Trabalho I

Questão 01: Obtenha o operador rotacional em um sistema de coordenadas curvilíneas qualquer.

Nas coordenadas curvilíneas q_i, vamos denotar o vetor posição por $\vec{r}'$. Assim, o vetor diferencial de distância $d\vec{r}'$ tem a forma:

$$d\vec{r}' = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \vec{r}}{dq_i} dq_i = \vec{e}_1 h_1 dq_1 + \vec{e}_2 h_2 q_2 + \vec{e}_3 h_3 q_3$$

Sabemos que, para dois vetores diferentes $\vec{A}$ e $\vec{B}$, a área orientada expandida por $\vec{A}, \vec{B}$ é dada por $\vec{A} \times \vec{B}$. Assim, para $\{q_1, q_2, q_3\}$, o elemento unitário de área é dado por

$$\begin{aligned} d\vec{s} &= d\vec{r}|_{q_1,q_3 \text{ fixo}} \times d\vec{r}|_{q_1,q_2 \text{ fixo}} + d\vec{r}|_{q_1,q_2 \text{ fixo}} \times d\vec{r}|_{q_2,q_3 \text{ fixo}} + d\vec{r}|_{q_1,q_3 \text{ fixo}} \times d\vec{r}|_{q_1,q_2 \text{ fixo}} \\ &= h_2 h_3 dq_2 dq_3 \vec{e}_1 + h_3 h_1 dq_3 dq_1 \vec{e}_2 + h_1 h_2 dq_1 dq_2 \vec{e}_3 \end{aligned}$$

A partir disso, podemos obter o rotacional, analisando a integral:

$$\begin{aligned} \int_S (\vec{\nabla} \times \vec{V}) \cdot d\vec{s} &= (\vec{\nabla} \times \vec{V}) \cdot (h_2 h_3 dq_2 dq_3 \vec{e}_1 + h_3 h_1 dq_3 dq_1 \vec{e}_2 + h_1 h_2 dq_1 dq_2 \vec{e}_3) \\ &= (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_2 h_3 dq_2 dq_3 \cdot \vec{e}_1 + (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_3 h_1 dq_3 dq_1 \cdot \vec{e}_2 + (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_1 h_2 dq_1 dq_2 \cdot \vec{e}_3 \end{aligned}$$

Pelo Teorema de Stokes,

$$(\vec{\nabla} \times \vec{V}) \cdot \hat{n} = \lim_{\Delta S \to 0} \frac{1}{\Delta S} \oint_c \vec{V} \cdot d\vec{r}$$

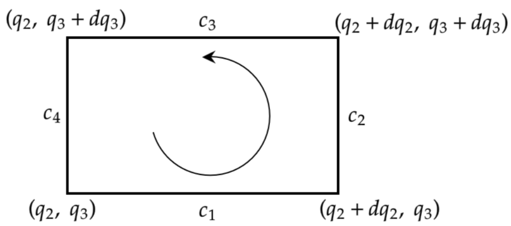
onde chegamos que

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_2 h_3 dq_2 dq_3 \cdot \vec{e}_1 &= \oint_{c_1} \vec{V} \cdot d\vec{r} \\ (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_3 h_1 dq_3 dq_1 \cdot \vec{e}_2 &= \oint_{c_2} \vec{V} \cdot d\vec{r} \\ (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_1 h_2 dq_1 dq_2 \cdot \vec{e}_3 &= \oint_{c_3} \vec{V} \cdot d\vec{r} \end{aligned}$$

onde as integrais de linhas (sobre c_i) são pelos contornos das superfícies $q_i = \text{constante}$. Ou seja:

- c_1 representa um contorno diferencial no plano (q_2, q_3);
- c_2 representa um contorno diferencial no plano (q_3, q_1);
- c_3 representa um contorno diferencial no plano (q_1, q_2).

Vamos calcular a primeira integral de linha. Consideremos o caminho abaixo (c_1).



