

Oscilador Harmônico Isotrópico

(exercício da lista)

- O potencial deste oscilador tridimensional é dado por

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

Em coordenadas cartesianas o problema é bastante simples e pode ser separado em três osciladores unidimensionais.

Para isso, basta observar que a Hamiltoniana é separável nas 3 dimensões, isto é:

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Z^2 = H_x + H_y + H_z$$

e considerar que: $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \rightarrow$ com $|\psi\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$ e $E = E_x + E_y + E_z$

$$\text{onde } \begin{cases} H_x |n_x\rangle = \left[\frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \right] |n_x\rangle = E_x |n_x\rangle \text{ com } E_x = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega \\ H_y |n_y\rangle = \left[\frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Y^2 \right] |n_y\rangle = E_y |n_y\rangle \text{ com } E_y = (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega \\ H_z |n_z\rangle = \left[\frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Z^2 \right] |n_z\rangle = E_z |n_z\rangle \text{ com } E_z = (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega \end{cases}$$

- As autofunções podem ser obtidas pela composição de soluções do oscilador unidimensional. Faça alguns casos

- A energia do sistema é $E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega$, com n_x, n_y e $n_z = 0, 1, 2, \dots$

Qual é a degenerescência de cada nível? Estado fundamental $E_{0,0,0} = \frac{3}{2}\hbar\omega$;

1o. estado excitado $E_{1,0,0} = E_{0,1,0} = E_{0,0,1} = \frac{5}{2}\hbar\omega$ (3-degenerado).

$\rightarrow g_0 = 1$
 $\rightarrow g_1 = 3$



Oscilador harmônico isotrópico em coordenadas esféricas

F689

Aula 26

- O potencial deste oscilador tridimensional (continuação).

2o. estado excitado

$$E_{1,1,0} = E_{1,0,1} = E_{0,1,1} = E_{2,0,0} = E_{0,2,0} = E_{0,0,2} = \frac{7}{2}\hbar\omega \quad (6\text{-degenerado}).$$

3o. estado excitado

$$E_{1,1,1} = E_{2,1,0} = E_{0,2,1} = E_{1,0,2} = E_{1,2,0} = E_{2,0,1} = E_{0,1,2} = E_{3,0,0} = E_{0,3,0} = E_{0,0,3} = \frac{9}{2}\hbar\omega \quad (10\text{-degenerado}).$$

- O próximo passo é resolver esse problema em coordenadas esféricas e avaliar a degenerescência do espectro nesta representação. O potencial $V(R) = \frac{1}{2}m\omega^2 R^2$ é central e, portanto, sabemos a forma da solução:

$$\psi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

onde $u_{k,\ell}(r)$ deve ser solução da equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \right] u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} u_{k,\ell}(r),$$

com a condição de contorno $u_{k,\ell}(0) = 0 \quad \forall \ell$.

Oscilador harmônico isotrópico em coordenadas esféricas

F689

Aula 26

- Para resolver o problema estudaremos o comportamento das soluções que satisfazem a equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \right] u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} u_{k,\ell}(r),$$

para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$.

- $r \rightarrow 0$, os termos dominantes são $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{k,\ell}(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} u_{k,\ell}(r) = 0$, e, conforme vimos, $\lim_{r \rightarrow 0} u_{k,\ell}(r) \sim r^{\ell+1}$.
- $r \rightarrow \infty$, os termos dominantes são $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{k,\ell}(r) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 u_{k,\ell}(r) = 0$, cuja solução é do tipo (ver OHS unidimensional) $\lim_{r \rightarrow \infty} u_{k,\ell}(r) \sim e^{-m\omega r^2/2\hbar}$.
- Tentaremos uma solução que combina os dois limites

$$u_{k,\ell}(r) = f_\ell(r) r^{\ell+1} e^{-m\omega r^2/2\hbar}$$

- Essa substituição fornece a seguinte equação

$$\frac{d^2}{dr^2} f_\ell(r) + 2 \left(\frac{(\ell+1)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right) \frac{d}{dr} f_\ell(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - (2\ell+3) \frac{m\omega}{\hbar} \right] f_\ell(r) = 0$$

- Em seguida, use a série de potências $f_\ell(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n$ e obtenha

