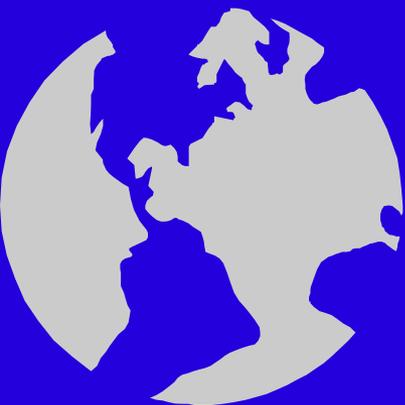




Química Geral 1 - Aula 15



Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy
Ribeiro

Laboratório de Ciências Químicas – LCQUI

Prof. Sergio Luis Cardoso



6 – Os números quânticos obtidos são:

n = número quântico principal. Está relacionado com o valor da energia do elétron e define a **camada** eletrônica na qual o elétron se encontra.

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

l = número quântico azimutal ou de momento angular. Está relacionado a forma do orbital onde se encontra o elétron (forma distribuição de probabilidade ou densidade eletrônica). Define a subcamada na qual o elétron se encontra,

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots, n-1$$

s, p, d, f, g, h, \dots

sharp, principal, diffuse e fundamental (nomenclatura histórica)

m_l = número quântico magnético. Esta relacionado a orientação do orbital no espaço dentro de uma mesma subcamada. Orbitais em uma mesma subcamada diferem apenas em sua orientação e não em valor de energia.

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

Os elétrons em um átomo são distribuídos em orbitais que são agrupados em subcamadas. Uma camada pode ter uma subcamada ($n = 1$) ou várias subcamadas. As subcamadas eletrônicas têm símbolos atribuindo-se o valor de n seguido pelo valor de l (em letras s,p,d,f,g....).

O número de orbitais em uma camada é dado por n^2

O número de orbitais em uma subcamada é dado por $2l + 1$

$n = 1 = 1$ subcamada (s) (1s)

$n = 2 = 2$ subcamadas (s,p) (2s,2p)

$n = 3 = 3$ subcamadas (s,p,d) (3s,3p,3d)

$n = 4 = 4$ subcamadas (s, p,d e f) (4s,4p,4d,4f)

Uma interpretação mais adequada diz respeito não a existência de orbitais em si mas as infinitas possibilidades nas quais o elétron poderá ser caracterizado dentro de um sistema atômico!!!!

Por volta de 1920 foi demonstrado que o elétron comporta-se como se estivesse em rotação, na mesma forma que a terra. Esta rotação passou a ser representada pelo quarto número quântico denominado:

Número quântico Magnético de spin eletrônico – m_s
onde $m_s = +1/2$ ou $-1/2$

PRINCÍPIO DA EXCLUSÃO DE PAULI

Dois elétrons em um mesmo átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos (a mesma solução da função de onda!). Conseqüentemente, nenhum orbital atômico pode conter mais de dois elétrons.

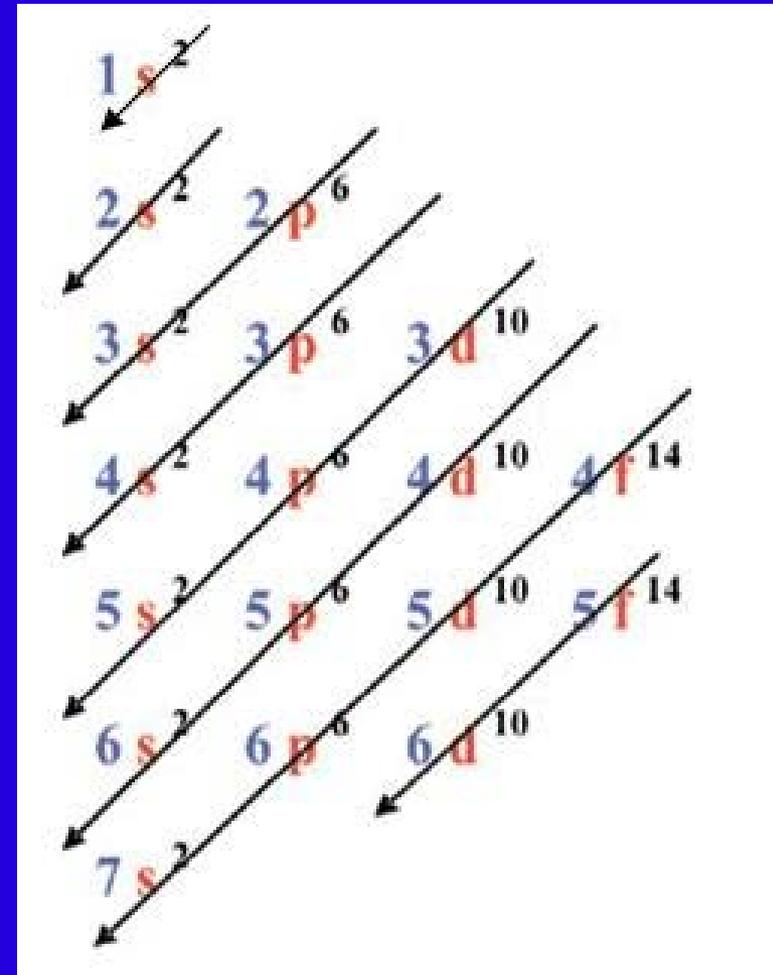
Elétrons nos Átomos

Elétrons:

- ✓ têm estados discretos de energia;
- ✓ tendem a ocupar o mais baixo estado de energia

<i>Principal Quantum Number n</i>	<i>Shell Designation</i>	<i>Subshells</i>	<i>Number of States</i>	<i>Number of Electrons</i>	
				<i>Per Subshell</i>	<i>Per Shell</i>
1	<i>K</i>	<i>s</i>	1	2	2
2	<i>L</i>	<i>s</i>	1	2	8
		<i>p</i>	3	6	
3	<i>M</i>	<i>s</i>	1	2	18
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	
4	<i>N</i>	<i>s</i>	1	2	32
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	

Camada	Subcamadas
1	s
2	s p
3	s p d
4	s p d f
5	s p d f
6	s p d
7	s p



• Na formulação matemática da mecânica quântica, cada sistema está associado a um espaço complexo de Hilbert de forma que **cada estado instantâneo** do sistema é descrito por um **vetor unitário** neste espaço.