A integral de linha ao longo do contorno c_1 no plano (q_2, q_3) é composta por quatro segmentos:

- De (q_2, q_3) até $(q_2 + dq_2, q_3)$:

$$\vec{V} \cdot d\vec{r} = V_2 h_2 dq_2$$

- De $(q_2 + dq_2, q_3)$ até $(q_2 + dq_2, q_3 + dq_3)$:

$$\vec{V} \cdot d\vec{r} = V_3 h_3 dq_3$$

- De $(q_2 + dq_2, q_3 + dq_3)$ até $(q_2, q_3 + dq_3)$:

$$\vec{V} \cdot d\vec{r} = -V_2 h_2 dq_2$$

- De $(q_2, q_3 + dq_3)$ até (q_2, q_3):

$$\vec{V} \cdot d\vec{r} = -V_3 h_3 dq_3$$

Somando todas as contribuições para obter a circulação total:

$$\oint_{c_1} \vec{V} \cdot d\vec{r} = [V_2 h_2 dq_2]_{(q_2,q_3)} + [V_3 h_3 dq_3]_{(q_2+dq_2,q_3)} + [-V_2 h_2 dq_2]_{(q_2,q_3+dq_3)} + [-V_3 h_3 dq_3]_{(q_2,q_3)}$$

Dado que estamos analisando variações infinitesimais (isto é, deslocamentos infinitesimais), podemos aproximar cada variação das componentes de $\vec{V}$ em relação a coordenada q_i pela expansão de Taylor de primeira ordem, dada por:

$$V(q_i + dq_i) \approx V(q_i) + \frac{\partial V}{\partial q_i} dq_i$$

Assim, podemos escrever:

$$\begin{aligned} V_3(q_2 + dq_2, q_3) &\approx V_3(q_2, q_3) + \frac{\partial V_3}{\partial q_2} dq_2 \\ V_2(q_2, q_3 + dq_3) &\approx V_2(q_2, q_3) + \frac{\partial V_2}{\partial q_3} dq_3 \end{aligned}$$

Substituindo na integral:

$$\begin{aligned} \int_{c_1} \vec{V} \cdot d\vec{r} &\approx h_2 V_2 dq_2 + h_3 V_3 dq_3 + h_3 \frac{\partial V_3}{\partial q_2} dq_2 dq_3 - h_2 V_2 dq_2 - h_2 \frac{\partial V_2}{\partial q_3} dq_3 dq_2 - h_3 V_3 dq_3 \\ &= h_3 \frac{\partial V_3}{\partial q_2} dq_2 dq_3 - h_2 \frac{\partial V_2}{\partial q_3} dq_3 dq_2 \\ &= \left(h_3 \frac{\partial V_3}{\partial q_2} - h_2 \frac{\partial V_2}{\partial q_3} \right) dq_2 dq_3 \end{aligned}$$

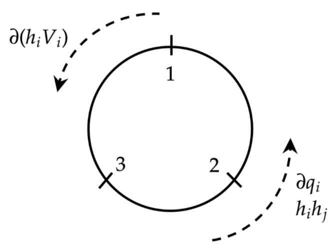
Logo:

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \times \vec{V}) h_2 h_3 dq_2 dq_3 \cdot \vec{e}_1 = \oint_{c_1} \vec{V} \cdot d\vec{r} &= \left(h_3 \frac{\partial V_3}{\partial q_2} - h_2 \frac{\partial V_2}{\partial q_3} \right) dq_2 dq_3 \\ \Rightarrow & \boxed{(\vec{\nabla} \times \vec{V}) = \frac{1}{h_2 h_3} \left(\frac{\partial (h_3 V_3)}{\partial q_2} - \frac{\partial (h_2 V_2)}{\partial q_3} \right) \vec{e}_1} \end{aligned}$$

