

## Polinômios de Laguerre e seus associados

Seguem alguns exercícios sobre a solução da equação radial para o átomo de hidrogênio segundo o método da equação de Schrödinger. Por favor, faça estes exercícios e aguarde, pois podem ser sorteados para entregar como parte da terceira avaliação. Um deles, a ser anunciado, deverá, com certeza, ser entregue como parte da lista da terceira avaliação.

### Exercício Laguerre 1

Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para um elétron, cuja carga elétrica é  $-e < 0$  e sua massa é  $\mu$ , sob a ação do potencial de Coulomb gerado por um próton fixo na origem do sistema de coordenadas. Despreze o spin eletrônico. Seu resultado será a equação de Schrödinger independente do tempo para o átomo de hidrogênio.

#### Resolução:

Seja  $\psi(r, \theta, \varphi)$  a função de onda do elétron. Então a equação de Schrödinger é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r, \theta, \varphi) - \frac{e^2}{r}\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi).$$

Note que estamos usando o sistema CGS de unidades e que a carga elétrica do próton deve ser igual e de sinal oposto à carga do elétron, isto é, o próton tem carga  $e > 0$ .

### Exercício Laguerre 2

Separe o operador laplaciano em uma parte radial e outra parte angular. Aí, aproveitando que o sistema tem simetria esférica, expanda  $\psi(r, \theta, \varphi)$  como uma superposição de funções harmônicas esféricas e escreva a equação radial que deverá ser satisfeita pelos coeficientes da expansão.

#### Resolução:

Como visto em aulas, temos:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}.$$

Um elétron sob o potencial eletrostático de Coulomb produzido por um próton na origem forma um sistema que tem simetria esférica. Logo, podemos expandir a solução procurada em funções harmônicas esféricas sem que estas fiquem misturadas na equação resultante. Assim,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} R_{\ell}^m(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi).$$

Aplicando o laplaciano a esta equação dá:

$$\begin{aligned} \nabla^2\psi(r, \theta, \varphi) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \nabla^2 [R_{\ell}^m(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)] \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[ \frac{Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{\ell}^m(r)}{dr} \right) - R_{\ell}^m(r) \frac{\mathbf{L}^2 Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)}{\hbar^2 r^2} \right]. \end{aligned}$$

Mas nós sabemos que

$$\mathbf{L}^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \varphi).$$

Com isso, podemos reescrever a ação do operador laplaciano acima assim:

$$\nabla^2 \psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_\ell^m(r)}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R_\ell^m(r) \right].$$

Então, finalmente, a equação de Schrödinger escreve-se:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - E \right] R_\ell^m(r) = 0.$$

Como dito acima, vemos aqui que, como o potencial de Coulomb tem simetria esférica, isto é, não depende nem de  $\theta$  nem de  $\varphi$ , segue que a equação obtida não acopla uma função harmônica esférica com outra. Sendo assim, pela ortonormalidade dessas funções harmônicas esféricas, segue a hierarquia de equações:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_\ell^m(r)}{dr} \right) + \left[ \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - E \right] R_\ell^m(r) = 0$$

ou ainda,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_\ell^m(r)}{dr} \right) + \left[ \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] R_\ell^m(r) = 0.$$

### Exercício Laguerre 3

Use o modelo do átomo de Bohr para calcular o raio de Bohr,  $a_0$ , isto é, o raio da órbita cuja circunferência é exatamente igual ao comprimento de de Broglie para o módulo do momentum linear do elétron na órbita do estado fundamental do átomo de Bohr. Uma vez encontrado  $a_0$ , faça uma mudança de unidades de distância de forma que cada unidade de distância  $x$  passa a representar quantos raios de Bohr são compreendidos em cada valor de  $r$ , ou seja, faça a substituição de variável  $r = xa_0$  na equação radial encontrada no exercício anterior.

