Como o potencial é central:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial \theta}\right) = 0 \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial V}{\partial \phi}\right) = 0, \quad (4)$$

logo somente precisamos nos preocupar com a derivada com relação a r :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right) &= \frac{dV}{dr} \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial V}{\partial y}\right) &= \frac{dV}{dr} \left(\frac{\partial r}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial V}{\partial z}\right) &= \frac{dV}{dr} \left(\frac{\partial r}{\partial z}\right). \end{aligned} \quad (5)$$

Assim, levando em consideração as relações das equações 3, temos que:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right) &= \frac{x}{r} \frac{dV}{dr} \\ \left(\frac{\partial V}{\partial y}\right) &= \frac{y}{r} \frac{dV}{dr} \\ \left(\frac{\partial V}{\partial z}\right) &= \frac{z}{r} \frac{dV}{dr}. \end{aligned} \quad (6)$$

Substituindo as derivadas em cada direção na equação 2, obtemos:

$$\mathbf{F} = -\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}) = -\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} = -\frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{r}} \quad (7)$$

Considere, agora, o problema quântico de um potencial central. A energia do sistema é representada pelo operador Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r), \quad (8)$$

onde \hat{T} é o operador de energia cinética, \hat{V} é o operador de energia potencial, $\hbar = h/2\pi$ e m é a massa da partícula. Neste problema, precisamos transformar o operador ∇^2 , chamado de Laplaciano, em coordenadas esféricas. Sem demonstração, temos que:

$$\nabla^2 = \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (9)$$

O Laplaciano pode ser simplificado se lembrarmos do operador de momentum angular ao quadrado, \hat{L}^2 :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{L}^2 \quad (10)$$

Essa substituição simplifica o aspecto do Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + V(r) \quad (11)$$

Em mecânica quântica é importante saber se os estados podem ter sua energia e seu momentum angular determinados simultaneamente. Isso é feito verificando se os operadores comutam, isto é, se $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{T} + \hat{V}, \hat{L}^2] = [\hat{T}, \hat{L}^2] + [\hat{V}, \hat{L}^2]. \quad (12)$$

Como $V = V(r)$ e \hat{L}^2 independe de r , $[\hat{V}, \hat{L}^2] = 0$. Assim, temos que analisar se o momentum angular comuta com a energia cinética:

$$[\hat{T}, \hat{L}^2] = \frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}, \hat{L}^2 \right] + \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \hat{L}^2, \hat{L}^2 \right] \quad (13)$$

Já vimos que o operador de momentum angular independe de r , portanto o primeiro termo da equação 13 é zero. O segundo termo, por sua vez, também é zero porque um operador comuta consigo mesmo, assim $[\hat{T}, \hat{L}^2] = 0$ e, por extensão:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0, \quad (14)$$

portanto tanto o operador Hamiltoniano quanto o operador \hat{L}^2 possuem as mesmas autofunções. Como o operador de momentum angular na direção z , $\hat{L}_z = -i\hbar \partial / \partial \phi$, também comuta com o operador do momentum angular ao quadrado, $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$, ele também comuta com o operador Hamiltoniano:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0, \quad (15)$$

e os três operadores – \hat{H} , \hat{L}^2 e \hat{L}_z – tem as mesmas autofunções:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi \\ \hat{L}^2\psi &= \ell(\ell+1)\hbar^2\psi & \ell &= 0, 1, 2, \dots \\ \hat{L}_z\psi &= m\hbar\psi & m &= -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell \end{aligned} \quad (16)$$

Podemos convenientemente reescrever a equação de Schrödinger definida pelo Hamiltoniano da equação 11 como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \psi + V(r)\psi = E\psi \quad (17)$$

Sabemos do exemplo de uma partícula se movendo na superfície de uma esfera (ou do rotor rígido) que as autofunções de \hat{L}^2 são chamadas de harmônico esféricos, $Y_\ell^m(\theta, \phi)$. Como \hat{L}^2 independe de r , qualquer função $\psi = R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi)$ também será autofunção de \hat{L}^2 e \hat{L}_z . Assim, podemos dizer que a função de onda de uma partícula num potencial central é:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (18)$$

Substituindo ψ na equação 17 e dividindo ambos lados por $Y_\ell^m(\theta, \phi)$, temos a equação radial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) \right) + \left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right) R(r) = E(r) \quad (19)$$

