Equação de Schrödinger para potencial central: caso da partícula livre e poço esférico e infinito

Gabriel Henrique Martins de Aguiar 172182
FI 001 - Mecânica Quântica I

Partindo da equação radial da equação de Schrödinger :

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

Para partícula livre temos V(r) = 0,

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{El}(r)=\frac{-2mE}{\hbar^2}R_{El}(r)$$

Se considerarmos $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ e $\rho=kr$,

$$\left[\frac{1}{k^2r^2}\left(2r\frac{d}{dr}+r^2\frac{d^2}{dr^2}\right)+\left(+1-\frac{l(l+1)}{k^2r^2}\right)\right]R_{El}(r)=0\Rightarrow\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}+\left(+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right]R_{El}(\rho)=0$$

pois $\frac{d}{dr}=k\frac{d}{d\rho}$ e $\frac{d^2}{dr^2}=k^2\frac{d^2}{d\rho^2}$.

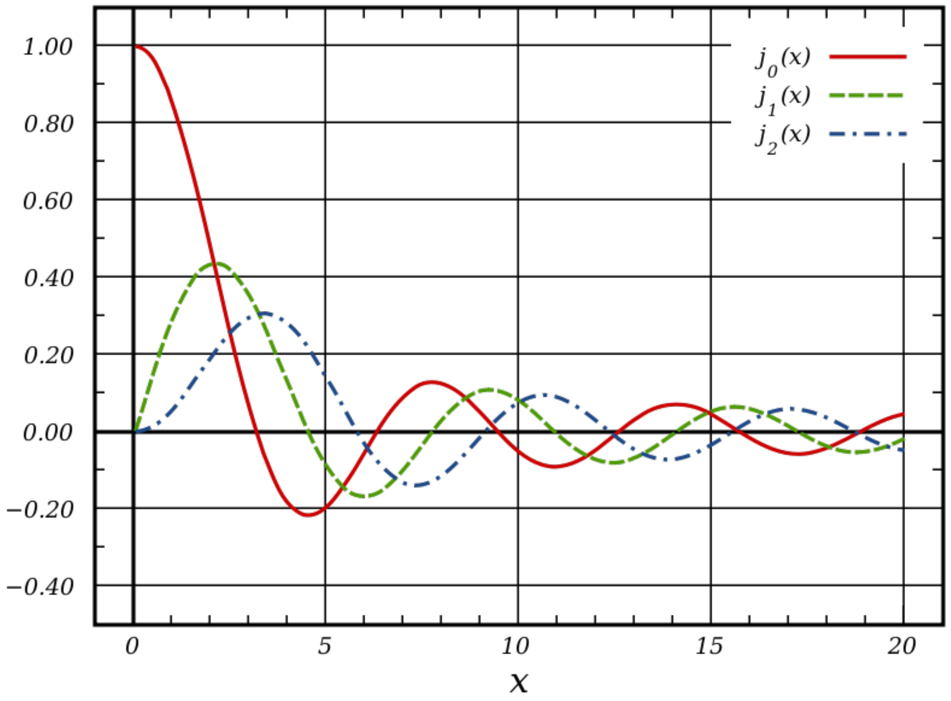
A equação é parte radial da Equação de Bessel em coordenadas esféricas, portanto R é uma combinação linear da função de Bessel esférica do primeiro e segundo tipo:

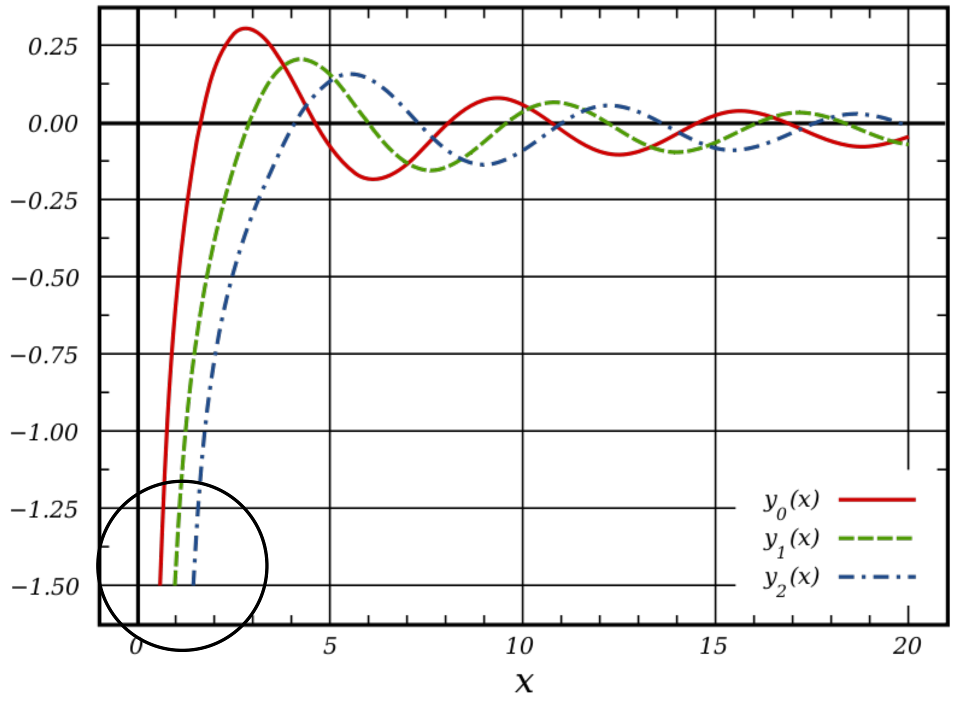
$$R_{El}(\rho)=Aj_l(\rho)+Bn_l(\rho)$$

Analisando o comportamento das funções na origem:

$$j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+l+\frac{3}{2})} \left(\frac{\rho}{2}\right)^{2m+l+\frac{1}{2}} \right) \propto \rho^l \longleftrightarrow j_l(\rho) = (-\rho)^l \left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right]^l \left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right)$$

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m-l+\frac{1}{2})} \left(\frac{\rho}{2}\right)^{2m-l-\frac{1}{2}} \right) \propto \rho^{-l-1} \longleftrightarrow n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right]^l \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right)$$





Portanto, a solução final será na forma: $R_{El}(\rho) = A j_l(\rho)$

Gráficos retirados do Wikipédia

Para resolver o poço infinito esférico basta por a condição de contorno na fronteira em r = a, onde a é o raio do poço,

$$R_{\mathrm{El}}(\rho) = R_{\mathrm{El}}(ka) = 0$$

Portanto, para qualquer valor de A teremos a seguinte condição:

$$j_l(ka) = 0 \longrightarrow ka = \text{zeros da função de Bessel esférica}$$

Usando a definição da função k, encontramos os valores numéricos para a energia quantizada:

$$E_{l=0} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[\pi^2, (2\pi)^2, (3\pi)^2, \ldots\right]$$
$$E_{l=1} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[4.49^2, 7.73^2, 10.90^2, \ldots\right]$$
$$E_{l=2} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[5.84^2, 8.96^2, 12.25^2, \ldots\right]$$

...