#### Resolução:

Vamos mudar a unidade de distância e usar raios de Bohr. Como todo mundo sabe, o raio de Bohr é aquele que se obtém no estado fundamental do átomo de Bohr. A ideia é usar a relação de de Broglie junto com a aceleração centrípeta para o átomo circular do Bohr. Então, temos, em uma órbita circular de Bohr, com raio  $a_0$ , o comprimento de onda de de Broglie dá uma volta em torno da órbita e, portanto,

$$\lambda = 2\pi a_0 \tag{1}$$

e a força de Coulomb é equilibrada pela força centrípeta:

$$\mu \frac{v^2}{a_0} = \frac{e^2}{a_0^2},$$

isto é,

$$\mu v^2 = \frac{e^2}{a_0}. \quad (2)$$

Falta só conectar a onda à partícula, isto é, usar a relação de de Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (3)$$

Da Eq. (1) segue que

$$a_0 = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{h}{2\pi p} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\mu v}, \quad (4)$$

onde usamos a Eq. (3) e as relações  $\hbar = h/2\pi$  e  $p = \mu v$ . A Eq. (2) dá

$$\mu^2 v^2 = \frac{\mu e^2}{a_0}. \quad (5)$$

Das Eqs. (4) e (5) podemos escrever que

$$a_0^2 = \frac{\hbar^2 a_0}{\mu e^2}$$

e, portanto,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}.$$

Seja, portanto,

$$x \equiv \frac{r}{a_0}.$$

Com esta definição de  $x$ , a equação radial acima fica:

$$\frac{1}{a_0^2 x^2} \frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{dR_\ell^m(r)}{dx} \right) + \left[ \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 x a_0} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2 a_0^2} \right] R_\ell^m(r) = 0,$$

ou seja,

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{dR_\ell^m(r)}{dx} \right) + \left[ \frac{2\mu a_0^2 E}{\hbar^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] R_\ell^m(r) = 0.$$

Veja que

$$\frac{2\mu a_0^2}{\hbar^2} = \frac{2\mu e^2 a_0^2}{e^2 \hbar^2} = \frac{2a_0}{e^2}$$

e, com isso,

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left( x^2 \frac{dR_\ell^m(r)}{dx} \right) + \left[ \frac{2a_0 E}{e^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] R_\ell^m(r) = 0.$$

## Exercício Laguerre 4

Substitua a função  $R_\ell^m(r)$  na equação radial do exercício anterior usando  $R_\ell^m(r) = u_\ell^m(x)/x$  e encontre a equação para  $u_\ell^m(x)$ . Isto é o que também fazemos se o caso for o de uma partícula livre.

### Resolução:

Vamos definir:

$$u_\ell^m(x) \equiv xR_\ell^m(r)$$

e a equação radial agora fica:

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left[ x^2 \frac{d}{dx} \left( \frac{u_\ell^m(x)}{x} \right) \right] + \left[ \frac{2a_0 E}{e^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] \frac{u_\ell^m(x)}{x} = 0,$$

isto é,

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left[ x^2 \left( -\frac{u_\ell^m(x)}{x^2} + \frac{1}{x} \frac{du_\ell^m(x)}{dx} \right) \right] + \left[ \frac{2a_0 E}{e^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] u_\ell^m(x) = 0,$$

ou seja,

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left( -u_\ell^m(x) + x \frac{du_\ell^m(x)}{dx} \right) + \left[ \frac{2a_0 E}{e^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] u_\ell^m(x) = 0,$$

ou ainda,

$$\frac{d^2 u_\ell^m(x)}{dx^2} + \left[ \frac{2a_0 E}{e^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] u_\ell^m(x) = 0.$$

## Exercício Laguerre 5

Verifique que a solução regular na origem é a que vai a zero como  $x^{\ell+1}$ .

