Funções de Onda do Átomo de Hidrogênio

Como o potencial do átomo de hidrogênio (coulombiano) é radial, a solução da equação de Schrödinger para ele pode ser escrita como o produto de uma parte radial e uma parte angular:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$$

Resolvendo-se a equação, encontra-se

$$R_{n,l} = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-r/na_0} \left(\frac{r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(r/na_0\right)$$

e

$$Y(\theta,\varphi) = Y_l^m(\theta,\varphi)$$

onde

- a_0 é o chamado raio de Bohr, dado por $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0}{m_e e^2}$ e vale aproximadamente 5,29 × 10^{-11} m, isto é, cerca de 0,53 Å
- $L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$ são os polinômios de Laguerre generalizados e
- $Y_l^m(\theta,\varphi)$ são os chamados 'harmônicos esféricos', mais corretamente funções harmônicas esféricas
- n é o chamado número quântico principal, define o tamanho do orbital e, salvo pelas degenerescências, define a energia do elétron, assumindo valores 1, 2, 3, etc.
- l é o número quântico azimutal, define a forma do orbital e o momento angular do elétron
- m é o número quântico magnético, que define a orientação espacial do orbital quando sujeito a um campo magnético externo
- existe, ainda, o s, número quântico de spin, que define a orientação do spin do elétron com relação a um campo magnético externo

Os primeiros casos são

$R_{10} = 2a^{-3/2}\exp(-r/a)$
$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)\exp(-r/2a)$ $R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}} a^{-3/2}\frac{r}{a}\exp(-r/2a)$
$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}} a^{-3/2}\left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\exp(-r/3a)$ $R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}} a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)\exp(-r/3a)$ $R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp(-r/3a)$
$R_{40} = \frac{1}{4} a^{-3/2}\left(1 - \frac{3}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)\exp(-r/4a)$ $R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}} a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\frac{r}{a}\exp(-r/4a)$ $R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}} a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp(-r/4a)$ $R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}} a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\exp(-r/4a)$

e

$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$	$Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_1^{\pm 1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 1} = \mp\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2}(3\cos^2\theta - 1)$	$Y_3^{\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_2^{\pm 1} = \mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 3} = \mp\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2}\sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}$