Campo Central

$V = V(r)$ e o momento angular se conserva.

Em coordenadas esféricas

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

e, de novo lembrando que

$$L^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

e $$\left\{\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} Y_{lm}(\theta,\varphi) = -l(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$H\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \quad \text{com} \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

Escrevendo

$$\psi(r,\theta,\varphi) = f(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

obtemos, como antes,

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dR}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right\} f(r) = E\,f(r)$$

. Ainda não especificamos $V(r)$.

Seja $R(r) = r f(r)$ onde $f(r)$ é finita na origem

e então $R(0) = 0$.

Vamos reescrever a equação acima para $R(r)$.

Note que

$$\frac{dR}{dr} = r\frac{df}{dr} + f(r)$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} = r\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{df}{dr} + \frac{df}{dr}$$

e, assim,

$$\boxed{\frac{1}{r}\frac{d^2R}{dr^2} = \frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df}{dr}}$$

$$\boxed{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{df}{dr}\right) = \frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df}{dr}}$$

~~Portanto a equação~~ fica

$$= \frac{1}{r}\frac{d^2R}{dr^2} +$$

e portanto a equação fica

$$\cancel{-\frac{\hbar^2}{2m r^2}\frac{d^2R}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R =}$$

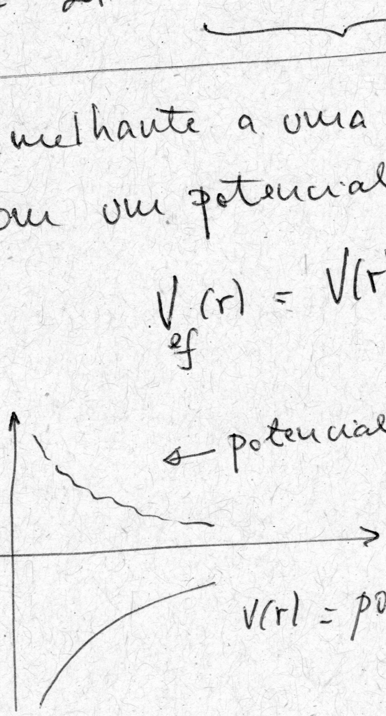
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2R}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] f(r) = E f(r)$$

multiplicando por r vem

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dr^2} + \Big[\underbrace{V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}\Big] R = E R} \qquad (1)$$

Semelhante a uma equação unidimensional com um potencial efetivo

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$



← potencial centrífugo $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$.

$V(r)$ = potencial atrativo

- Se considerarmos $\frac{dR}{dr} = 0$ e $V(r) = \text{const}$ temos o rotor rígido e

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

- O acesso ao centro depende de $V(r)$.

Se $V(r) = -Ar^{-n}$ para $n \leq 1$ o termo repulsivo domina ~~para~~ e o centro é acessível.

- A função de onda é $\psi(r,\theta,\varphi) = f(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$ onde

$$f(r) = \frac{1}{r} R(r)$$ e $R(r)$ é obtido da equação (1).

<u>Alguns exemplos.</u>

"Onda"	
$l=0$	S
$l=1$	P
$l=2$	D
$\vdots$	

1. Considere a "partícula livre" onde $V(r) = 0$ e adicionalmente $l = 0$ (onda S).

Neste caso temos de (1)

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} R = 0 \quad , \text{ definindo } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

obtemos $\frac{d^2R}{dr^2} + k^2 R = 0$ o que nos dá

$$R(r) = A \operatorname{sen} kr + B \cos kr.$$

Usando a condição de contorno

$R(0) = 0$ temos $B = 0$ e

~~$R(r) = A\,\text{sen}\,kx$~~

$R(r) = A\,\text{sen}\,kr$ ou finalmente

$$f(r) = A\,\frac{\text{sen}\,kr}{r}$$ que é

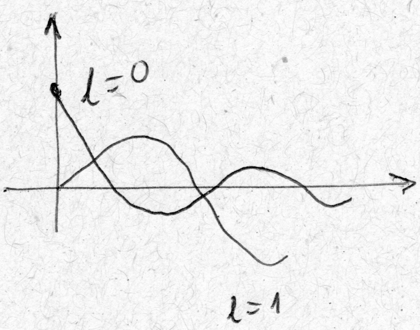
finita na origem e escrevemos como

$$\boxed{f(r) = a\,\frac{\text{sen}\,\xi}{\xi}}$$ onde $\xi = kr$.