### Resolução:

Quando  $x \rightarrow 0$ , o termo proporcional a  $1/x^2$  é o dominante entre os colchetes e, portanto, nesse caso, a equação

$$\frac{d^2 u_\ell^m(x)}{dx^2} + \left[ \frac{2a_0 E}{e^2} + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] u_\ell^m(x) = 0$$

fica, aproximadamente,

$$\frac{d^2 u_\ell^m(x)}{dx^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} u_\ell^m(x) \rightarrow 0.$$

Vamos ver o que acontece se fizermos  $u_\ell^m(x) \sim x^s$  :

$$\frac{d^2 u_\ell^m(x)}{dx^2} \sim \frac{d^2 x^s}{dx^2} = s(s-1)x^{s-2}.$$

Então a equação acima dá:

$$s(s-1)x^{s-2} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}x^s \rightarrow 0,$$

isto é,

$$s(s-1) = \ell(\ell+1),$$

ou seja,

$$s = \ell + 1$$

ou

$$s = -\ell.$$

Como o segundo caso implica uma solução irregular na origem, nós vemos que a regular é da forma  $u_\ell^m(x) \rightarrow x^{\ell+1}$ , como pedido no enunciado.

### Exercício Laguerre 6

Quando  $x \rightarrow \infty$ , mostre que  $u_\ell^m(x)$  tende a uma função exponencial para  $E < 0$ , já que estamos interessados nos estados em que o elétron fica ligado ao átomo, em um estado não ionizado. Encontre essa dependência exponencial, isto é, encontre  $\alpha > 0$  tal que  $u_\ell^m(x) \rightarrow \exp(-\alpha x)$  quando  $x \rightarrow \infty$ . Veja que pode ter a solução com exponencial positiva também, mas aí nós a descartamos como não física, pois a probabilidade de encontrar o elétron deve ser finita, por hipótese.

#### Resolução:

Quando  $x \rightarrow \infty$ , segue que a equação para  $u_\ell^m(x)$  fica assim:

$$\frac{d^2 u_\ell^m(x)}{dx^2} + \frac{2a_0 E}{e^2} u_\ell^m(x) \rightarrow 0$$

e, portanto,

$$u_\ell^m(x) \rightarrow \exp(-\alpha x),$$

com

$$\alpha = \sqrt{-\frac{2a_0 E}{e^2}}.$$

### Exercício Laguerre 7

Mude mais uma vez de variável, agora escrevendo a equação diferencial para a função

$$v_\ell^m(x) \equiv \exp(\alpha x) u_\ell^m(x).$$

### Resolução:

Vamos calcular as derivadas:

$$\frac{du_\ell^m(x)}{dx} = -\alpha u_\ell^m(x) + \exp(-\alpha x) \frac{dv_\ell^m(x)}{dx}$$

e

$$\frac{d^2u_\ell^m(x)}{dx^2} = -\alpha \frac{du_\ell^m(x)}{dx} - \alpha \exp(-\alpha x) \frac{dv_\ell^m(x)}{dx} + \exp(-\alpha x) \frac{d^2v_\ell^m(x)}{dx^2},$$

isto é,

$$\frac{d^2u_\ell^m(x)}{dx^2} = \alpha^2 u_\ell^m(x) - 2\alpha \exp(-\alpha x) \frac{dv_\ell^m(x)}{dx} + \exp(-\alpha x) \frac{d^2v_\ell^m(x)}{dx^2},$$

ou seja,

$$\exp(\alpha x) \frac{d^2u_\ell^m(x)}{dx^2} = \alpha^2 v_\ell^m(x) - 2\alpha \frac{dv_\ell^m(x)}{dx} + \frac{d^2v_\ell^m(x)}{dx^2},$$

Note que a equação radial que temos para  $u_\ell^m(x)$  também pode ser escrita assim:

$$\exp(\alpha x) \frac{d^2u_\ell^m(x)}{dx^2} + \left[ -\alpha^2 + \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell^m(x) = 0,$$

onde usamos que

$$\alpha = \sqrt{-\frac{2a_0E}{e^2}}.$$

Então, com nossos cálculos das derivadas que fizemos acima, segue que a equação para  $v_\ell^m(x)$  fica:

$$-2\alpha \frac{dv_\ell^m(x)}{dx} + \frac{d^2v_\ell^m(x)}{dx^2} + \frac{2}{x} v_\ell^m(x) - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} v_\ell^m(x) = 0,$$

isto é,

$$\frac{d^2v_\ell^m(x)}{dx^2} - 2\alpha \frac{dv_\ell^m(x)}{dx} + \left[ \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell^m(x) = 0.$$