Oscilador harmônico isotrópico em coordenadas esféricas

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ n(n + 2\ell + 1)a_n r^{n-2} + \left[-\frac{2m\omega}{\hbar}n + \frac{2mE}{\hbar^2} - (2\ell + 3)\frac{m\omega}{\hbar} \right] a_n r^n \right\} = 0$$

- Para essa equação ser satisfeita, é preciso que os coeficientes das diversas potências em r se anulem de forma independente. Considere as potências

r^{-2} , obtida só do primeiro termo, com $n = 0 \rightarrow 0(0 + 2\ell + 1)a_0 = 0 \rightarrow \forall a_0$

r^{-1} , obtida só do primeiro termo, com $n = 1 \rightarrow \underbrace{1(1 + 2\ell + 1)}_{\text{nunca é zero}} a_1 = 0 \rightarrow a_1 = 0$

r^n , obtida pela combinação de termos (faça a estratégia usual):

$$(n + 2)(n + 2\ell + 3)a_{n+2} = \left[-\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(2n + 2\ell + 3) \right] a_n \begin{cases} a_1 = 0 \text{ e } \forall \text{ ímpar} \\ a_0 \neq 0 \text{ e } \forall \text{ par} \end{cases}$$

Com isso concluímos: só a_n , com n par, contribui.

- É possível mostrar que se não interrompermos a série, o polinômio explode mais rápido que a exponencial de argumento negativo se anula. (verifique)

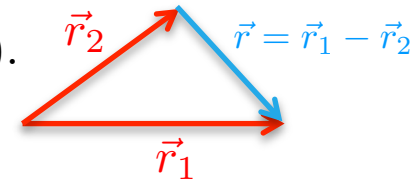
- Para fazer $a_{n+2} = 0$ basta fazer $\left[-\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(2n + 2\ell + 3) \right] = 0$ e \therefore

$$E_{n',\ell} = (n' + \ell + 3/2)\hbar\omega \text{ com } n' \text{ par. } \begin{cases} \text{E.F.: } n' = 0, \ell = 0 \quad E_{0,0} = 3/2\hbar\omega \rightarrow g_0 = 1 \\ \text{1o.: } n' = 0, \ell = 1 \quad E_{0,1} = 5/2\hbar\omega \rightarrow g_1 = 3 \end{cases}$$

2o. estado excitado: $n' = 0, \ell = 2$ ou $n' = 2, \ell = 0$ $E_{0,2} = E_{2,0} = 7/2\hbar\omega$
 $\rightarrow g_2 = 6$ (faça g_3)

Sistema de duas partículas interagentes

- Movimento do centro de massa e movimento relativo para um sistema de duas partículas interagentes que respeitam o potencial: $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$.



- Comece escrevendo a Lagrangeana do sistema

$$\mathcal{L}_{\text{Lagrangeana}} = \mathcal{L}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dot{\vec{r}}_1, \dot{\vec{r}}_2) = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^2 - V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

e ache os momentos conjugados $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$, dando

$$\begin{cases} \vec{p}_1 = m_1\dot{\vec{r}}_1 \\ \vec{p}_2 = m_2\dot{\vec{r}}_2 \end{cases}$$

- Na Mecânica Clássica fazemos a seguinte troca de variáveis
- $$\begin{cases} (1) \vec{r}_G = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \\ (2) \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \end{cases}$$

que permite a inversão

$$\begin{cases} (1) + \frac{m_2}{m_1 + m_2} (2) \rightarrow \vec{r}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} = \frac{m_1\vec{r}_1}{m_1 + m_2} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r}_1 = \vec{r}_1 \\ (1) - \frac{m_1}{m_1 + m_2} (2) \rightarrow \vec{r}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r} = \frac{m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r}_2 = \vec{r}_2 \end{cases}$$

- E reescrever a Lagrangeana do sistema em função das novas coordenadas:

$$\mathcal{L}(\vec{r}_G, \vec{r}, \dot{\vec{r}}_G, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2}m_1 \left[\dot{\vec{r}}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{r}} \right]^2 + \frac{1}{2}m_2 \left[\dot{\vec{r}}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \dot{\vec{r}} \right]^2 - V(\vec{r}) \text{ ou}$$

$$= \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\vec{r}}_G^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{m_1 m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} + \frac{m_2 m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \right) \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) \Rightarrow \text{continua}$$