2 Análise do Hamiltoniano atômico

Sabendo que conseguimos separar o movimento do centro de massa e o movimento interno do átomo de hidrogênio, podemos lidar somente com a equação de Schrödinger eletrônica. Reescrevendo o Laplaciano em coordenadas esféricas e reorganizando a equação:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \psi(r, \theta, \phi) + \left[\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi). \quad (20)$$

Como \hat{L}^2 independe de r e $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$, podemos usar os autovalores de \hat{L}^2 como substituto do operador hamiltoniano:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \psi(r, \theta, \phi) + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi). \quad (21)$$

O termo entre colchetes na equação 21 pode ser interpretado como um potencial efetivo:

$$V_{\text{efetivo}} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (22)$$

No caso do átomo de hidrogênio, o potencial central $V(r)$ é um potencial eletrostático de atração entre duas cargas:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_{\text{próton}}Q_{\text{elétron}}}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}, \quad (23)$$

onde Z é o número atômico do átomo de hidrogênio, e é o valor absoluto das cargas do próton e do elétron. Observe que a equação 23 mostra um potencial atrativo, pois seu sinal é negativo. O segundo termo da equação 22 se refere ao momentum angular do elétron e é desestabilizante, pois $\ell = 0, 1, 2, \dots$:

$$V(\ell) = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (24)$$

A figura 1 mostra os efeitos do momentum angular sobre o potencial efetivo. Se $\ell = 0$, o termo coulômbico atrativo é o único existente. Se $\ell > 0$, o termo repulsivo $\propto r^{-2}$ é dominante nas proximidades do núcleo, indicando que um momentum angular não-nulo previne a aproximação do núcleo. O momentum angular orbital, definido pelo número quântico ℓ , tende a manter o elétron afastado do núcleo. Podemos ter uma ideia do comportamento das soluções da equação

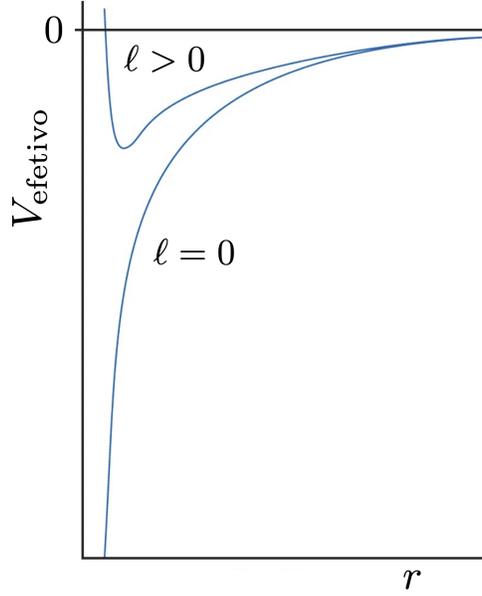


Figura 1: Potencial efetivo sentido pelo elétron a uma distância r do núcleo em função de ℓ .

de Schrödinger radial, equação 19. Reorganizando a equação, multiplicando ambos lados por r e considerando $u(r) = rR(r)$, temos a equação diferencial:

$$u'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) u = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} u. \quad (25)$$

Quando $\ell = 0$, a equação se torna:

$$u'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) u = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} u \quad (26)$$

Nas proximidades do núcleo, $V(r)$ é tão maior que E que a equação pode ser aproximada para:

$$u'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) u \approx 0 \quad \ell = 0, r \approx 0 \quad (27)$$

e nessas condições, a solução u pode ser representada por uma série de potências:

$$u \approx Ar + Br^2 + \dots \quad (28)$$

Quando $r \rightarrow 0$, a função de onda radial tem forma:

$$R(r) = \frac{u}{r} \approx A. \quad (29)$$

A equação 29 significa que, quando $\ell = 0$, há uma probabilidade finita de encontrar o elétron no núcleo.

Quando $\ell \neq 0$ e $r \rightarrow 0$, o termo repulsivo domina e a equação diferencial se torna:

$$u'' - \frac{\ell(\ell-1)}{r^2} u \approx 0 \quad \ell \neq 0, r \approx 0 \quad (30)$$

A solução nessas circunstância deve ser:

$$u \approx Ar^{\ell+1} + \frac{B}{r^\ell}. \quad (31)$$

Como $R = u/r$ e R deve ser finito em todo lugar, $B = 0$ e a função radial tem forma aproximada:

$$R \approx Ar^\ell, \quad (32)$$

o que significa que para $\ell \neq 0$ todas as funções de onda serão zero no núcleo e o elétron não será encontrado lá.