### Exercício Laguerre 8

Agora que já sabemos que a solução próxima à origem é da forma  $x^{\ell+1}$ , proponha um ansatz para a solução da equação para  $v_\ell^m(x)$  em forma de série assim:

$$v_\ell^m(x) = x^{\ell+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$$

e encontre a fórmula de recorrência para os coeficientes  $c_k$ .

**Resolução:**

Temos as derivadas:

$$\frac{dv_\ell^m(x)}{dx} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (k + \ell + 1) x^{k+\ell}$$

e

$$\frac{d^2 v_\ell^m(x)}{dx^2} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (k + \ell + 1) (k + \ell) x^{k+\ell-1}.$$

Assim, a equação para  $v_\ell^m(x)$  fica:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k [(k + \ell + 1) (k + \ell) - \ell (\ell + 1)] x^{k+\ell-1} - 2\alpha \sum_{k=0}^{\infty} c_k \left( k + \ell + 1 - \frac{1}{\alpha} \right) x^{k+\ell} = 0.$$

Com isso temos que ter

$$c_0 [(\ell + 1) \ell - \ell (\ell + 1)] = 0$$

e que, portanto, dá  $c_0 \neq 0$  como uma possível solução. Aí ficamos com

$$c_{k+1} [(k + \ell + 2) (k + \ell + 1) - \ell (\ell + 1)] = 2\alpha c_k \left( k + \ell + 1 - \frac{1}{\alpha} \right),$$

isto é,

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{2(\alpha k + \alpha \ell + \alpha - 1)}{(k + \ell + 2) (k + \ell + 1) - \ell (\ell + 1)}.$$

**Exercício Laguerre 9**

Verifique que a série encontrada diverge a menos que  $\alpha$  seja  $\alpha = 1/(p + \ell + 1)$  para algum número inteiro  $p \geq 0$ .

**Resolução:**

Se olharmos o quociente  $c_{k+1}/c_k$  quando  $k$  é muito grande, teremos:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} \sim \frac{2\alpha}{k}.$$

Este é o comportamento de uma exponencial do tipo  $\exp(2\alpha x)$ , pois, nesse caso,

$$\exp(2\alpha x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k,$$

com

$$c_k = \frac{(2\alpha)^k}{k!}$$

e, portanto,

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{(2\alpha)^{k+1} k!}{(k+1)! (2\alpha)^k} = \frac{2\alpha}{k+1} \sim \frac{2\alpha}{k}$$

para  $k$  muito grande. Então, como vemos que a série diverge, é melhor escolhermos  $\alpha$  tal que quando  $k = p$  para algum  $p \geq 0$  inteiro a série se anule, isto é,

$$2(\alpha p + \alpha \ell + \alpha - 1) = 0,$$

ou seja,

$$\alpha = \frac{1}{p + \ell + 1},$$

como pedido no enunciado.

## Exercício Laguerre 10

Verifique a quantização da energia do átomo de hidrogênio fazendo  $n \equiv p + \ell + 1$ , com  $p = 0, 1, 2, \dots$  e note que, para um dado valor de  $n$ , os possíveis valores de  $\ell$  não podem ultrapassar  $n - 1$ .

### Resolução:

Fazendo  $n \equiv p + \ell + 1$ , vemos que, para um número fixo  $n$ , temos que  $\ell = n - 1 - p$ . Conforme vamos aumentando  $p$  a partir de  $p = 0$ ,  $\ell$  tem que diminuir. Como o menor valor de  $p$  é zero, concluímos que o maior valor de  $\ell$  só pode ser  $n - 1$ . Agora vejamos a relação:

$$\alpha = \frac{1}{n}.$$

Como já vimos no exercício 7, esta equação significa que

$$\sqrt{-\frac{2a_0 E}{e^2}} = \frac{1}{n},$$

isto é,

$$-\frac{2a_0 E}{e^2} = \frac{1}{n^2},$$

ou seja,

$$E = -\frac{e^2}{2a_0 n^2},$$

que são as energias discretas do átomo de hidrogênio. A unidade de energia medida em  $e^2/2a_0$  é chamada de rydberg e vale, aproximadamente, 13.6 eV, sendo, também, a energia de ionização do estado fundamental do átomo de hidrogênio.



