

Instituto de Física USP

Física V - Aula 34

Professora: Mazé Bechara

Aula 34–Auto estados de energia de potenciais centrais – o átomo de H

1. A caixa tridimensional de potencial infinito – auto-funções de energia e seus auto-valores. A degenerescência em energia no caso da caixa cúbica.
2. A conveniência de se usar as coordenadas esféricas para potenciais centrais. Os operadores energia e momento angular e quadrado de momento angular em coordenadas esféricas. A equação de auto-estados de energia de um potencial central.
3. A solução dos auto-estados de energia pelo método de separação das variáveis angulares da radial.
 - (a) A parte angular de todas as auto-funções de energia de qualquer potencial central : conservação e quantização do módulo do momento angular e de sua componente z .

As energias para a caixa tridimensional de potencial infinito

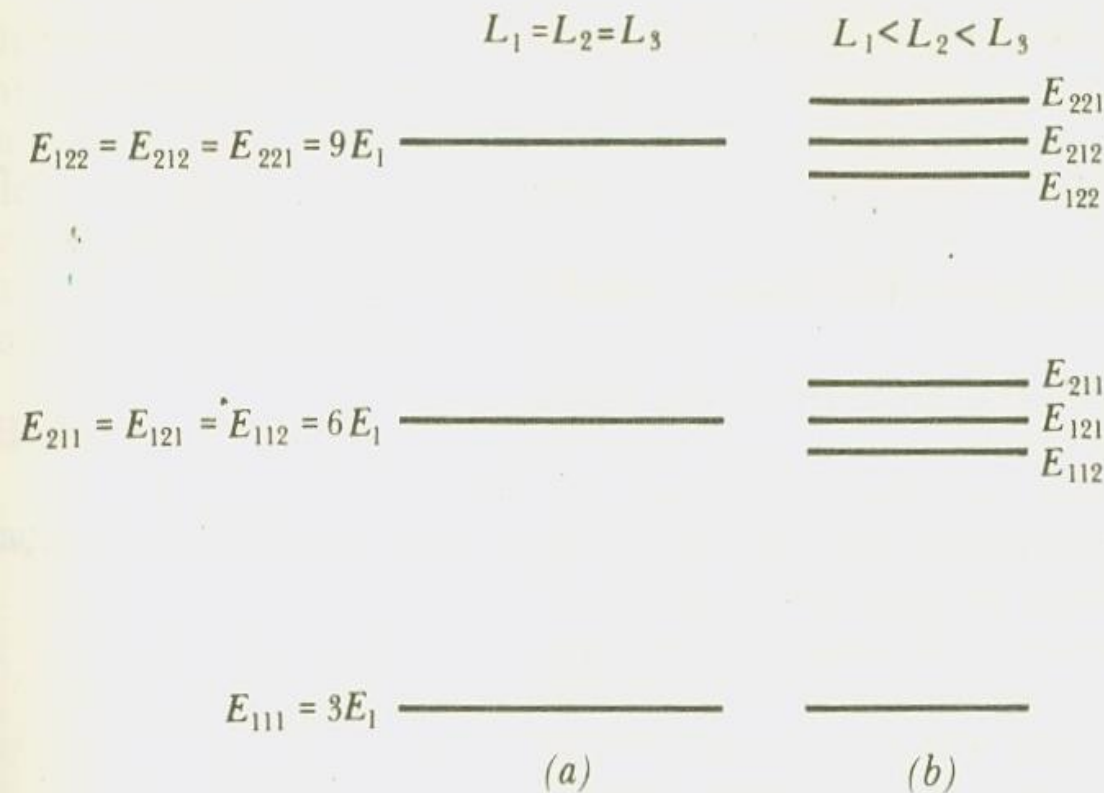
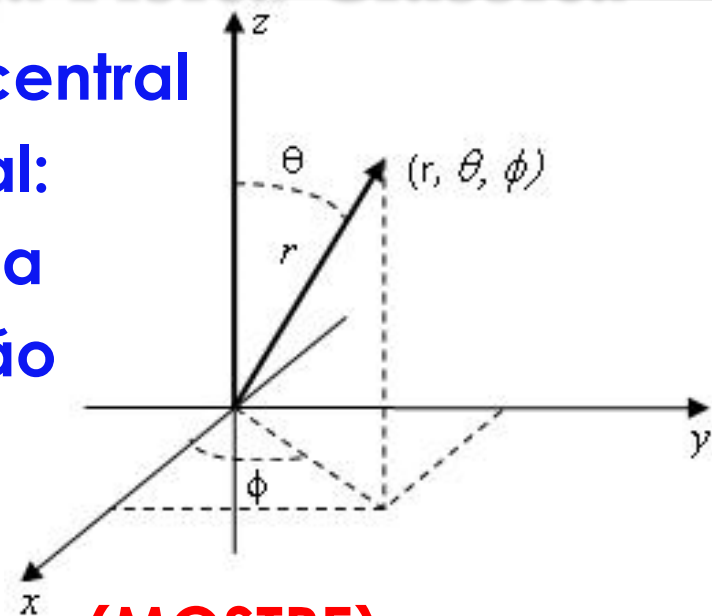


Fig. 6.24 Diagrama de nível de energia para (a) potencial de poço cúbico infinito e (b) poço infinito não-cúbico. No poço cúbico, os níveis de energia são degenerados, isto é, há duas ou mais funções de onda tendo a mesma energia. A degenerescência será removida quando a simetria do potencial for removida, como em (b).