3 As soluções da equação de Schrödinger radial do átomo de hidrogênio

Sabemos que a solução da equação de Schrödinger do átomo de hidrogênio é o produto de uma função de onda radial, $R(r)$, e de um harmônico esférico, $Y_\ell^m(\theta, \phi)$. Infelizmente a resolução da equação diferencial é mais apropriada para um curso de Métodos Matemáticos da Física e não há tempo hábil para resolvê-la em sala de aula, mas podemos discutir as propriedades das soluções. A forma da solução é:

$$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (33)$$

onde:

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell}r^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2Zr}{na}\right)e^{-r/na}, \quad (34)$$

onde n é o chamado **número quântico principal**, ℓ é o **número quântico de momentum angular orbital**, $N_{n\ell}$ é a constante de normalização, a é o raio de Bohr e $L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2Zr/na)$ são os polinômios associados de Laguerre. A solução angular é o harmônico esférico:

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = N_\ell^m P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}, \quad (35)$$

onde N_ℓ^m é a constante de normalização, m é o **número quântico magnético** e $P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$ são as funções associadas de Legendre.

A solução da equação de Schrödinger do átomo de hidrogênio impõe condições aos números quânticos:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ \ell &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ m &= -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell, \end{aligned} \quad (36)$$

e a energia dos níveis quânticos é função apenas de n :

$$E = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 a} \frac{1}{n^2}, \quad (37)$$

o que pode ser visto na figura 2, onde também podemos notar que os níveis de energia se tornam cada vez mais próximos a medida que n aumenta. Observe que a energia dos níveis eletrônicos

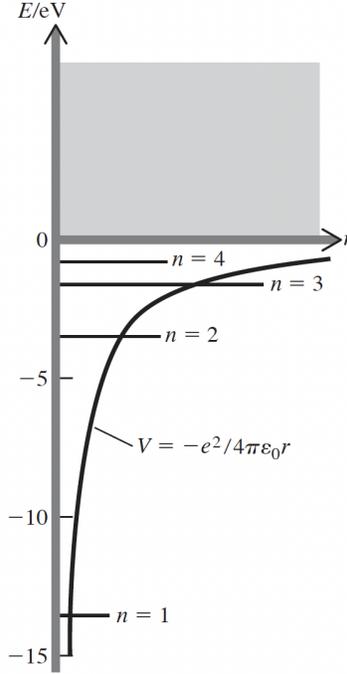


Figura 2: Níveis de energia ligantes do átomo de hidrogênio.

encontradas pela equação de Schrödinger concorda com os resultados empíricos das séries espectrais:

$$\frac{1}{\lambda_{n(m)}} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = m + 1, m + 2, m + 3, \dots), \quad (38)$$

onde $\lambda_{n(m)}$ é o comprimento de onda da radiação emitida no decaimento $n \rightarrow m$ e R_H é a constante de Rydberg para o átomo de hidrogênio.

Observe que a função de onda radial contém dois termos polinomiais r^ℓ e $L_{n+\ell}^{2\ell+1}$ que implicam na existência de nós radiais, i.e., pontos quem que $R_{n\ell}(r) = 0$. No total, uma função de onda radial $R_{n\ell}$ possui:

$$\text{Nós radiais} = n - \ell - 1, \quad (39)$$

Assim, a função de onda do estado fundamental ($n = 1$ e $\ell = 0$) não tem nenhum nó radial, mas a função de onda do estado $n = 3$ e $\ell = 1$ tem um nó radial. Algumas funções de onda radiais podem ser vistas na figura 3. As partes angulares da função de onda também introduzem regiões onde $\psi = 0$, os chamados de nós angulares. O número total de nós angulares é ℓ , fazendo o número total de nós de uma função de onda ser:

$$\text{Total de nós} = n - 1. \quad (40)$$

Perceba que m não é contabilizado na geração de nós e que os estados ganham nomes de acordo com os seus números quânticos de momentum angular. Se $\ell = 0$, o estado é chamado de **s** (“*sharp*”). Se $\ell = 1$, é chamado de **p** (“*principal*”); se $\ell = 2$, **d** (“*diffuse*”); $\ell = 3$, **f** (“*fundamental*”). Assim, funções de onda ψ_{100} , ψ_{210} , ψ_{320} e ψ_{430} são chamadas de $1s$, $2p$, $4d$ e $4f$, respectivamente. O número quântico magnético, m , está associado com a orientação da função de onda com momentum