## Exercício Laguerre 11

Verifique que a solução que temos para  $R_\ell^m(r)$  é, a menos de uma constante de proporcionalidade,

$$R_\ell(r) \propto \exp(-\alpha x) x^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2}{n}x\right).$$

onde  $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(x)$  são os polinômios associados de Laguerre.

### Resolução:

Primeiro vejamos como os livros-texto definem os polinômios associados de Laguerre. Na sexta edição do livro-texto de Arfken e Weber, na página 842, vemos a Eq. (13.77), que dá a equação para os polinômios associados de Laguerre. A equação é escrita como

$$x \frac{d^2 L_n^k(x)}{dx^2} + (k+1-x) \frac{dL_n^k(x)}{dx} + nL_n^k(x) = 0.$$

Por razões que vão ficar claras mais no final, vamos reescrever essa equação usando outro símbolo para a variável independente. Fazemos  $x \rightarrow y$  na equação acima e obtemos

$$y \frac{d^2 L_n^k(y)}{dy^2} + (k+1-y) \frac{dL_n^k(y)}{dy} + nL_n^k(y) = 0.$$

No Exercício 11 acima, queremos a equação para  $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)$ , que fazendo, na equação acima, as substituições  $k \rightarrow 2\ell+1$  e  $n \rightarrow n-\ell-1$ , obtemos

$$y \frac{d^2 L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)}{dy^2} + (2\ell+2-y) \frac{dL_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)}{dy} + (n-\ell-1)L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y) = 0.$$

No Exercício 7 acima, vimos que nossa equação diferencial ficou

$$\frac{d^2 v_\ell^m(x)}{dx^2} - 2\alpha \frac{dv_\ell^m(x)}{dx} + \left[ \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell^m(x) = 0.$$

Já no Exercício 9 acima, vimos que para a função de onda não divergir quando  $x \rightarrow \infty$ , devemos escolher  $\alpha$  tal que quando  $k = p$  para algum  $p \geq 0$  inteiro a série se anule, isto é,

$$2(\alpha p + \alpha \ell + \alpha - 1) = 0,$$

ou seja,

$$\alpha = \frac{1}{p + \ell + 1}.$$

Antes de mais nada, observemos que a equação radial não depende de  $m$  e que, portanto, estamos com um sobrescrito  $m$  espúrio em  $R_\ell^m(r)$  e também em  $v_\ell^m(x)$ . Sendo assim, vamos eliminar esse sobrescrito inútil e escrever a equação acima como

$$\frac{d^2 v_\ell(x)}{dx^2} - 2\alpha \frac{dv_\ell(x)}{dx} + \left[ \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell(x) = 0.$$

No Exercício 10 acima, escrevemos

$$\alpha = \frac{1}{n}$$

e, assim, como também temos

$$\alpha = \frac{1}{p + \ell + 1},$$

segue que

$$p = n - \ell - 1.$$

Nossa equação agora fica

$$\frac{d^2 v_\ell(x)}{dx^2} - \frac{2}{n} \frac{dv_\ell(x)}{dx} + \left[ \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell(x) = 0.$$

