

Harmônicos Esféricos

Física Matemática
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão
Pernambucano (IF Sertão)
9 pag.

Harmônicos esféricos

João Vitor Bulhões da Silva

2019

Na área exata, os harmônicos esféricos são funções harmônicas que representam a variação espacial de um conjunto ortogonal de soluções da equação de Laplace, quando a solução é expressa em coordenadas esféricas.

Harmônicos esféricos são muito importantes em várias aplicações teóricas e práticas, particularmente em Física atômica (uma vez que a função de onda do elétron contém harmônicos esféricos) e na teoria do potencial, tanto no campo gravitacional como na eletrostática.

A equação de Laplace ou, de forma mais familiar, o laplaciano, em coordenadas cartesianas, tem o seguinte formato:

$$\nabla^2 f = \frac{\partial f^2}{\partial x^2} + \frac{\partial f^2}{\partial y^2} + \frac{\partial f^2}{\partial z^2} \tag{1}$$

Sabendo que $f = f(r, \theta, \phi)$, podemos escrever o laplaciano em coordenadas esféricas.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x}$$
 (2)

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y}$$
 (3)

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial z} \tag{4}$$

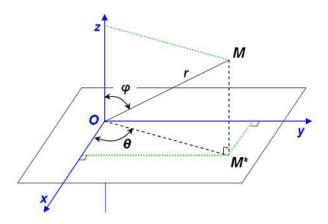


Figura 1: Sistema esférico de coordenadas

Teremos que as coordenadas do ponto M será:

$$x = rsin(\theta)cos(\phi) \tag{5}$$

$$y = rsin(\theta)sin(\phi) \tag{6}$$

$$z = rcos(\theta) \tag{7}$$

É fácil perceber que,

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{8}$$

E que,

$$\cos(\theta) = \frac{z}{r} \to \theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\right) \tag{9}$$

$$tan\phi = \frac{y}{x} \to \phi = tan^{-1} \left(\frac{y}{x}\right) \tag{10}$$

Dado r, θ e ϕ podemos mostrar as seguintes derivadas:

Substituindo as derivadas anteriores nas equações (2), (3) e (4), obteremos:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \sin(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin(\phi)}{\sin(\theta)}\frac{\partial f}{\partial \phi}$$
(11)

Podemos, então, dizer, a partir da eq. (11), que o operador que age sobre f é,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin(\phi)}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi}$$
(12)

No cálculo diferencial, uma derivada parcial de segunda ordem pode ser interpretada da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x}$$

Por seguinte, a eq. (12) terá a decorrente aparência:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left[\sin(\theta)\cos(\phi) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos(\theta)\cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin(\phi)}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]^2$$
(13)

Logo,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = sin^2(\theta)cos^2(\phi) - \frac{1}{r^2}sin(\theta)cos(\theta)cos^2(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r}sin(\theta)cos(\theta)cos^2(\phi)\frac{\partial^2}{\partial r\partial \theta} + \frac{1}{r}sin(\theta)cos(\theta)c$$

$$\frac{1}{r^2}cos(\phi)sin(\phi\frac{\partial}{\partial\phi}) - \frac{1}{r}cos(\phi)sin(\phi)\frac{\partial^2}{\partial r\partial\phi} + \frac{1}{r}cos^2(\theta)cos^2(\phi)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}sin(\theta)cos(\theta)cos^2(\phi)\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial r} + \frac{1}{r}sin(\theta)cos(\theta)cos^2(\phi)\frac{\partial^2}{\partial\theta} + \frac{1}{r}sin(\theta)cos($$

$$-\frac{1}{r^2}cos(\theta)sin(\theta)cos^2(\phi)+\frac{1}{r^2}cos^2(\theta)cos^2(\phi)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos^2(\theta)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)sin(\phi)}{sin^2(\phi)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)}{sin^2(\phi)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)cos(\phi)}{sin^2(\phi)}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{r^2}\frac{cos(\phi)cos(\phi$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\cos(\theta)\cos(\phi)sin(\phi)}{\sin(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} + \frac{1}{r}sin^2(\phi)\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}sin(\phi)cos(\theta)\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{sin^2(\phi)cos(\theta)}{sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$-\frac{1}{r^2}\frac{sin(\phi)cos(\theta)cos(\phi)}{sin(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} + \frac{1}{r^2}\frac{sin(\phi)cos(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{1}{r^2}\frac{sin^2(\phi)}{sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