- Espaço Euclidiano – 2, 3 ou n dimensões

- Espaço de Hilbert – conjunto de funções (espaço vetorial abstrato)

* Este **vetor de estado** contém as probabilidades de resultados para todas as medidas possíveis aplicadas ao sistema.

* Como o estado de um sistema geralmente muda com o tempo, este **vetor de estado** é uma função do tempo.

* A Equação de Schrodinger fornece uma descrição quantitativa da taxa de mudança deste **Vetor de Estado**

- A energia total (E) de uma partícula de massa = m se movendo em um potencial U(x) é a soma da energia potencial com a energia cinética.

Equação independente do tempo em uma dimensão (ψ = função de onda)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Equação independente do tempo em três dimensões

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi(r) = E\psi(r), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (U - E)\psi = 0,$$

Símbolo Nabla – representa o operador DEL (operador diferencial vetorial)

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

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

$f(x)$	Any function of position, such as x , or potential $V(x)$	$f(x)$
p_x	x component of momentum (y and z same form)	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
E	Hamiltonian (time independent)	$\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)$
E	Hamiltonian (time dependent)	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
KE	Kinetic energy	$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
L_z	z component of angular momentum	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

H = Hamiltoniano (operador - descreve a energia total do sistema)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z)\psi = E \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + V \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi = E \psi$$

Operador Laplaciano

$$\nabla^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Se o movimento da partícula depende do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\hat{H} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

H o operador Hamiltoniano

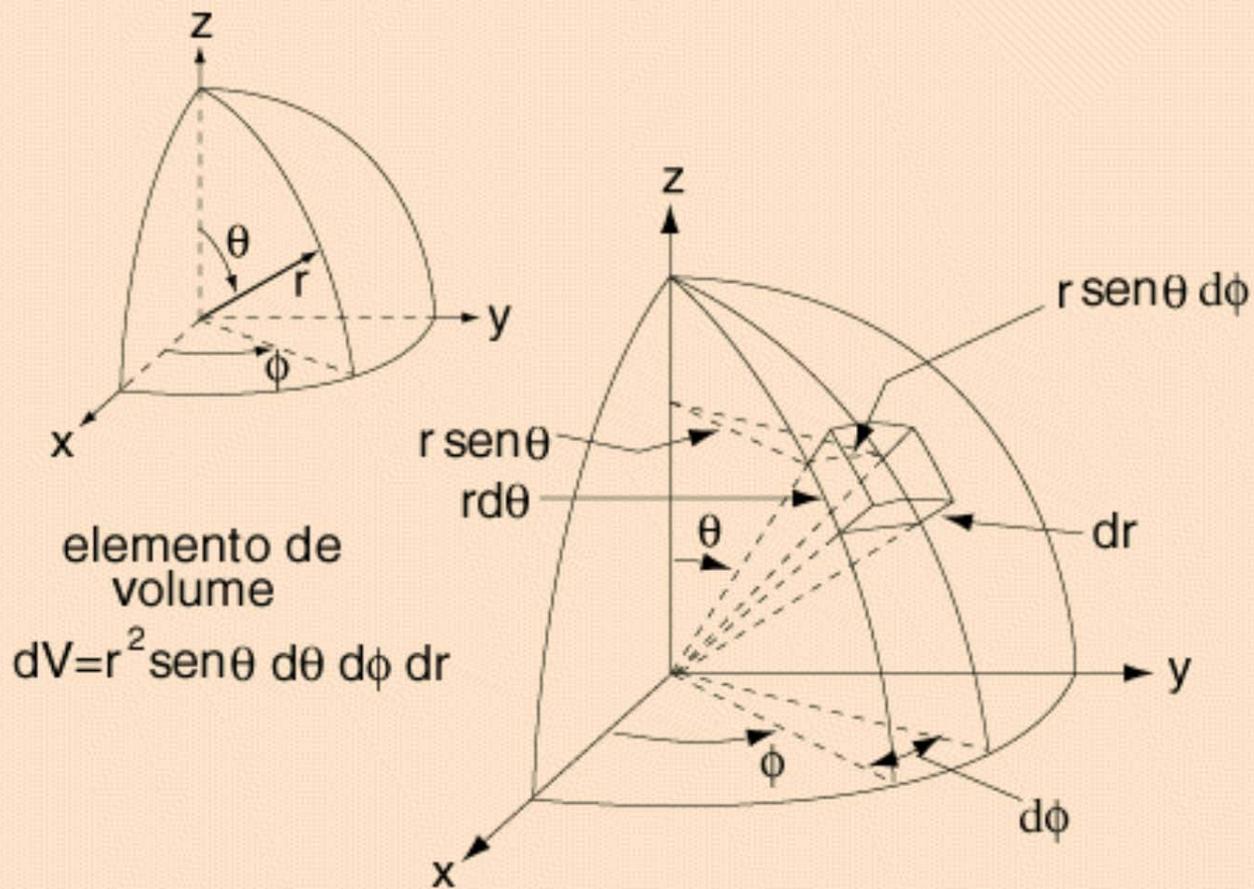
- Em sistemas com simetria esférica – a energia potencial de uma partícula de massa m , a qual se move em um campo de força central esfericamente simétrico, depende somente da distância r entre a partícula e o centro da força. Para estes sistemas podemos escrever a Equação de Schrodinger como:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0$$

- Escrevendo-se a equação num sistema de coordenadas esféricas temos:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0$$

Coordenadas Polares Esféricas



• Os estados energéticos deste sistema são determinados resolvendo-se a equação diferencial, cujas soluções são contínuas, tem derivadas contínuas em r , θ e ϕ , e são ainda de quadrado integrável. Solução pelo método de separação de variáveis (escreve-se a função de onda como produto de 2 funções – sendo uma radial e outra angular:
 $\Psi = R(r)Y(\theta, \phi)$