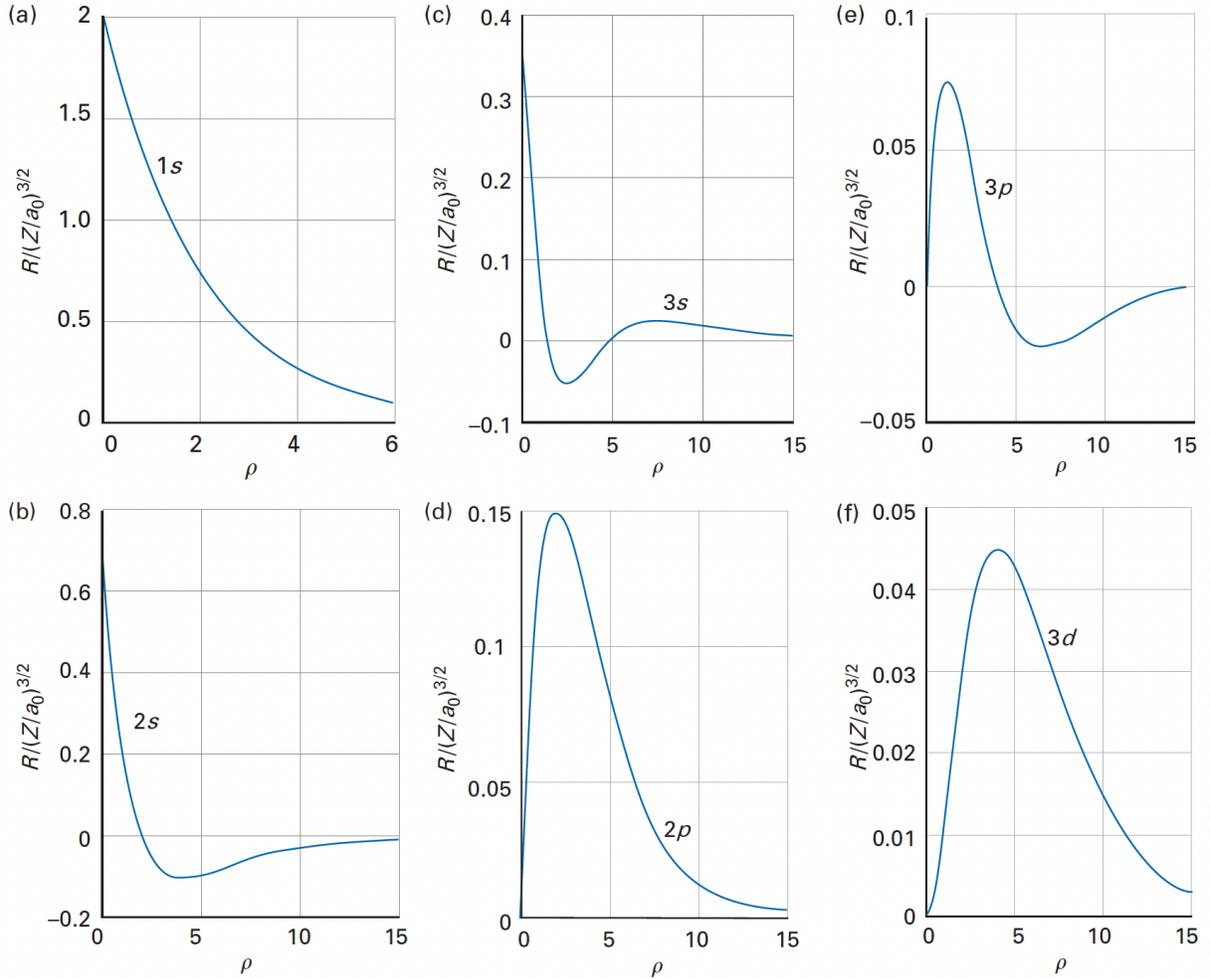


Figura 3: Funções de onda radial do átomo de hidrogênio, onde $\rho = r/a$

angular não-nulo no espaço. Por exemplo, uma função de onda np_0 tem componente angular igual a:

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta. \quad (41)$$

Note que $2p_0$ não depende de ϕ , implicando que a função de onda é simétrica em relação a rotações no eixo z (figura 4). O termo $\cos \theta$, por sua vez, é positivo para $0 \leq \theta < \pi/2$ e $3\pi/2 < \theta < 2\pi$ e é negativo para $\pi/2 < \theta < 3\pi/2$, indicando que inverte o sinal ao atravessar a origem ($\theta = \pi/2$ e $3\pi/2$). Essa inversão dá o famoso formato de halter que funções de onda do tipo p têm. Observe que a função de onda muda o sinal nos nós. Uma função de onda ns , por sua vez, tem componente angular:

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}, \quad (42)$$

indicando que a função de onda ns será sempre esfericamente simétrica (figura 4).