Sistema de duas partículas interagentes

- Para finalmente obter

$$\mathcal{L}(\vec{r}_G, \vec{r}, \dot{\vec{r}}_G, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\vec{r}}_G^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\dot{\vec{r}}^2 - V(r) = \frac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_G^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\vec{r}}^2 - V(r),$$

onde $\begin{cases} M = m_1 + m_2 \text{ é a massa total do sistema} \\ \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ é conhecida como a massa reduzida do sistema} \end{cases}$

- A Lagrangeana permite calcular os novos momentos canônicos $\begin{cases} \vec{p}_G = M\dot{\vec{r}}_G \\ \vec{p} = \mu\dot{\vec{r}} \end{cases}$
- Esses momentos podem ser reescritos em função das coordenadas antigas:

$$\vec{p}_G = (m_1 + m_2)\frac{m_1\dot{\vec{r}}_1 + m_2\dot{\vec{r}}_2}{m_1 + m_2} = m_1\dot{\vec{r}}_1 + m_2\dot{\vec{r}}_2 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

$$\vec{p} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}(\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\left(\frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2}\right) \therefore \frac{\vec{p}}{\mu} = \frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2}$$

- A Hamiltoniana pode ser escrita a partir da Lagrangeana $\mathcal{H} = \sum_i \vec{p}_i \cdot \dot{\vec{r}}_i - \mathcal{L}$

$$\mathcal{H} = \frac{p_G^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \Rightarrow \text{separável. As equações de Hamilton Jacobi,}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \text{ fornecem } \begin{cases} \dot{\vec{P}}_G = 0 \text{ (centro de massa é uma partícula livre)} \\ \dot{\vec{p}} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) \text{ (equação de um "corpo" só).} \end{cases}$$

fictícia \rightarrow

partícula fictícia \leftarrow

Sistema de duas partículas interagentes na Mecânica Quântica

- Na mecânica clássica é comum escolhermos um referencial no centro de massa. Isso reduz o problema de dois corpos à um único problema de um corpo só de uma partícula fictícia de massa $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

- Como fica isso tudo na Mecânica Quântica?

Começamos pelas relações comutação

$$\begin{cases} [X_1, P_{1x}] = [Y_1, P_{1y}] = [Z_1, P_{1z}] = i\hbar \\ [X_2, P_{2x}] = [Y_2, P_{2y}] = [Z_2, P_{2z}] = i\hbar \end{cases}$$

Para partículas diferentes eles comutam

$$\begin{cases} [X_1, P_{2x}] = [Y_1, P_{2y}] = [Z_1, P_{2z}] = 0 \\ [X_2, P_{1x}] = [Y_2, P_{1y}] = [Z_2, P_{1z}] = 0 \end{cases}$$

- A partir de $\begin{cases} \vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \\ \vec{P} = \frac{m_2 \vec{P}_1 - m_1 \vec{P}_2}{m_1 + m_2} \end{cases}$ obtemos $\begin{cases} [X_G, P_{Gx}] = [Y_G, P_{Gy}] = [Z_G, P_{Gz}] = i\hbar \\ [X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar \end{cases}$

- O operadores \vec{R}_G e \vec{P}_G comutam com os operadores da partícula fictícia \vec{R} e \vec{P} .
- As componentes de \vec{P}_G e \vec{P} comutam entre si. De \vec{R} e \vec{R}_G também.
- Assim, podemos tratá-las como observáveis de posições e momentos de duas partículas fictícias distintas, uma com (\vec{R}, \vec{P}) e outra com (\vec{R}_G, \vec{P}_G) .