A parte Radial $R(r)$ e angulares $Y(\theta, \phi)$ são independentes: substituindo-se ψ na eq. abaixo

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0$$

Temos:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial RY}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial RY}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 RY}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] RY = 0$$

Extraindo-se das derivadas os termos constantes escrevemos:

$$Y \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R Y = 0$$

Multiplicando-se ambos os lados por $r^2/R Y$ e reagrupando-se os termos dependentes da parte radial e angular, separadamente temos:

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] r^2 R \right] = - \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right]$$

$$\downarrow$$

$$= C = \text{cte}$$

$$\downarrow$$

$$= C = \text{cte}$$

- 1 - A energia total “E” é determinada pela função radial
- 2 - O segundo termo da equação é independente da energia total “E” e da energia potencial “V(r)”

$$\frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] r^2 R \right] = -\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right]$$

Aplicando-se o método de separação de variáveis no segundo termo temos:

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

$$\frac{1}{P} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) \right] - C \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = m_l$$

Onde $m_l =$ constante de separação e a equação

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

Tem como solução:

$$\Phi(\phi) = e^{\pm i m_l \phi}$$

$$\frac{1}{P} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) \right] - C \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = m_\ell^2$$

O lado esquerdo desta equação pode ser escrito como:

$$\frac{d}{d\mu} \left[(1-\mu^2) \frac{dP}{d\mu} \right] + \left(C - \frac{m_\ell^2}{1-\mu^2} \right) P = 0$$

Onde $\mu = \cos \theta$ e a equação pode ser resolvida pelo método de séries. Similar a solução usada para um oscilador harmônico clássico.

Funções Associadas de Legendre.

As soluções combinadas geram:

$$Y_\ell^{m_\ell}(\theta, \phi) = (-)^{m_\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m_\ell)!}{(\ell+m_\ell)!}} e^{im_\ell\phi} P_\ell^{m_\ell}(\cos \theta)$$

$$Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\theta, \phi) = (-)^{m_{\ell}} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m_{\ell})!}{(\ell + m_{\ell})!}} e^{im_{\ell}\phi} P_{\ell}^{m_{\ell}}(\cos \theta)$$

A função $P_{\ell}^{m_{\ell}}$ pode ser computada a partir dos polinômios de Legendre

$$P_{\ell} = P_{\ell}^0 = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{d\mu^{\ell}} (\mu^2 - 1)^{\ell}$$

$$P_{\ell}^{m_{\ell}} = \sin^{m_{\ell}} \theta \frac{d^{m_{\ell}}}{d\mu^{m_{\ell}}} P_{\ell}$$

l	m_l	Função Y_l^{m_l}
0	0	$Y_0^0 = (1/4\pi)^{1/2}$
1	0	$Y_1^0 = (2/4\pi)^{1/2} \cos\theta$
2	0	$Y_2^0 = (5/4\pi)^{1/2} 3\cos^2\theta - 1$
1	1	$Y_1^1 = (3/8\pi)^{1/2} e^{i\phi} \sin\theta$
1	2	$Y_1^2 = (15/8\pi)^{1/2} e^{i\phi} \sin\theta \cos\theta$
2	2	$Y_2^2 = (15/32\pi)^{1/2} e^{2i\phi} \sin^2\theta$
....

As funções $Y_l^{m_l}$ são denominadas por harmônicos esféricos

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$m_\ell = -\ell, -(\ell-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$$

n	ℓ	m _ℓ	Função de onda
1	0	0	$\Psi_{1s} = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\Psi_{2s} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
3	0	0	$\Psi_{3s} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{3\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
2	1	±1	$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin\theta \cos\phi$
2	1	±1	$\Psi_{2p_y} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin\theta \sin\phi$
2	1	0	$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos\theta$
3	1	±1	$\Psi_{3p_x} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{Zr}{a_0} - \frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} \sin\theta \cos\phi$
3	1	±1	$\Psi_{3p_y} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{Zr}{a_0} - \frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} \sin\theta \sin\phi$
3	1	0	$\Psi_{3p_z} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{Zr}{a_0} - \frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0} \cos\theta$
3	2	0	$\Psi_{3d_{xx}} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{6\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0} (3\cos^2\theta - 1)$
3	2	±1	$\Psi_{3d_{xz}} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0} \sin\theta \cos\theta \cos\phi$
3	2	±1	$\Psi_{3d_{yz}} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0} \sin\theta \cos\theta \sin\phi$
3	2	±2	$\Psi_{3d_{xx-yy}} = \frac{1}{81} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0} \sin^2\theta \cos(2\phi)$

Soluções para átomos hidrogenóides – considerando somente movimento eletrônico

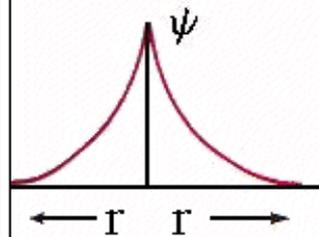
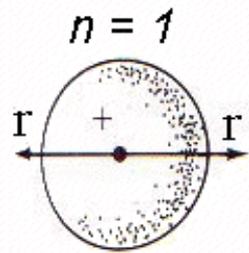
$$n = 1, 2, 3, \dots \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$m_\ell = -\ell, -(\ell-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$$

$$a_0 = 52,9177 \text{ pm (raio Bohr)}$$

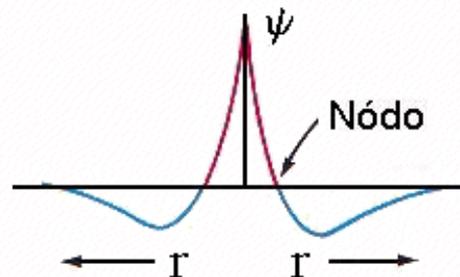
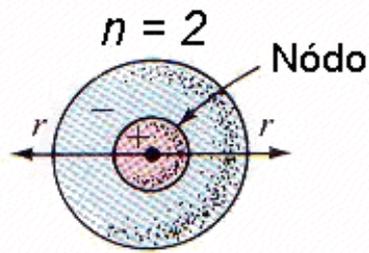
$$N = \text{número de nodos} = n - 1$$