Potencial Central na Física Clássica

- **Conceituação: potencial central é o associado à força central: depende apenas da distância à uma origem e tem a direção do vetor posição.**



- O **potencial é conservativo (MOSTRE)**: conserva a energia mecânica.
- O **vetor momento angular é uma constante de movimento (MOSTRE!)**, consequentemente o movimento é no plano.
- No caso de interação de duas partículas por potencial central, a energia do movimento relativo depende da massa reduzida e da distância entre elas; e a origem é uma das partículas.

Grandezas dinâmicas do movimento *relativo de duas partículas – Física Clássica*

A energia mecânica (constante): cinética + potencial.

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$$

- momento angular do movimento relativo (constante - variação no tempo igual ao torque):

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

- momento linear do movimento relativo (variação no tempo igual à força):

$$\vec{p} = \mu \frac{d\vec{r}}{dt}$$

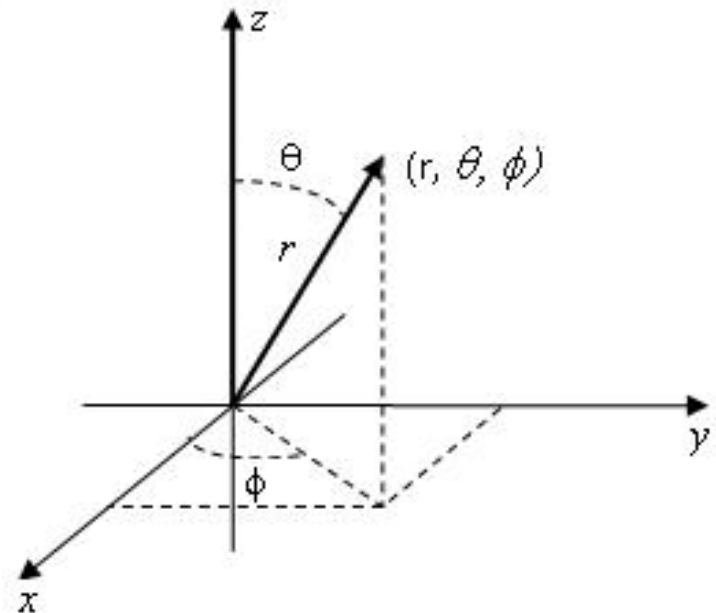
A origem de r ($r=0$) está em uma das duas partículas. μ é a massa reduzida.

As coordenadas esféricas e as cartesianas

$$0 \leq r < \infty$$

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$



$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

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

MOSTRE

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Operadores componentes e módulo ao quadrado do momento angular em coordenadas esféricas

(Mostre formalmente!)

$$L_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

•

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi},$$

•

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right).$$

•

•

A equação de Schroedinger para auto-estados de energia de um potencial central $V(r)$ no movimento relativo de duas partículas

1. Uma escolha de sistema de coordenadas conveniente é de coordenadas esféricas, dada a simetria do potencial. Assim os auto-estados de energia são:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(r, \theta, \phi, t) = \varphi(r, \theta, \phi) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

2. No caso do movimento relativo **a origem do potencial é uma das duas partículas que interagem**. Assim a equação dos auto-estados pode ser escrita na forma:

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

3. Há **um conjunto particular de soluções** nas quais se separa as variáveis angulares da radial:

$$\{\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)\}$$

- **Multiplicando a equação de Schroedinger por $2\mu r^2$ e dividindo à direita por $R(r)Y(\theta, \phi)$ se pode deixar todos os termos com dependência angular em um lado da equação e todos com dependência radial do outro, o que exige que sejam iguais a uma constante C (resultado nas transparências seguintes).**

Equação da parte angular (dedução em classe)

- A equação da parte angular (a mesma para todo potencial central $V(r)$):

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = C Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = \\ = \hat{L}^2 Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi)$$

- Observe que vale também:

$$\hat{L}_z Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = m_\ell \hbar Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi)$$

- Resultados das condições física sobre a função de onda:

(1) $C = \ell(\ell+1)$ com $\ell=0,1,2...(n-1)$ e $m_\ell=0, \pm 1, \pm 2... \pm \ell$ decorre da imposição da função $Y(\theta, \phi)$ ser unívoca, finita e contínua, com derivadas finitas e contínuas e $Y(\theta, 0) = Y(\theta, 2\pi)$. Estas funções são chamadas de harmônicas esféricas

Funções normalizadas

Tabela 7-1 Harmônicos esféricos

$l = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$l = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8}\pi} \sin \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4}\pi} \cos \theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8}\pi} \sin \theta e^{-i\phi}$
$l = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$

Nota: Para uma representação tridimensional dos harmônicos esféricos, consulte a página da Internet <http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qeg/harmonics/charmonics.html>