O mesmo procedimento realizado para $\frac{\partial f}{\partial x}$ também deve ser feito em $\frac{\partial f}{\partial y}$ e $\frac{\partial f}{\partial z}$. Ao termino, devemos substituir tais expressões na eq. (1), que nos possibilita a escrever o laplaciano da seguinte forma:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos(\theta)}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$
(14)

Que também pode ser escrito como:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$
 (15)

Portanto, o laplaciano em cooordenadas esféricas da função $f = f(r, \theta, \phi)$ será

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(sin(\theta) \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} = 0 \tag{16}$$

Usando o método de soluções separáveis para resolver a equação eq. (16), obtemos que

$$f(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) \tag{17}$$

Em que R(r) é chamada de equação de onda radial e $Y(\theta, \phi)$ é a equação de onda angular.

Substituindo a eq. (17) na eq. (16), iremos obter:

$$\frac{1}{r^2}Y(\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{R(r)}{r^2sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sin(\theta)\frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial \theta}\right) + \frac{R(r)}{r^2sin^2(\theta)}\frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial \phi^2} = 0 \tag{18}$$

Ao multiplicar ambos os lados da eq. (18) por $\frac{r^2}{R(r)Y(\theta,\phi)}$, teremos que

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{1}{Y(\theta,\phi)sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sin(\theta)\frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{Y(\theta,\phi)sin^2(\theta)}\frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial \phi^2} = 0 \tag{19}$$

Podemos destacar da eq. (19) que, uma parte só depende da coordenada radial e a outra de coordenadas angulares. Vamos considerar também que esta mesma equação aceita a seguinte solução:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) = l(l+1)$$

е

$$\frac{1}{Y(\theta,\phi)} \left[\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial \phi^2} \right] = -l(l+1)$$

Pois,

$$l(l+1) - l(l+1) = 0$$

Nos interessa, inicialmente, trabalhar somente com a equação de onda angular. Desta forma, teremos que

$$\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + l(l+1)Y(\theta, \phi) = 0 \tag{20}$$

Se, por sua vez, utiliza-se o método de separação de variáveis para esta equação, podese ver que a equação acima admite soluções periódicas nas duas coordenadas angulares (l é um inteiro). Logo, a solução periódica do sistema anterior depende de dois inteiros (l, m) e é dada em termos de funções trigonométricas e dos polinômios associados de Legendre:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{21}$$

Substituindo (21) em (20), obtemos

$$\frac{1}{\sin(\theta)}\Phi(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\Theta(\theta)\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} + l(l+1)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = 0$$
 (22)

Multiplicando ambos os lados da eq. (22) por $\frac{\sin^2(\theta)}{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}$, teremos

$$\frac{\sin(\theta)}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} + l(l+1)\sin^2(\theta) = 0$$
 (23)

É possivel perceber que, na soma, um termo que depende somente de θ e outro somente de ϕ . Teremos então que

$$\frac{\sin(\theta)}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + l(l+1)\sin^2(\theta) = m^2 (equação \ polar)$$
 (24)

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} = -m^2 (equação \ azimutal)$$
 (25)

De forma rápida, é possivel notar que a solução da eq. (25) é

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}$$
.

