17: Potenciais com simetria central

Chamam-se assim os potenciais que, expressos em coordenadas esféricas, são funções apenas da variável radial r. O caso mais importante, naturalmente, é o do átomo de Hidrogênio. Vamos tratar primeiramente o caso geral.

$$-\frac{\hbar^2}{2m\,\vec{\nabla}^2\psi(r,\theta,\phi)+V(r)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi)} \tag{330}$$

é a equação de Schrödinger para estados estacionários de uma partícula de massa m cuja energia potencial depende apenas da distância à origem. Utilizando coordenadas esféricas, temos

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\vec{l}}^2}{r^2} \tag{331}$$

onde

$$\hat{\vec{l}}^2 = -\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})\right) \tag{332}$$

é o operador de momento angular total (veja Eq.(294) e anteriores).

Vamos procurar soluções da Eq.(331) que sejam da forma

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Como $\hat{\vec{l}}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$, tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}Y_{lm}(\theta,\phi)\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{R(r)}{r^2}l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi)\right\}+$$

$$+V(r)R(r)Y_{lm}(\theta,\phi) = ER(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{333}$$

Cancelando Y_{lm},

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R(r)+V(r)R(r)=ER(r) \tag{334}$$

Introduzimos agora a função

$$u(r) = rR(r)$$

satisfazendo $u(0) = 0$. Reescrevendo a Eq.(334) em termos de $u(r)$, obtém-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)\right]u(r)=Eu(r) \tag{335}$$

Esta é a chamada *equação radial* de Schrödinger, e contém toda a dinâmica. Lembrando a condição $u(0) = 0$, decorrência de que $u(r) = rR(r)$ com $R(r)$ regular na origem (os casos interessantes fisicamente não são aqueles em que a partícula tem probabilidade zero de estar em qualquer lugar que não a origem!), podemos interpretar a equação acima como uma equação de Schrödinger de um movimento unidimensional sujeito aos seguintes "potenciais":(a) Uma parede impenetrável em $r = 0$, que impede a passagem da partícula para valores negativos de r. (b) Um potencial do tipo $\frac{1}{r^2}$ repulsivo, chamado de potencial centrífugo. (c) O verdadeiro potencial, $V(r)$.

O potencial centrífugo vem do fato de que a eliminação das variáveis θ e ϕ, é formalmente equivalente a colocar-se em um sistema de referência que "gira" com o sistema físico, ou seja, em um sistema não-inercial. Surgem, então, as chamadas forças de inércia, das quais a força centrífuga é a mais popular.[19]