De modo equivalente, chegamos nas outras componentes do rotacional, que podem também ser obtidas pela permutação cíclica dos índices:

$$\Rightarrow \boxed{(\vec{\nabla} \times \vec{V}) = \frac{1}{h_3 h_1} \left(\frac{\partial (h_1 V_1)}{\partial q_3} - \frac{\partial (h_3 V_3)}{\partial q_1} \right) \vec{e}_2}$$

$$\Rightarrow \boxed{(\vec{\nabla} \times \vec{V}) = \frac{1}{h_1 h_2} \left(\frac{\partial (h_2 V_2)}{\partial q_1} - \frac{\partial (h_1 V_1)}{\partial q_2} \right) \vec{e}_3}$$



Finalmente, chegamos que:

$$(\vec{\nabla} \times \vec{V})_i = \frac{1}{h_j h_k} \sum_{\text{cyc}} \left(\frac{\partial h_k V_k}{\partial q_j} - \frac{\partial (h_j V_j)}{\partial q_k} \right) \vec{e}_i$$

onde o somatório $\sum_{\text{cyc}}$ percorre os índices (i, j, k) de forma cíclica. De maneira expandida, escrevemos:

$$
\begin{aligned}
\vec{\nabla} \times \vec{V} &= \frac{1}{h_2 h_3}\left(\frac{\partial(h_3V_3)}{\partial q_2} - \frac{\partial(h_2V_2)}{\partial q_3}\right)\vec{e}_1 + \frac{1}{h_3h_1}\left(\frac{\partial(h_1V_1)}{\partial q_3} - \frac{\partial(h_3V_3)}{\partial q_1}\right)\vec{e}_2 + \frac{1}{h_1h_2}\left(\frac{\partial(h_2V_2)}{\partial q_1} - \frac{\partial(h_1V_1)}{\partial q_2}\right)\vec{e}_3 \\
&= \frac{1}{h_1h_2h_3}\det\begin{bmatrix} h_1\vec{e}_1 & h_2\vec{e}_2 & h_3\vec{e}_3 \\ \dfrac{\partial}{\partial q_1} & \dfrac{\partial}{\partial q_2} & \dfrac{\partial}{\partial q_3} \\ h_1V_1 & h_2V_2 & h_3V_3 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

Questão 02: Obtenha o operador rotacional no sistema de coordenadas esféricas.

Para obtermos o operador no sistema de coordenadas esférico, vamos usar a relação entre as coordenadas cartesianas e esféricas:

$$
\begin{cases} x = r\sin(\theta)\cos(\phi) \\ y = r\cos(\theta)\sin(\phi) \\ z = r\cos(\theta) \end{cases}
$$

Pela definição

$$
\begin{aligned}
h_1 &= \left\|\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1}\right\| \\
h_2 &= \left\|\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2}\right\| \\
h_3 &= \left\|\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_3}\right\|
\end{aligned}
$$

E obtemos:

$$
h_r = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial r}\right)^2} = \sqrt{\sin^2(\theta)\cos^2(\phi) + \sin^2(\theta)\cos^2(\phi) + \cos(\theta)} = 1
$$

$$
h_\phi = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \phi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \phi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \phi}\right)^2} = \sqrt{r^2\sin^2(\theta)\sin^2(\phi) + r^2\sin^2(\theta)\cos^2(\phi)} = r\sin(\theta)
$$

$$
h_\theta = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \theta}\right)^2} = \sqrt{r^2\cos^2(\theta)\cos^2(\phi) + r^2\cos^2(\theta)\cos^2(\phi) + r^2\sin^2(\theta)} = r
$$

Substituindo esses valores na expressão

$$
\vec{\nabla} \times \vec{V} = \frac{1}{h_r h_\theta h_\phi}\det\begin{bmatrix} h_r\vec{e}_r & h_\theta\vec{e}_\theta & h_\phi\vec{e}_\phi \\ \dfrac{\partial}{\partial r} & \dfrac{\partial}{\partial \theta} & \dfrac{\partial}{\partial \phi} \\ h_rV_r & h_\theta V_\theta & h_\phi V_\phi \end{bmatrix} = \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\det\begin{bmatrix} \vec{e}_r & r\vec{e}_\theta & r\sin(\theta)\vec{e}_\phi \\ \dfrac{\partial}{\partial r} & \dfrac{\partial}{\partial \theta} & \dfrac{\partial}{\partial \phi} \\ V_r & rV_\theta & r\sin(\theta)V_\phi \end{bmatrix}
$$