n = 2 – 1 nodo da forma esférica para orbital 2s e forma planar orbital 2p



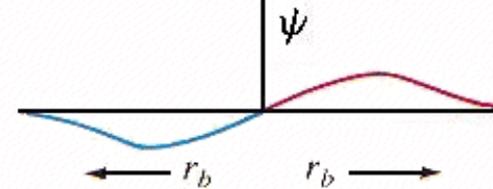
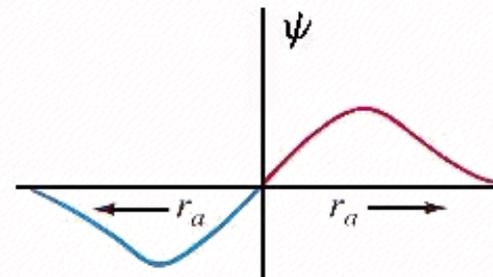
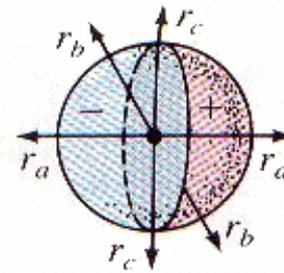
$l = 0$ 0 nódos

(a) orbital 1s



$l = 0$ 1 nódos esférico

(b) orbital 2s

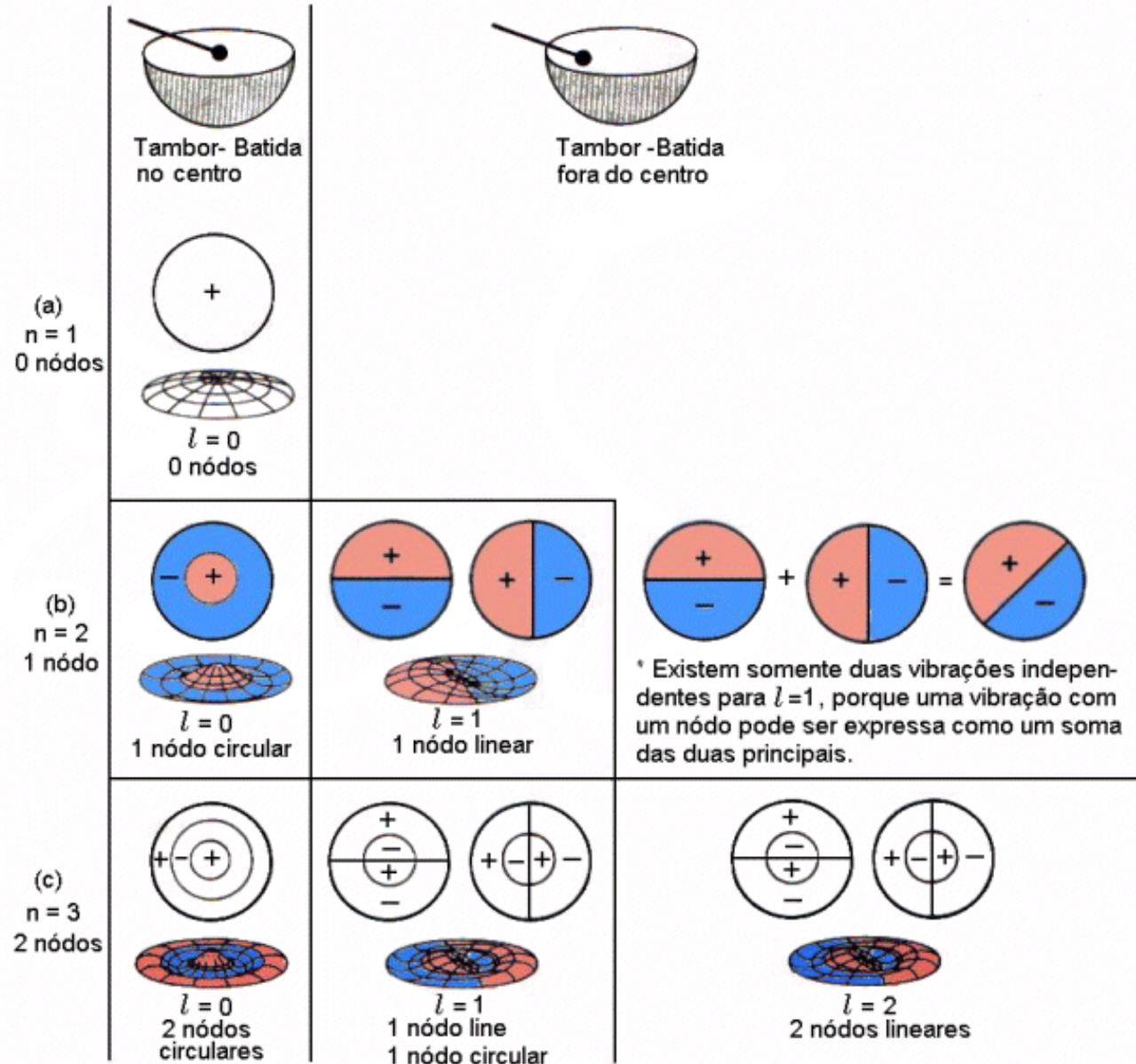


(c) orbital 2p

$l = 1$

1 nódos planar

Resultados teoria ondulatória de superfície



Energias dos orbitais atômicos (átomo de hidrogênio)

Orbital atômico = função monoelétrica definida por 3 números quânticos n , l e m_l

Ψ_{100} – função onde $n = 1$, $l = 0$ e $m_l = 0$

Estado eletrônico $|1,0,0\rangle$

n = número quântico principal – (1,2,3.....) e determina a energia do elétron

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Da solução angular surgem l e m_l