Sabendo que

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi).$$

Logo, podemos provar que

$$e^{im\phi} = e^{im\phi} \cdot e^{im2\pi}$$

$$e^{im2\pi} = 1, m \in \mathbb{Z} = \{\pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots\}$$

Agora, multiplicamos a equação polar por $\Theta(\theta)$ e iremos obter:

$$sin(\theta)\frac{\partial}{\partial \theta} \left(sin(\theta) \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \left[l(l+1)sin^2(\theta) - m^2 \right] \Theta(\theta) = 0$$
 (26)

A solução da equação eq. (26) não é tão simples. A solução é

$$\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos\theta) \tag{27}$$

em que ${\cal P}_l^m$ é a função associada de Legendre, definida por

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|} P_l(x)$$
 (28)

e $P_l(x)$ é o l-ésimo polinômio de Legendre, definido pela fórmula de Rodrigues:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|} (x^2 - 1)^l$$
 (29)

Para que a fórmula de Rodrigues seja válida, é necessário que l seja um número inteiro positivo, ou seja, $l \in \mathbb{N}$ e $|m| \leq l$. Em que l é chamado de número quântico azimutal e m de número quântico magnético.

Finalmente, poderemos mostrar que

$$Y_l^m(\theta,\phi) = Ae^{im\phi}P_l^m(\cos\theta) \tag{30}$$

Em que Y_l^m é chamada de função harmónica esférica de grau l e ordem m. A é uma constante de normalização, θ e ϕ representam os parâmetros angulares (respectivamente, o ângulo azimutal ou colatitude e o ângulo polar ou longitude).

O elemento de volume em coordenadas esféricas é

$$d^3r = r^2 sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

então, a condição de normalização se torna

$$\int |f|^2 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi = \int |R(r)|^2 r^2 dr \int |Y(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi = 1$$

.

É conveniente que R e Y sejam normalizados separadamente:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

e

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} |Y(\theta,\phi)|^{2} sin(\theta) d\theta d\phi = 1$$

Logo, a função de onda angular normalizada terá a seguinte aparência:

$$Y_{l}^{m}(\theta,\phi) = \in \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_{l}^{m}(\cos\theta), \tag{31}$$

em que $\in = (-1)^m$ para $m \ge e \in = 1$ para $m \le 0$. Como provaremos mais adiante, elas são automaticamente ortogonais, portanto

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_l^m(\theta,\phi)| * |Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)| sin(\theta) d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

$$\begin{split} Y_0^0 &= \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} & \qquad \qquad Y_2^{\pm 2} &= \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sec^2\theta e^{\pm 2i\phi} \\ Y_1^0 &= \left(\frac{3}{4p}\right)^{1/2} \cos\theta & \qquad \qquad Y_3^0 &= \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta) \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi} & \qquad Y_3^{\pm 1} &= \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin\theta (5\cos^2\theta - 1) e^{\pm i\phi} \\ Y_2^0 &= \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1) & \qquad Y_3^{\pm 2} &= \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos\theta e^{\pm 2i\phi} \\ Y_2^{\pm 1} &= \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi} & \qquad Y_3^{\pm 3} &= \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\theta e^{\pm 3i\phi} \end{split}$$

Figura 2: Os primeiros harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta,\phi)$

A equação de onda radial, da solução da equação de Schroedinger independente do tempo, em coordenadas esféricas, é dada por:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar}\left[V(r) - E\right]R(r) = l(l+1)R(r) \tag{32}$$

Essa equação ficará mais simples se mudarmos as variáveis: seja

$$u(r) = rR(r)$$
tal que, $R = u/r$, $dr = [r(du/dr) - u]/r^2$, $(d/dr)[r^2(dR/dr)] = rd^2u/dr^2$, e, portanto,
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu. \tag{33}$$

Essa equação é chamada de redial, ela é idêntica em forma à equação de Schroedinger unidimensional, mas a aenergia potencial efetiva,

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

possui uma peça extra, o chamado termo centrifugo, $\hbar^2/2m[l(l+1)/r^2]$. Ele tende a jogar a partícula para fora (para longe da origem), assim como a (pseudo) força centrifuga o faz na mecânica clássica. Enquanto isso, a condição de normalização se transforma em

$$\int_0^\infty |u|^2 dr = 1$$

Aplicação: Poço esférico infinito

Aqui iremos deduzir a equação de onda radial e mostrar uma aplicação dos harmônicos esféricos.

