

Oficina

Fundamentos da Mecânica Quântica: abordagens e metodologias - Parte 2

Objetivo

Utilizar o simulador para compreender os conceitos fundamentais da mecânica quântica relacionados aos orbitais atômicos do hidrogênio.

Atividade com Simufísica – [Acesse aqui](https://simufisica.com/simulacoes/orbitais-hidrogenio/)

O simulador “Orbitais do Hidrogênio” do SimuFísica é uma ferramenta interativa que permite visualizar graficamente a densidade de probabilidade dos orbitais eletrônicos do átomo de hidrogênio. Ele é baseado nas soluções da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, representando o módulo quadrado da função de onda $|\Psi|^2$ em cortes bidimensionais nos planos principais (xy, xz e yz). (<https://simufisica.com/simulacoes/orbitais-hidrogenio/>)

Passo 1 – Observação inicial

1. Acesse o simulador.
2. Defina os valores iniciais:
 - o **$n = 1, \ell = 0, m = 0$**
 - o Observe a forma do orbital e o gráfico de densidade de probabilidade radial.

1: Como você descreveria a forma do orbital 1s? A densidade de probabilidade é maior próxima ou distante do núcleo?

2: O que isso indica sobre a probabilidade de encontrar o elétron?

Passo 2 – Variação de n:

1. Mantenha $\ell = 0$ e $m = 0$, e varie n de 1 para 2 e depois para 3.
 2. Observe a expansão do orbital e a presença de nós radiais.
- 3:** O que acontece com o tamanho do orbital e o número de nós radiais quando aumentamos n ?

Passo 3 – Variação de ℓ :

1. Fixe $n = 3$, e varie ℓ de $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2$, mantendo $m = 0$.
 2. Observe a mudança na forma do orbital.
- 4:** Descreva como o formato do orbital muda ao variar ℓ . Que formas aparecem?

Passo 4 – Variação de m:

1. Fixe $n = 3$, $\ell = 2$, e varie m de -2 até $+2$.
 2. Observe a orientação espacial dos orbitais (vista superior e lateral).
- 6:** Como o número quântico magnético m afeta a **orientação** do orbital? Ele muda o formato?
- 7:** Qual é a importância de visualizar $|\Psi|^2$ em diferentes planos (xy , xz , yz)?

Resposta: Visualizar $|\Psi|^2$ em diferentes planos permite compreender a distribuição tridimensional da densidade de probabilidade, facilitando a identificação de simetrias e orientações dos orbitais.

Passo 5 – Análise cruzada:

1. Escolha dois orbitais diferentes (ex: 2p e 3d).
 2. Compare densidade radial, número de nós, e formas.
- 8:** Qual dos orbitais tem maior número de nós? Há relação entre o número total de nós e os valores de n e ℓ ?