Número quântico l – elétron tem momento angular de magnitude

$$l(l+1)^{1/2} \hbar \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Número quântico m_l – elétron tem componente Z do momento angular igual a

$$m_l \hbar \quad m_l = +0, +1, +2, \dots, +l$$

B



$\ell = 1$
 $m_\ell = 1$

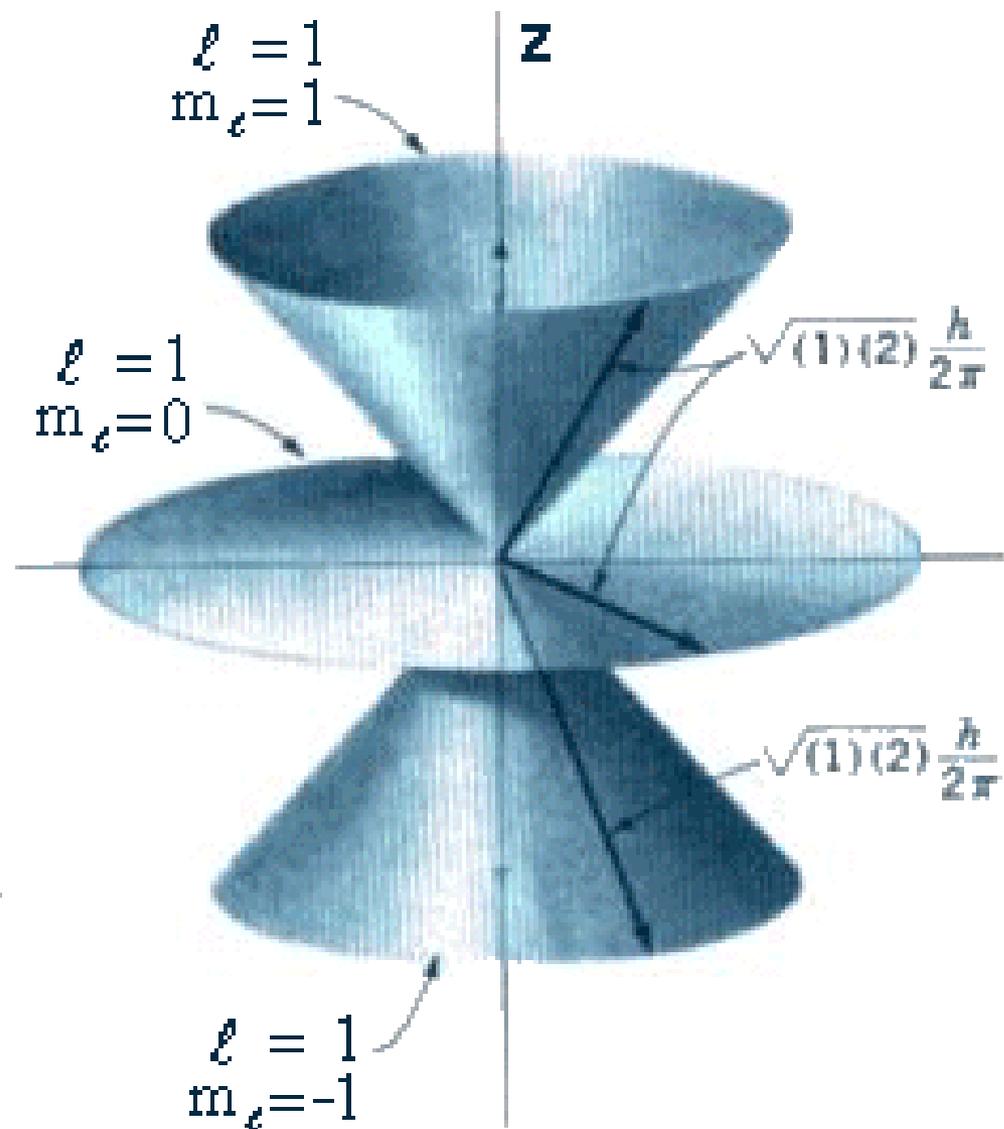
$\ell = 1$
 $m_\ell = 0$

$\ell = 1$
 $m_\ell = -1$

z

$\sqrt{(1)(2)} \frac{\hbar}{2\pi}$

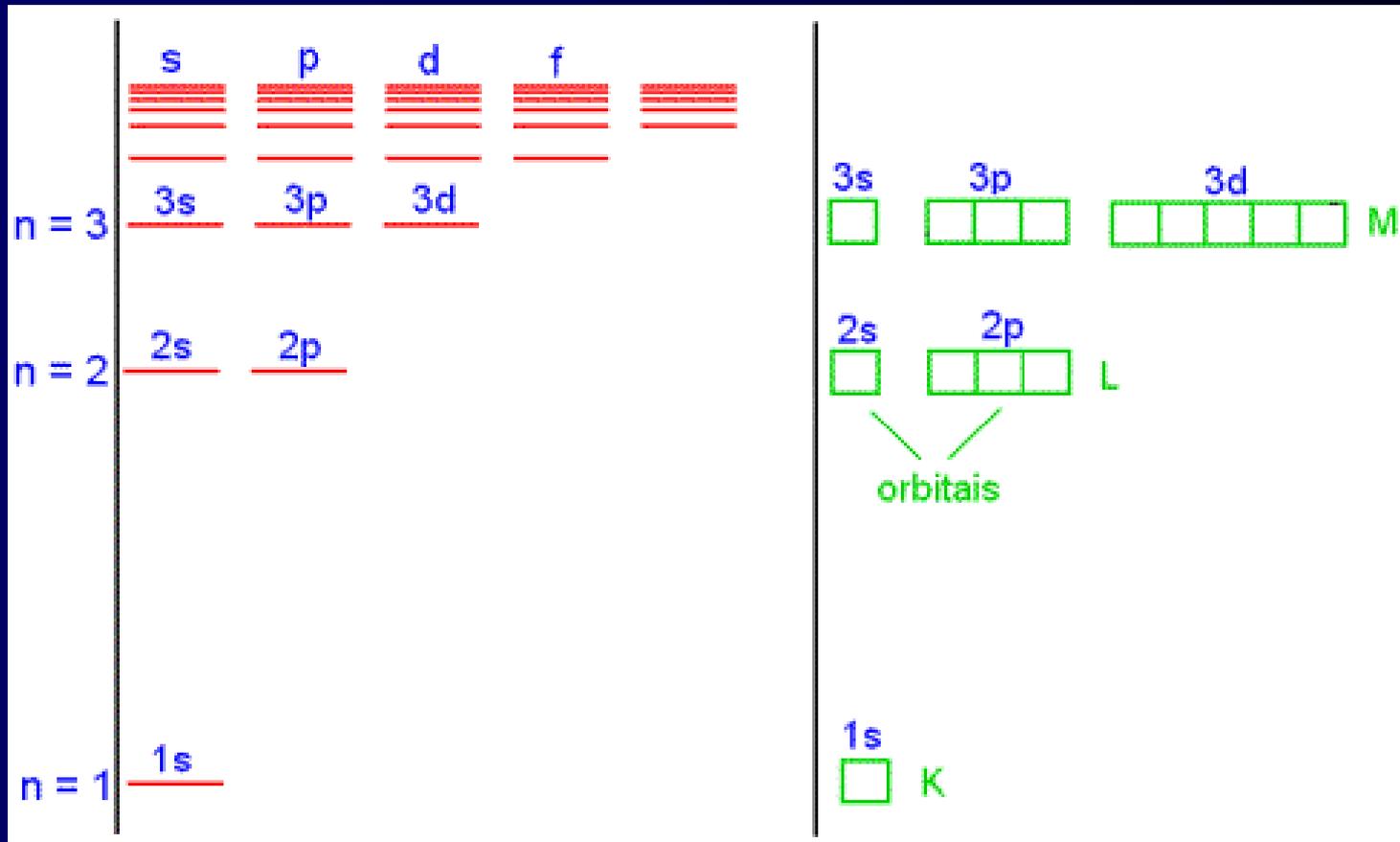
$\sqrt{(1)(2)} \frac{\hbar}{2\pi}$



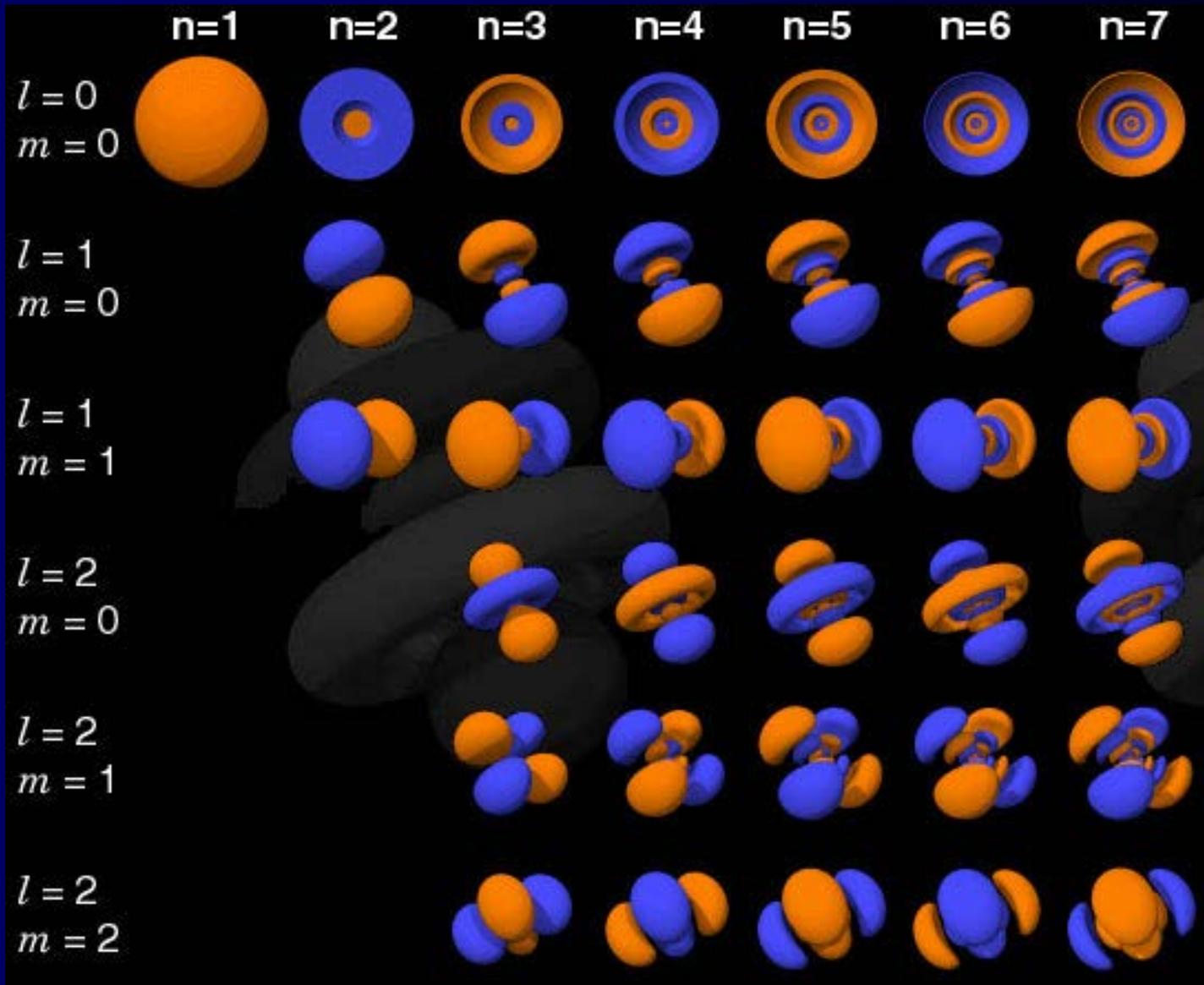
s e m_s , sendo $s = \frac{1}{2}\hbar$ e $m_s = \pm\frac{1}{2}$