A parte angular é $Y_{00}(\theta,\varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$

Reconhecemos $f(r)$ como a função esférica de Bessel para $l=0$, $j_l(\xi)$: $j_0(\xi) = \frac{\text{sen}\,\xi}{\xi}$

$$j_1(\xi) = \frac{\text{sen}\,\xi}{\xi^2} - \frac{\cos\xi}{\xi}$$



A outra solução que descartamos é

$$f(r) = b\,\frac{\cos\xi}{\xi}$$

Exercício. Considere o mesmo problema $V(r)=0$ mas com l qualquer. Definindo $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $\xi = kr$ obtenha a eq. diferencial

$$\xi^2\frac{d^2f}{d\xi^2} + 2\xi\frac{df}{d\xi} + \left[\xi^2 - l(l+1)\right]f = 0.$$

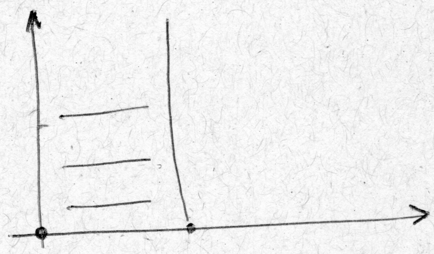
Esta equação nos dá as funções esféricas de Bessel ou as funções esféricas de Neumann. A primeira é regular na origem e a outra não.

A combinação delas também é solução e são as funções de Hankel.

2. Exemplo do poço esférico.

Obtenha a energia do estado fundamental de uma partícula confinada em um poço esférico

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } r \leq a \\ \infty & \text{se } r > a \end{cases}$$



Note que a origem é acessível e a solução deve ser a função esférica de Bessel:

$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = A f(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$ onde

dentro da caixa $f(r) = j_l(kr)$ e $E = \hbar^2 k^2/2m$

a condição de contorno ~~p~~ é $j_l(kr) = 0$ e para o estado fundamental

$$j_0(ka) = \frac{\operatorname{sen} ka}{ka} = 0 \;\rightarrow\; ka = n\pi$$

ou $k = n\pi/a$ $(n=1)$

Portanto, $\boxed{E_{1s} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$

3. Considere o exercício acima com $l=1$ e obtenha E_{1p} $(n=1, l=1)$.

$l=1$ chamamos onda P

Nesse caso a solução é

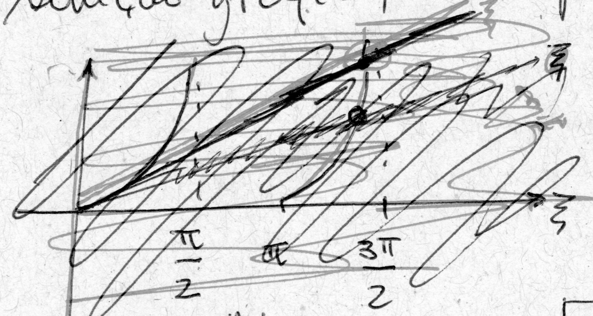
$$j_1(\xi) = \frac{\operatorname{sen}\xi}{\xi^2} - \frac{\cos\xi}{\xi}, \quad \xi = kr$$

$$j_1(ka) = 0 \Rightarrow j_1(\xi_0) = \frac{\operatorname{sen}\xi_0}{\xi_0^2} - \frac{\cos\xi_0}{\xi_0} = 0$$

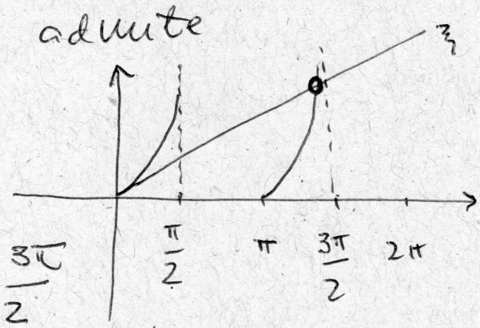
$$\Rightarrow \operatorname{sen}\xi_0 = \xi_0 \cos\xi_0$$

ou $\xi_0 = tg(\xi_0)$, que admite

solução gráfica, como já vimos →



Mal feito!