$$
\Rightarrow \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\left(\frac{\partial(r\sin(\theta)V_\phi)}{\partial\theta} - \frac{\partial(rV_\theta)}{\partial\phi}\right)\vec{e}_r - \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\left(\frac{\partial(r\sin(\theta)V_\phi)}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial \phi}\right)r\vec{e}_\theta + \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\left(\frac{\partial(rV_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial\theta}\right)r\sin(\theta)\vec{e}_\phi
$$

$$
\Rightarrow \boxed{\frac{1}{r\sin(\theta)}\left(\frac{\partial(\sin\theta)V_\phi}{\partial\theta} - \frac{\partial V_\theta}{\partial\phi}\right)\vec{e}_r + \frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial V_r}{\partial\phi} - \frac{\partial(rV_\phi)}{\partial r}\right)\vec{e}_\theta + \frac{1}{r}\left(\frac{\partial(rV_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial\theta}\right)\vec{e}_\phi}
$$

Questão 3: Considerando átomos hidrogenóides, obtenha $\langle 1/R^n \rangle$.

Precisamos calcular:

$$
\begin{aligned}
\left\langle \frac{1}{r^n} \right\rangle &= \int \psi^*_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi)\frac{1}{r^n}\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi)dV \\
&= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi)\frac{1}{r^n}\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi)r^2\sin(\theta)drd\theta d\phi \\
&= \int_0^\infty \underbrace{R^*_{n,l}(r)R_{n,l}(r)\frac{1}{r^n}}_{\text{parte radial}} r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \underbrace{\Upsilon^*_{l,m_l}(\theta,\phi)\Upsilon_{l,m_l}(\theta,\phi)}_{\text{parte angular}}\sin(\theta)d\theta d\phi
\end{aligned}
$$

Pela normalização dos harmônicos esféricos, devemos ter:

$$
\left\langle \frac{1}{r^n} \right\rangle = \int_0^\infty R^*_{n,l}(r)R_{n,l}(r)\frac{1}{r^n}r^2dr
$$

Substituindo o valor:

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!}} e^{-Zr/a_0 n} \left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)$$

na integral, temos:

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{1}{r^n} \right\rangle &= \int_0^\infty r^{-n} \left[\underbrace{\sqrt{\left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!}}}_{\text{não depende de r (constante)}} e^{-Zr/a_0 n} \left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right) \right]^2 r^2 dr \\
&= \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!} \int_0^\infty \left(e^{-Zr/a_0 n} \left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right) \right)^2 \frac{r^2}{r^n} dr
\end{aligned}$$

Para resolvermos a integral, podemos fazer a substituição $\rho = \dfrac{2Zr}{a_0 n}$:

$$\begin{aligned}
\rho = \frac{2Zr}{a_0 n} &\Rightarrow r = \frac{a_0 n}{2Z}\rho \\
dr &= \frac{a_0 n}{2Z} d\rho
\end{aligned}$$

Substituindo na integral:

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{1}{r^n} \right\rangle &= \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!} \int_0^\infty \left(e^{-Zr/a_0 n} \left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right) \right)^2 \frac{r^2}{r^n} dr \\
&= \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!} \int_0^\infty e^{-2Zr/a_0 n} \left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)^{2l} \left(L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right) \right)^2 \frac{r^2}{r^n} dr \\
&= \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!} \int_0^\infty e^{-\rho} \left(\rho\right)^{2l} \left(L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\rho\right) \right)^2 \left(\frac{a_0 n}{2Z}\rho\right)^{2-n} \left(\frac{a_0 n}{2Z}\right) d\rho \\
&= \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!} \left(\frac{a_0 n}{2Z}\right)^{3-n} \int_0^\infty e^{-\rho} \left(\rho\right)^{2l} \left(L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\rho\right) \right)^2 \left(\rho\right)^{2-n} d\rho \\
&= \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^n \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!} \underbrace{\int_0^\infty e^{-\rho} \left(\rho\right)^{2l+2-n} \left(L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\rho\right) \right)^2 d\rho}_{=I}
\end{aligned}$$