Sistema de duas partículas interagentes na Mecânica Quântica

F689

Aula 26

- Nossa mudança de coordenadas permitiu trocar

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \Rightarrow \text{(partículas acopladas por } V)$$

por

$$H = \frac{P_G^2}{2M} + \frac{P^2}{2\mu} + V(\vec{R}) = H_G + H_r \Rightarrow \text{(partículas não acopladas)}$$

- Como $H_G = \frac{P_G^2}{2M}$ comuta com $H_r = \frac{P^2}{2\mu} + V(\vec{R})$ e ambos comutam com H , isto é $[H_G, H_r] = [H, H_r] = [H, H_G] = 0 \Rightarrow$ sabemos que existe uma base comum de

$$\text{autofunções de } H_G, H_r \text{ e } H \begin{cases} H_G|\psi\rangle = E_G|\psi\rangle \\ H_r|\psi\rangle = E_r|\psi\rangle \\ H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \end{cases} \quad \text{onde } E = E_G + E_r$$

- Considere a representação $\mathcal{E} = \{|\vec{r}_G, \vec{r}\rangle\}$, cujos vetores são autovetores simultâneos das observáveis \vec{R}_g e \vec{R} ou $\mathcal{E} = \{|\psi\rangle\}$ a representação da energia.

$$\text{Em } \{|\vec{r}_G, \vec{r}\rangle\} \begin{cases} \vec{R}_G \rightarrow \vec{r}_G \\ \vec{R} \rightarrow \vec{r} \\ \vec{P}_G \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_G \\ \vec{P} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{cases} \quad \text{Em } \{|\psi\rangle\} \equiv \mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{R}_G} \otimes \mathcal{E}_{\vec{r}} \begin{cases} |\psi\rangle = |\chi_G\rangle \otimes |\omega_r\rangle \\ H_G|\chi_G\rangle = E_G|\chi_G\rangle \\ H_r|\omega_r\rangle = E_r|\omega_r\rangle \\ |\chi_G\rangle \in \mathcal{E}_{\vec{R}_G} \\ |\omega_r\rangle \in \mathcal{E}_{\vec{r}} \end{cases}$$

Sistema de duas partículas interagentes na Mecânica Quântica

F689

Aula 26

- As equações
$$\begin{cases} H_G |\chi_G\rangle = E_G |\chi_G\rangle \\ H_r |\omega_r\rangle = E_r |\omega_r\rangle \end{cases}$$
 na representação das coordenadas, $\{|\vec{r}_G\rangle\}$

e $\{|\vec{r}\rangle\}$, ficam
$$\begin{cases} \langle \vec{r}_G | H_G | \chi_G \rangle = E_G \langle \vec{r}_G | \chi_G \rangle \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \chi_G(\vec{r}_G) = E_G \chi_G(\vec{r}_G) \\ \langle \vec{r} | H_r | \omega_r \rangle = E_r \langle \vec{r} | \omega_r \rangle \rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \omega_r(\vec{r}) = E_r \omega_r(\vec{r}) \end{cases}$$

- A primeira equação é de uma partícula livre, cuja solução é uma onda plana

$$\chi_G(\vec{r}_G) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_G \cdot \vec{r}_G} \text{ e energia dada por } E_G = \frac{p_g^2}{2M} \text{ (energia de translação do sistema como um todo).}$$

- A segunda equação é de um potencial central se $V(\vec{r}) = V(r) \Rightarrow$ o potencial depende apenas da distância entre as duas partículas.

- Se $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ com
$$\begin{cases} \vec{L}_1 = \vec{R}_1 \times \vec{P}_1 \\ \vec{L}_2 = \vec{R}_2 \times \vec{P}_2 \end{cases}$$
 mostraremos que $\vec{J} = \vec{L}_G + \vec{L}$ com
$$\begin{cases} \vec{L}_G = \vec{R}_G \times \vec{P}_G \\ \vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \end{cases}$$

Momento Angular de um Sistema de duas partículas interagentes

• Para demonstrar isso, lembre que

$$\begin{cases} \vec{R}_G = \frac{m_1}{m_1+m_2} \vec{R}_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{R}_2 \\ \vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \\ \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2 \\ \vec{P} = \frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{P}_1 - \frac{m_1}{m_1+m_2} \vec{P}_2 \end{cases}$$

e calcule

$$\begin{cases} \vec{L}_G = \vec{R}_G \times \vec{P}_G = \left(\frac{m_1}{m_1+m_2} \vec{R}_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{R}_2 \right) \times (\vec{P}_1 + \vec{P}_2) \\ \vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} = (\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \times \left(\frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{P}_1 - \frac{m_1}{m_1+m_2} \vec{P}_2 \right) \end{cases}$$