Números quânticos relativos ao spin eletrônico

$n =$	1	2	3	4	...
camada	K	L	M	N	
$\ell =$	0	1	2	3	...
Sub-camada	s	p	d	f	

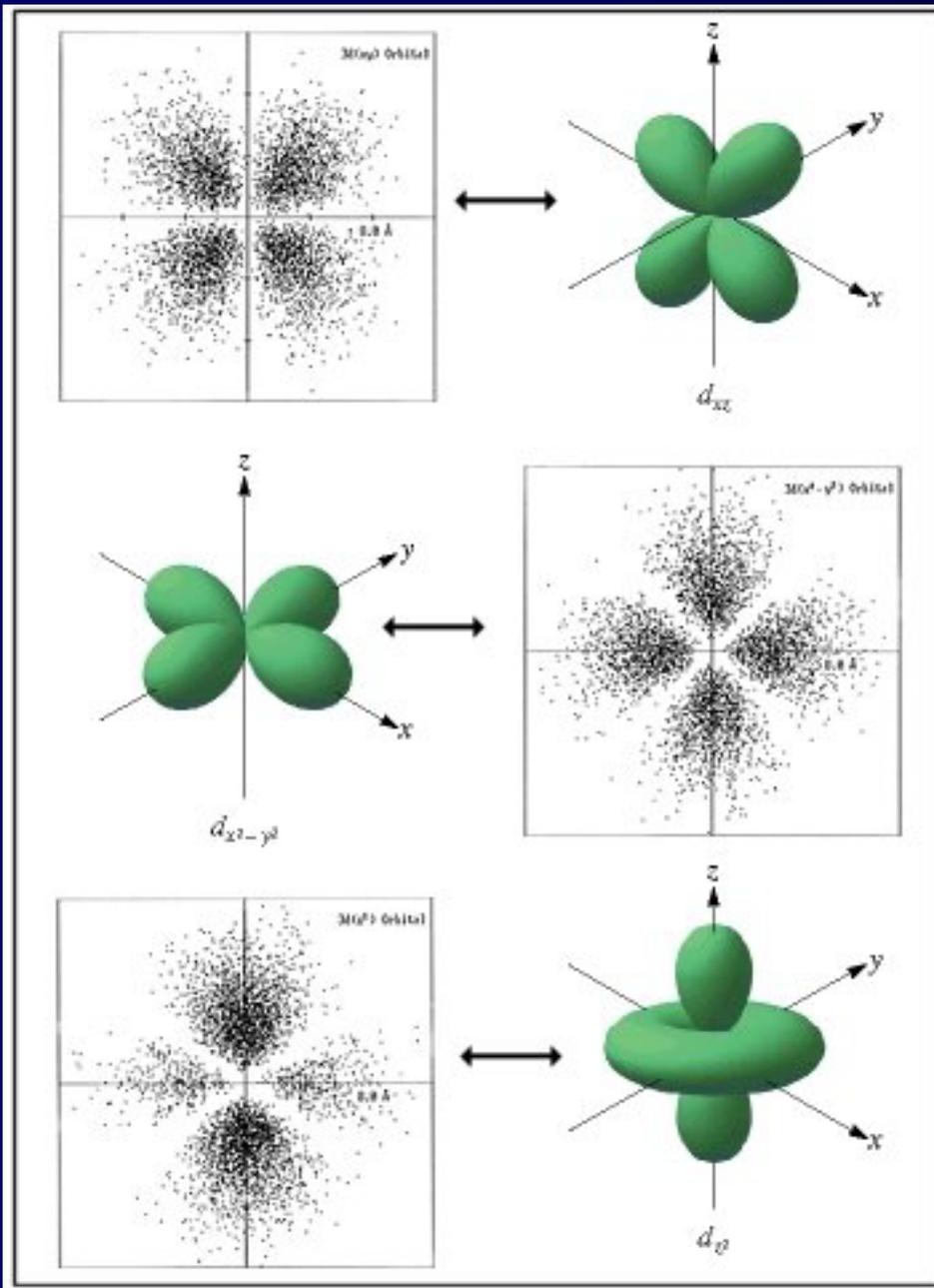


Camada	n	Número de orbitais n^2	Sub camadas	ℓ	m_ℓ	Estados	$\Psi_{n\ell m_\ell}$		
K	1	1	s	0	0	$ 100\rangle$	Ψ_{100}		
L	2	4	s	0	0	$ 200\rangle$	Ψ_{200}		
					p	1	-1	$ 21-1\rangle$	Ψ_{21-1}
							0	$ 210\rangle$	Ψ_{210}
			1	$ 211\rangle$	Ψ_{211}				
M	3	9	s	0	0	$ 300\rangle$	Ψ_{300}		
					p	1	-1	$ 31-1\rangle$	Ψ_{31-1}
			0	$ 310\rangle$			Ψ_{310}		
			1	$ 311\rangle$			Ψ_{311}		
			d	2	-2	$ 32-2\rangle$	Ψ_{32-2}		
					-1	$ 32-1\rangle$	Ψ_{32-1}		
					0	$ 320\rangle$	Ψ_{320}		
					1	$ 321\rangle$	Ψ_{321}		
					2	$ 322\rangle$	Ψ_{322}		