Os Polinômios de Laguerre generalizados $L_m^{(\alpha)}(\rho)$ podem ser dados pela fórmula (https://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/arquivos/nc-cap16.pdf, pg. 924):

$$L_n^{(m)}(x) = \frac{d^m}{dx^m} L_n(x) = \frac{d^m}{dx^m}\left(e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \right) = (-1)^m \sum_{k=0}^{n-m} (-1)^k \frac{n!}{k!} \binom{n}{m+k} x^k$$

Para $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$, escrevemos:

$$\begin{aligned}
L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) &= (-1)^{2l+1} \sum_{k=0}^{n-3l-2} (-1)^k \frac{(n-l-1)!}{k!} \binom{n-l-1}{2l+1+k} \rho^k \\
&= -\sum_{k=0}^{n-3l-2} (-1)^k \frac{(n-l-1)!}{k!} \binom{n-l-1}{2l+1+k} \rho^k
\end{aligned}$$

Além disso,

$$\begin{aligned}
(L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho))^2 &= \sum_{k=0}^{n-3l-2} (-1)^k \frac{(n-l-1)!}{k!} \binom{n-l-1}{2l+1+k} \rho^k \cdot \sum_{j=0}^{n-3l-2} (-1)^j \frac{(n-l-1)!}{j!} \binom{n-l-1}{2l+1+j} \rho^j \\
&= \sum_{k=0}^{n-3l-2} \sum_{j=0}^{n-3l-2} (-1)^{k+j} \frac{(n-l-1)!^2}{k!j!} \binom{n-l-1}{2l+1+k} \binom{n-l-1}{2l+1+j} \rho^{k+j}
\end{aligned}$$

Substituindo na integral, temos

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\left(\rho\right)^{2l+2-n}\left(L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\rho\right)\right)^2 d\rho = \sum_{k=0}^{n-3l-2}\sum_{j=0}^{n-3l-2}(-1)^{k+j}\frac{(n-l-1)!^2}{k!j!}\binom{n-l-1}{2l+1+k}\binom{n-l-1}{2l+1+j}\underbrace{\int_0^\infty e^{-\rho}(\rho)^{2l+2-n+k+j}d\rho}_{=\Gamma(2l+3-n+k+j)}$$

$$= \sum_{k=0}^{n-3l-2}\sum_{j=0}^{n-3l-2}(-1)^{k+j}\frac{(n-l-1)!^2}{k!j!}\binom{n-l-1}{2l+1+k}\binom{n-l-1}{2l+1+j}\Gamma(2l+3-n+k+j)$$

Finalmente, chegamos no resultado:

$$\boxed{\left\langle\frac{1}{r^n}\right\rangle = \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^n \frac{(n-l-1)!^3}{(2n)(n+l)!}\sum_{k=0}^{n-3l-2}\sum_{j=0}^{n-3l-2}(-1)^{k+j}\binom{n-l-1}{2l+1+k}\binom{n-l-1}{2l+1+j}\frac{\Gamma(2l+3-n+k+j)}{k!j!}}$$

IDEIA PARA SIMPLIFICAÇÃO:

Seja $\gamma = n-3l-2$ e $\beta = 2l+1$ Assim, podemos escrever

$$\binom{n-l-1}{2l+1+k}\binom{n-l-1}{2l+1+j} = \binom{\gamma+\beta}{\beta+k}\binom{\gamma+\beta}{\beta+j}$$

Aqui, podemos usar a identidade:

$$\binom{\gamma+\beta}{\beta+k}\binom{\gamma+\beta}{\beta+j} = \binom{\gamma+\beta}{\beta}\binom{\gamma}{k}\binom{\gamma}{j} = \binom{n-l-1}{2l+1}\binom{n-3l-2}{k}\binom{n-3l-2}{j}$$