ou seja

$$\begin{cases} \vec{L}_G = \frac{m_1}{m_1+m_2} (\vec{R}_1 \times \vec{P}_1 + \vec{R}_1 \times \vec{P}_2) + \frac{m_2}{m_1+m_2} (\vec{R}_2 \times \vec{P}_1 + \vec{R}_2 \times \vec{P}_2) \\ \vec{L} = \frac{m_2}{m_1+m_2} (\vec{R}_1 \times \vec{P}_1 - \vec{R}_2 \times \vec{P}_1) + \frac{m_1}{m_1+m_2} (\vec{R}_2 \times \vec{P}_2 - \vec{R}_1 \times \vec{P}_2) \end{cases}$$

$$\text{Assim, } \vec{L}_G + \vec{L} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2} \vec{R}_1 \times \vec{P}_1 + \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2} \vec{R}_2 \times \vec{P}_2 = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 = \vec{J} \quad \text{c.q.d.}$$

A soma dos momentos angulares das duas partículas é igual a soma dos momentos angulares das partículas fictícias.

O Átomo de Hidrogênio

- O Hidrogênio consiste de

um próton de	{	massa $m_p = 1,7 \times 10^{-27} kg$
		carga $q = 1,6 \times 10^{-19} \text{Coulomb}$
e		
um elétron de	{	massa $m_e = 0,91 \times 10^{-30} kg$
		carga $-q$

- A interação entre as duas partículas é essencialmente eletrostática e o potencial correspondente é dado por $V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$ com $\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = e^2$.

- Nosso problema é resolver a equação do movimento relativo da partícula fictícia de massa $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$, cuja solução fornece o espectro do átomo de hidrogênio.

- Conforme vimos, a Hamiltoniana clássica do movimento relativo é dada por

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$

- Note que a massa reduzida $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \approx m_e(1 - m_e/m_p)$ é quase a massa do elétron, pois $m_e/m_p \sim 1/1800$. O centro de massa \approx próton.

O Átomo de Hidrogênio: O modelo de Bohr

- O modelo de Bohr é baseado no conceito de trajetórias e é, portanto, incompatível com a mecânica quântica. Entretanto, sua apresentação é útil para introduzir quantidades fundamentais como energia de ionização E_I e tamanhos típicos da escala atômica (raio de Bohr a_0).
- Veremos que o espectro de energias do modelo de Bohr coincide com o espectro obtido pela equação de Schrödinger para o potencial Coulombiano e, portanto, próximo do espectro experimental. Isso tornou o modelo muito atraente na época.
- Esse modelo semi-clássico é baseado na hipótese que o elétron descreve órbitas circulares de raio r em volta do próton, cujo movimento obedece as seguintes

$$\text{equações} \left\{ \begin{array}{l} (1) \ E = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{e^2}{r} \rightarrow \text{energia} \\ (2) \ \frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \rightarrow \text{força centrípeta} \\ (3) \ \mu v r = n\hbar \rightarrow \text{quantização de momento angular } (n \geq 1 \text{ e inteiro}) \end{array} \right.$$

- Dividindo a equação (2) pela (3), temos: $v = \frac{e^2}{n\hbar} = \frac{v_0}{n}$ com $v_0 = \frac{e^2}{\hbar}$.
- Esse resultado na (3), dá: $r = \frac{n\hbar}{\mu v} = \frac{n^2\hbar^2}{\mu e^2} = n^2 a_0$ com $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$.

O Átomo de Hidrogênio: O modelo de Bohr

- Inserindo os resultados, $v = \frac{e^2}{n\hbar}$ e $r = \frac{n^2\hbar^2}{\mu e^2}$, na equação (1), temos:

$$E = \frac{1}{2}\mu\left(\frac{e^2}{n\hbar}\right)^2 - \frac{e^2}{\frac{n^2\hbar^2}{\mu e^2}} = -\frac{1}{2}\frac{\mu e^4}{n^2\hbar^2} = -\frac{E_I}{n^2} \text{ com } E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \text{ (ionização)}$$

- Note que E_I é a diferença entre a energia do nível $n = \infty$ com o nível $n = 1$.