Densidades de probabilidade em função de n , l e m_l

Densidade de probabilidade orbitais d



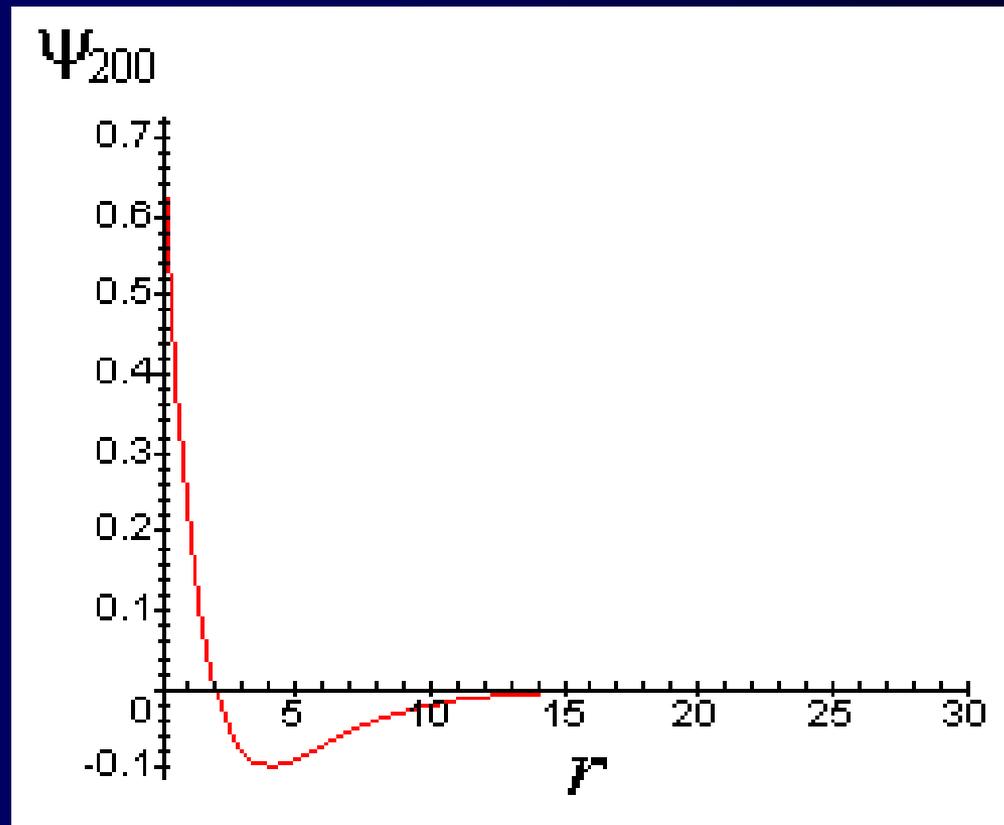
$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$\Psi_{200}(r = r^*) = 0. \quad \text{Nó ou nodo}$$

$$\Psi_{200} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} = 0$$

$$\rightarrow 2 - \frac{Zr}{a_0} = 0 \quad \text{ou} \quad r = \frac{2a_0}{Z}$$



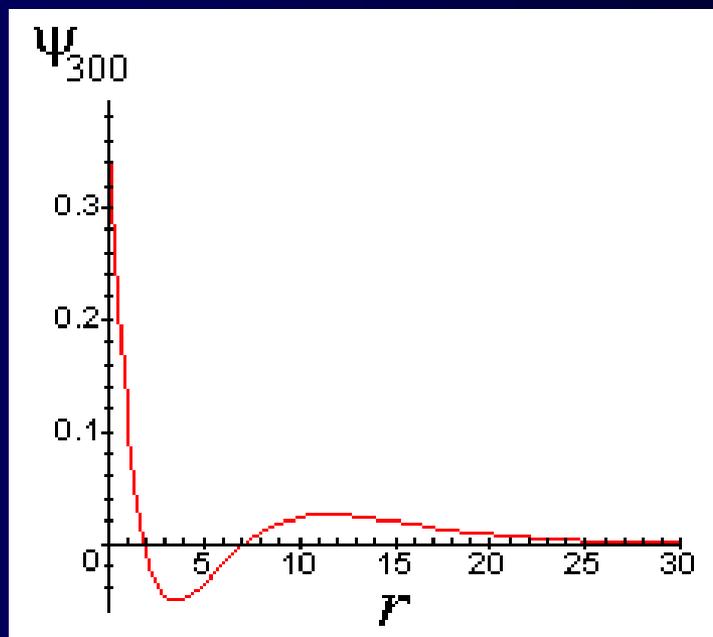
$$r = r^* = \frac{2a_0}{Z}$$

$$\Psi_{200} = 0$$

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

$$27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} = 0$$

$$r_1 = 1,90 \frac{a_0}{Z} \quad \text{e} \quad r_2 = 7,10 \frac{a_0}{Z}$$



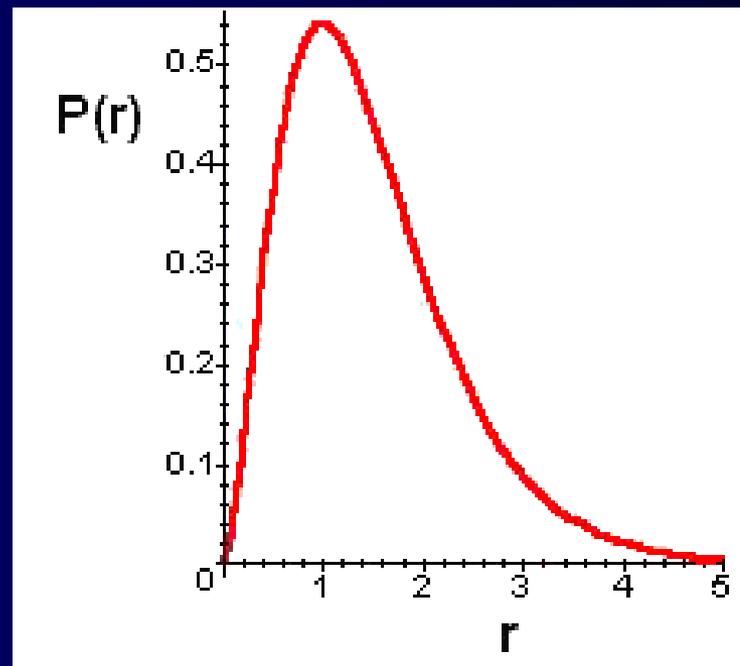
$$\langle r \rangle_{1s} = \frac{4Z^3}{a_0} \int_0^{\infty} r^3 e^{-2Zr/a_0} dr = \frac{3a_0}{2Z}$$

Raio médio orbital 1s

$$P(r) = r^2 R^2(r) = \frac{4Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-2Zr/a_0}$$

Função distribuição radial 1s

$$|\psi|^2 d\tau$$



Raio mais provável – derivada de $P(r) = 0$

$$\frac{dP(r)}{dr} = \frac{d(r^2 R^2(r))}{dr} = \frac{d\left(\frac{4Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-2Zr/a_0}\right)}{dr} = \frac{4Z^3}{a_0^3} \left(2r - \frac{2Zr^2}{a_0}\right) e^{-2Zr/a_0} = 0$$

$$2r - \frac{2Zr^2}{a_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad r = \frac{a_0}{Z}$$

íon	H	He ⁺	Li ²⁺	Be ³⁺	B ⁴⁺	C ⁵⁺
R(Å)	0,529	0,265	0,176	0,132	0,106	0,0882