As funções de onda radiais são normalizadas usando a expressão:

$$\int_0^\infty r^2 |R_{n\ell}(r)|^2 dr = 1, \quad (43)$$

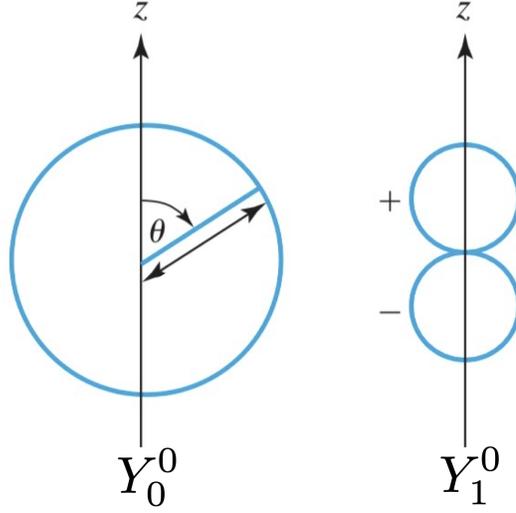


Figura 4: Ilustração das componentes angulares polares dos harmônicos esféricos $Y_1^0(\theta, \phi)$ e $Y_0^0(\theta, \phi)$.

onde $r^2 dr$ é a parte radial da diferencial $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$. De forma semelhante, funções de onda angulares são normalizadas por meio de:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1 \quad (44)$$

Definimos a função de distribuição radial (RDF) como:

$$\text{RDF}(r) = r^2 |R(r)|^2. \quad (45)$$

Em alguns livros didáticos, a RDF é representada como $\text{RDF}(r) = 4\pi r^2 |R(r)|^2$. Isso se deve ao fato que $4\pi r^2 dr$ é o volume da casca esférica entre $R(r)$ e $R(r) + dr$. Por meio da distribuição radial, determinamos a probabilidade de encontrar o elétron em uma distância r do núcleo (figura 5). Perceba que podemos determinar distâncias mais prováveis de encontrar o elétron calculando a derivada de RDF com relação a r . Algo importante de se mencionar, entretanto, é que a RDF é diferente da distribuição de probabilidade radial $|R(r)|^2$. Além disso, distância mais provável, r_{mp} não necessariamente é igual à distância média do elétron com relação ao núcleo. Na mecânica quântica, médias são calculadas pela integral:

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau \quad (46)$$

em que ψ é uma função de onda normalizada. No caso do átomo de hidrogênio, a distância média do elétron com relação ao núcleo é dada por:

$$\langle r \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \psi_{nlm}^* r \psi_{nlm} dr \sin\theta d\theta d\phi \quad (47)$$

Levando em consideração as propriedades das funções associadas de Laguerre que compõe a parte radial da função de onda do átomo de hidrogênio, a distância média é igual a:

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{n^2 a}{Z} \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right) \right]. \quad (48)$$

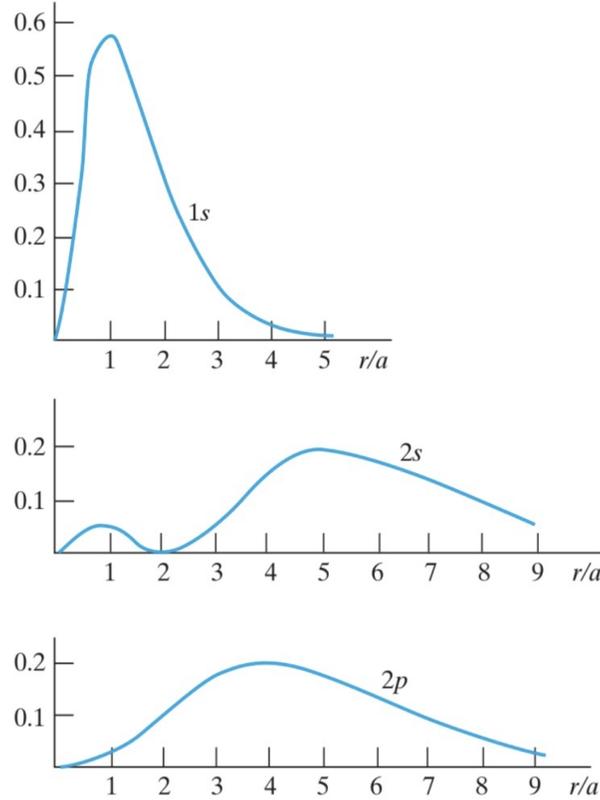


Figura 5: Funções de distribuição radial dos estados $1s$, $2s$ e $2p$ do átomo de hidrogênio