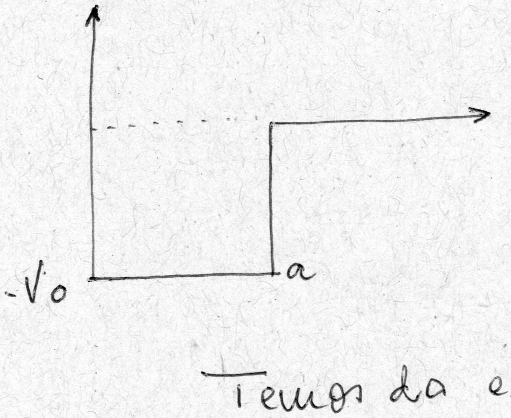


tomando $\xi_0 \lesssim \frac{3\pi}{2}$

$\Rightarrow k \simeq 3\pi/2a$

$$\Rightarrow \boxed{E_{1p} \simeq \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

4. Considere o poço finito com $l=0$ (onda s)



$V(r) = -V_0$ se $r \leq a$

0 se $r > a$

Estados ligados para $E<0$ e chamamos $\epsilon = -E$.

Temos da eq. (1)

$$-\frac{d^2R}{dr^2} + \left[\frac{2mV(r)}{\hbar^2} + \cancel{\frac{l(l+1)}{r^2}}\right]R = ER$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2}R(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}R(r) = 0$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} - \frac{2mV}{\hbar^2}R + \frac{2mE}{\hbar^2}R = 0$$

$$V = -V_0 \quad e \quad E = -\epsilon$$

$$\Rightarrow \frac{d^2R_1}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - \epsilon)R_1 = 0 \qquad p\ r \leq a$$

$$\frac{d^2R_2}{dr^2} - \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}R_2 = 0$$

Definindo $\alpha^2 = \frac{2m(V_0-\epsilon)}{\hbar^2}$

e $\beta^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}$ vem

$$\frac{d^2R_1}{dr^2} + \alpha^2 R_1 = 0 \Rightarrow R_1 = A\,\mathrm{sen}\,\alpha r \quad \text{(regular)}$$

$$\frac{d^2R_2}{dr^2} - \beta^2 R_2 = 0 \Rightarrow R_2 = Be^{-\beta r} \quad (R_2 \to 0 \text{ se } r \to \infty)$$

condição contorno: $A\,\mathrm{sen}\,\alpha a = Be^{-\beta a}$ ←

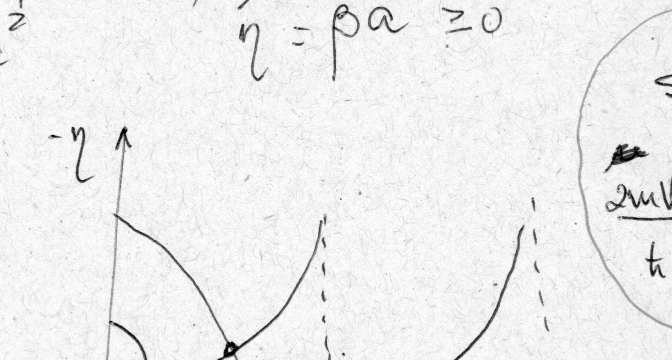
$A\alpha\cos\alpha a = -\beta Be^{-\beta a}$ ← 1ª derivada

$$\Rightarrow \alpha\,\mathrm{cotg}\,\alpha a = -\beta \quad ; \quad \xi = \alpha a \geq 0, \quad \eta = \beta a \geq 0$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

$$\eta = -\xi\,\mathrm{cotg}\,\xi$$

Estados ligados para $\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4}$



Só há estados ligados se $\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4}$