complemento // Apêndice

Vimos que a equação de Schröedinge é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2[\psi] + V(r)\psi = E\psi$$

sendo que para coordenadas esféricas $\nabla^2$ é dado por.

$$\nabla^2 = \overbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}^{\text{termo em } r} + \overbrace{\frac{1}{r^2 sen^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}^{\text{termo em } \varphi} + \overbrace{\frac{1}{r^2 sen(\theta)}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right)}^{\text{termo em } \theta}$$

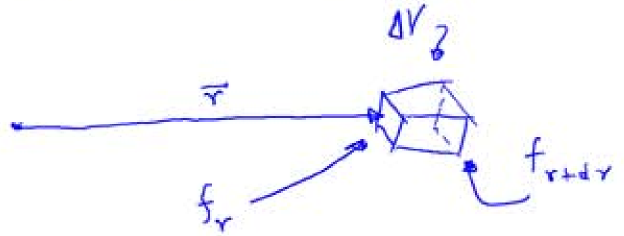
Pergunta. • Como obter esta expressão?
• Afinal, o que significa $\nabla^2$?
Derivada ou fluxo? afinal $\nabla^2 = \nabla\cdot\nabla$
↳ divergente do gradiente.

Vamos utilizar, com fins didáticos, uma análise sobre o termo em $r$ de $\nabla^2$.

$\nabla\psi_r = Grad(\psi)_r \Rightarrow$ taxa de variação na direção $r$.

$\nabla\cdot f(r)_{\hat{r}} =$ Contribuição na direção $\hat{r}$ para o fluxo vetorial em um volume infimitesimal.

Considerando apenas a direção $r$, seria algo do tipo:




então a contribuição para o fluxo em $dV$ só é nulo se $f_{r+dr} = f_r \rightarrow f_r =$ constante.

Para $f_r$ qualquer $\Rightarrow \nabla\cdot f_r$ (apenas o termo em $r$) é o fluxo por unidade de volume $dV$

$$\Rightarrow \nabla\cdot f_r = \lim_{\Delta V\to 0}\left[\frac{f_{r+dr}\cdot dS_{r+dr} - f_r\cdot dS_r}{\Delta V}\right] \searrow$$

$$\nabla\cdot f_r = \lim_{\Delta V\to 0}\left[\frac{f_{r+dr}\cdot dS_{r+dr} - f_r\cdot dS_r}{\Delta V}\right]$$

$$\nabla\cdot f_r = \frac{f_{r+dr}\cdot dS_{r+dr} - f_r dS_r}{dV}$$

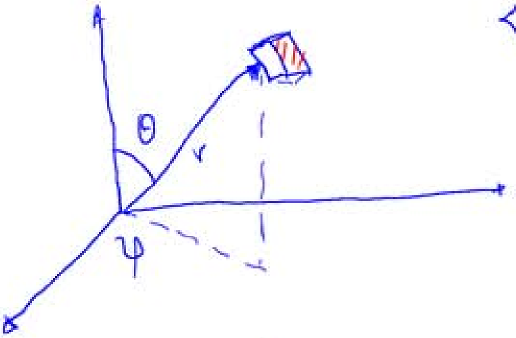
$$\Rightarrow \nabla\cdot f_r = \frac{f_{r+dr}\cdot dS_{r+dr} - f_r dS_r}{dV}\cdot\frac{dr}{dr} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial r}\left[f_r\, dS_r\right]$$

$$\Rightarrow \nabla\cdot f_r = \frac{1}{dV}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left[f_r\, dS_r\right]\cdot dr$$

Só precisamos calcular $\underline{dV}$ e $\underline{dS_r}$.

$$\longrightarrow dS_r = r\,d\theta\cdot r\,sen(\theta)\,d\varphi$$

$$\longrightarrow dV = r\,d\theta\, r\,sen(\theta)\,d\varphi\, dr$$




$$\Rightarrow \nabla\cdot f_r = \frac{1}{r^2 \cancel{sen(\theta)}\,\cancel{d\theta\, d\varphi\, dr}}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left[f_r\cdot r^2 \cancel{sen(\theta)}\,\cancel{d\theta\, d\varphi}\right]\cdot\cancel{dr}$$

$$\nabla\cdot f_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 f_r\right)$$

Para o caso particular do $\nabla^2 = \nabla\cdot\nabla\psi$, façamos $f_r = \nabla\psi_r$

$$\Rightarrow f_r = \frac{\partial}{\partial r}(\psi)$$

$$\Rightarrow \boxed{\nabla\cdot f_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi(r,\theta,\varphi)\right)}$$

<u>Obs</u>: fizemos apenas para o termo em <u>r</u>. Para os demais termos o procedimento é análogo//
Faremos isso depois

Aplicando para a Equação de Schröedinger como exemplo.

⇒ O primeiro termo é $\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)$

Apresentando apenas o $\underbrace{\text{termo radial}}$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\cdot\nabla\psi(r,\theta,\varphi)\right]$$

→ termo radial ≠ componente vetorial

⇒ afinal divergência é sinônimo de fluxo que é um escalar.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi(r,\theta,\varphi)\right)+(\text{termo em }\theta)+(\text{termo em }\varphi)\right]$$

obter.