Uma noção qualitativa do efeito do potencial central sobre o elétron pode ser dada pelo valor médio de r^{-1} :

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{an^2}, \quad (49)$$

o que mostra que, como o potencial eletrostático é proporcional a $\langle 1/r \rangle$ e essa média independe do momentum angular, todos os orbitais de determinado nível n sentem a mesma energia potencial eletrostática. Essa observação está de acordo com a **degenerescência** dos subníveis eletrônicos do átomo de hidrogênio definidos por números quânticos n , ℓ e m . Como a energia depende de n , o grau de degenerescência para cada n é:

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (50)$$

A equação 50 faz sentido porque para cada $n = 1, 2, \dots$ há $\ell = 0, \dots, n - 1$ e $m = -\ell, \dots, \ell$.

4 Orbitais atômicos do átomo de hidrogênio

Nós chamamos de orbitais atômicos as funções de onda do hidrogênio e as usamos no dia-a-dia para descrever fenômenos físico-químicos diversos. Os orbitais atômicos do hidrogênio, entretanto, somente servem como uma primeira aproximação para descrever o comportamento eletrônico em

espécies multieletrônicas. Outro problema frequente é o caráter imaginário de diversas funções de onda, pois o harmônico esférico, exceto quando $m = 0$, será sempre uma função com números imaginários. Por exemplo, os orbitais $2p$ têm os números quânticos $n = 2$, $\ell = 1$ e $m = -1, 0, 1$. A função de onda do orbital $2p_0$ é relativamente simples:

$$2p_0 = \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{Z}{2a} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a} \cos \theta \quad (51)$$

As funções de onda dos orbitais $2p_{-1}$ e $2p_1$, entretanto, apresentam o fator $\exp(im\phi)$, que torna a função de onda imaginária:

$$2p_{\pm 1} = \frac{1}{8\pi^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (52)$$

Sabemos que no orbital p_0 , $z = r \cos \theta$, logo podemos chamá-lo de p_z :

$$2p_z = \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{Z}{2a} \right)^{5/2} z e^{-Zr/2a} \quad (53)$$

Podemos fazer **combinações lineares** dos orbitais remanescentes para termos funções de onda completamente reais. Chamamos de orbital $2p_x$ o orbital resultante da combinação:

$$2p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (2p_{-1} + 2p_1) = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a} \sin \theta \cos \phi \quad (54)$$

lembrando que $e^{\pm i\phi} = \cos \phi \pm i \sin \phi$. Observe que em coordenadas esféricas $x = r \sin \theta \cos \phi$, logo a função de onda do orbital $2p_x$ se torna:

$$2p_x = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} x e^{-Zr/2a}. \quad (55)$$

Caso semelhante pode ser feito para $2p_y$:

$$2p_y = \frac{1}{i\sqrt{2}} (2p_1 - 2p_{-1}) = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a} \sin \theta \sin \phi = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a} \right)^{5/2} y e^{-Zr/2a} \quad (56)$$

Vale a pena lembrar, entretanto, que $2p_x$ e $2p_y$ não necessariamente mantêm as mesmas propriedades de $2p_1$ e $2p_{-1}$. Por exemplo, enquanto $2p_{-1}$ e $2p_1$ são autofunções de \hat{L}_z com autovalores $-\hbar$ e $+\hbar$, os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ não são autofunções de \hat{L}_z .

5 Referências

- [1] Donald A. McQuarrie e John D. Simon, *Physical Chemistry: a molecular approach*, University Science Books, 1997. Capítulo 6
- [2] Peter Atkins e Ronald Friedman (2011), *Molecular Quantum Mechanics*, 5th edition, Oxford University Press. Capítulo 3.11-3.16
- [3] H. Moysés Nussenzveig, *Curso de Física Básica 4: Ótica, Relatividade e Física Quântica*, Editora Edgard Blücher, 1997. Capítulo 10.5