- Considerando $\left\{ \begin{array}{l} \hbar = 1,054589 \times 10^{-34} \text{ J.s} \\ q = -1,602189 \times 10^{-19} \text{ C} \\ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,988 \times 10^9 \text{ N.m}^2/\text{C}^2 \\ m_e = 9,10953 \times 10^{-31} \text{ kg} \end{array} \right. \Rightarrow e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = 2,307 \times 10^{-28} \text{ N.m}^2$

Obtemos as quantidades típicas $\left\{ \begin{array}{l} a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0,5292 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,5292 \text{ \AA} \\ v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = 2,19 \times 10^6 \text{ m/s} \rightarrow \frac{v_0}{c} = 0,0073 \\ E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV} \end{array} \right.$

Preparando a solução do átomo de Hidrogênio

- A equação que queremos resolver é: $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$
- O potencial $-\frac{e^2}{r}$ é central e, portanto, sabemos a forma da solução:

$$\psi_{k\ell m}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

onde $u_{k,\ell}(r)$ deve ser solução da equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} u_{k,\ell}(r),$$

com a condição de contorno $u_{k,\ell}(0) = 0 \forall \ell$.

- Para $E > 0$ a equação acima admite soluções para qualquer valor de E . As funções $u_{k,\ell}(r)$ não são quadraticamente integráveis.
- Para $E < 0$ só existem soluções para certos valores de E e os $u_{k,\ell}(r)$ são quadraticamente integráveis.
- Classicamente $\begin{cases} E > 0 \rightarrow \text{não ligado} \\ E < 0 \rightarrow \text{ligado} \end{cases}$

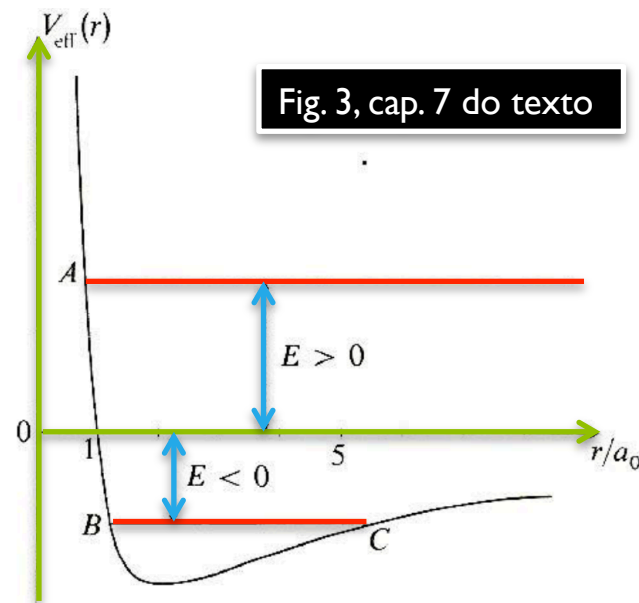


Fig 3, cap. 7 do texto

Preparando a solução do átomo de Hidrogênio

- Começaremos com uma mudança de variáveis em

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} u_{k,\ell}(r).$$

Para simplificar as contas, escolheremos a_0 e E_I como unidades de comprimento e energia.

$$\rho = \frac{r}{a_0} \quad \text{e} \quad \lambda_{k,\ell} = \sqrt{-\frac{E_{k,\ell}}{E_I}}$$

- Fazendo a troca de r para ρ , obtemos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu a_0^2 \rho^2} - \frac{e^2}{a_0 \rho} \right] u_{k,\ell}(\rho) = E_{k,\ell} u_{k,\ell}(\rho).$$

- Lembre que $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ e $E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$. Multiplique a equação por $-2\mu a_0^2$ e divida por \hbar^2 para obter:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 2 \underbrace{\frac{\mu e^2}{\hbar^2}}_{\frac{1}{a_0}} \frac{a_0}{\rho} + E_{k,\ell} \underbrace{\frac{2\mu a_0^2}{\hbar^2}}_{\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)^2 = \frac{2\hbar^2}{\mu e^4} = \frac{1}{E_I}} \right] u_{k,\ell}(\rho) = 0$$

A nova equação:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{k,\ell}^2 \right] u_{k,\ell}(\rho) = 0$$