$$V(r) = 0 \longrightarrow r < a, \infty \longrightarrow r > a$$

para r < a

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

Logo,

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

Considerando que $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e que l = 0, teremos

$$\frac{d^2u}{dr^2} = -k^2u\tag{34}$$

O que nos possibilita dizer que a solução da eq. (34) é

$$u(r) = Asin(kr) + bcos(kr).$$

Como mostrado anteriormente R(r) = u(r)/r, sendo assim

$$R(r) = \frac{Asin(kr)}{r} + \frac{bcos(kr)}{r}$$

Ao fazermos $r \to 0$, teremos que a única solução, para l = 0, é

$$R(r) = \frac{Asin(kr)}{r}. (35)$$

Pela condição de contorno:

$$R(a) = \frac{Asin(ka)}{a} = 0.$$

Portanto,

$$ka = n\pi, n \in \mathbb{N} \to k = \frac{n\pi}{a}$$

logo,

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n\pi,$$

colocando E em evidencia, teremos

$$E_{n,l=0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

Normalizando u(x), teremos

$$\int_0^a |u(x)|^2 dr = \int_0^a |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\int_0^a A^2 \sin^2(kr) dr = \frac{A^2}{2} \int_0^a dr - \frac{A^2}{2} \int_0^a \cos(2kr) dr = 1,$$

por fim, teremos que

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. (36)$$

Substituindo a eq. (35) na eq. (35), obtemos:

$$R(r)_{n,0} = \sqrt{\frac{2}{a}} sin(\frac{n\pi}{a}r). \tag{37}$$

Se usarmos o harmônico esférico $Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, obtemos que a equação de onda terá a seguinta forma:

$$\Psi_{n,0,0}(r,\theta,\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{\sin(\frac{n\pi}{2}r)}{r}.$$

A solução geral para qualquer l é a seguinte:

$$u(r) = Arj_l(kr) + Brn_l(kr),$$

em que $j_l(kr)$ é a função de Bessel esférica e $n_l(kr)$ é a função de Newman esférica, e elas são expressas repectivamente como

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin(x)}{x}$$

$$n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos(x)}{x}.$$

Logo, para $r \to 0$, teremos que a solução geral será

$$R(r) = Aj_l(kr)$$

Condições de contorno: $R(a) = 0 \rightarrow j_l(ka) = 0$.

Para encontrar k, precisamos encontrar os pontos em que a função de Bessel é igual a 0. E esse pontos são dados por $B_n l$, que é o n-ésimo zero da função de Bessel de ordem l.

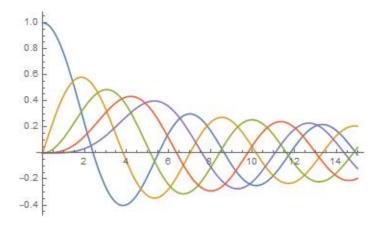


Figura 3: Plote da função de Bessel de ordem 0 a 4.

Portanto,

$$k = \frac{B_{nl}}{a}$$
.

Logo, as energias permitidas são:

$$k^{2} = 2mE/\hbar^{2} = \frac{B_{nl}^{2}}{a^{2}}$$

 $E_{nl} = \frac{\hbar^{2}}{2ma^{2}}B_{nl}^{2}.$

Então, a função radial

$$R_{nl}(r) = A_{nl}j_l(kr) = A_{nl}j_l(\frac{B_{nl}}{a}r).$$
(38)

Por fim, com as eqs. (31) e (38), temos a que a função de onda é igual a

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\theta,\phi)$$

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = A_{nl}j_l(\frac{B_{nl}}{a}r) \in \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$$
 (39)

Os estados estacionários tem 3 números quanticos, que são $n,\ m$ e l, e a energia depende apenas de n e l.

Referências

D. Griffiths, "Introduction to Quantum Mechanics", 2 ed., Pretince-Hall, 2005.