No Exercício 8 acima, usamos o ansatz

$$v_\ell(x) = x^{\ell+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k,$$

já eliminando  $m$ , e vimos que quando escolhemos

$$\alpha = \frac{1}{p + \ell + 1},$$

a série para e ficamos, portanto, com

$$v_\ell(x) = x^{\ell+1} \sum_{k=0}^p c_k x^k,$$

pois agora  $c_{k+1} = c_{p+1} = 0$ . Seja

$$w_p(x) \equiv \sum_{k=0}^p c_k x^k.$$

Com isso, escrevemos

$$v_\ell(x) = x^{\ell+1} w_\ell^p(x)$$

e agora a equação acima dá

$$\frac{d^2 x^{\ell+1} w_\ell^p(x)}{dx^2} - \frac{2}{n} \frac{dx^{\ell+1} w_\ell^p(x)}{dx} + \left[ \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] x^{\ell+1} w_\ell^p(x) = 0.$$

Mas,

$$\frac{dx^{\ell+1} w_\ell^p(x)}{dx} = (\ell+1) x^\ell w_\ell^p(x) + x^{\ell+1} \frac{dw_\ell^p(x)}{dx}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned}\frac{d^2 x^{\ell+1} w_\ell^p(x)}{dx^2} &= (\ell+1) \frac{dx^\ell w_\ell^p(x)}{dx} + \frac{d}{dx} \left[ x^{\ell+1} \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} \right] \\ &= (\ell+1) \ell x^{\ell-1} w_\ell^p(x) + 2(\ell+1) x^\ell \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} \\ &\quad + x^{\ell+1} \frac{d^2 w_\ell^p(x)}{dx^2}.\end{aligned}$$

Logo, a equação diferencial satisfeita por  $w_\ell^p(x)$  agora fica

$$\begin{aligned}(\ell+1) \ell x^{\ell-1} w_\ell^p(x) + 2(\ell+1) x^\ell \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + x^{\ell+1} \frac{d^2 w_\ell^p(x)}{dx^2} \\ - \frac{2}{n} \left[ (\ell+1) x^\ell w_\ell^p(x) + x^{\ell+1} \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} \right] + \left[ \frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] x^{\ell+1} w_\ell^p(x) = 0,\end{aligned}$$

isto é,

$$\begin{aligned}2(\ell+1) x^\ell \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + x^{\ell+1} \frac{d^2 w_\ell^p(x)}{dx^2} \\ - \frac{2}{n} (\ell+1) x^\ell w_\ell^p(x) - \frac{2}{n} x^{\ell+1} \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + 2x^\ell w_\ell^p(x) = 0,\end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}2(\ell+1) \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + x \frac{d^2 w_\ell^p(x)}{dx^2} \\ - \frac{2}{n} (\ell+1) w_\ell^p(x) - \frac{2}{n} x \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + 2w_\ell^p(x) = 0,\end{aligned}$$

ou ainda,

$$x \frac{d^2 w_\ell^p(x)}{dx^2} + \left[ 2(\ell+1) - \frac{2}{n} x \right] \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + \left[ 2 - \frac{2}{n} (\ell+1) \right] w_\ell^p(x) = 0.$$

Queremos fazer essa equação ficar, como vimos, a mesma que esta:

$$y \frac{d^2 L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)}{dy^2} + (2\ell+2-y) \frac{dL_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)}{dy} + (n-\ell-1) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y) = 0.$$

Não é possível fazer isso se insistirmos em manter a variável independente como sendo  $x$ . Temos que mudar a variável. O segundo termo, proporcional à primeira derivada, quando comparado com a equação para  $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)$  dá a dica de que devemos ter

$$y \equiv \frac{2}{n} x.$$

Logo,

$$\frac{n}{2} y \frac{d^2 w_\ell^p(x)}{dx^2} + [2(\ell+1) - y] \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} + \left[ 2 - \frac{2}{n} (\ell+1) \right] w_\ell^p(x) = 0.$$

Mas,

$$\begin{aligned}\frac{dw_\ell^p(x)}{dx} &= \frac{dy}{dx} \frac{dw_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy} \\ &= \frac{2}{n} \frac{dw_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy}\end{aligned}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned}\frac{d^2w_\ell^p(x)}{dx^2} &= \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} \left[ \frac{dw_\ell^p(x)}{dx} \right] \\ &= \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} \left[ \frac{2}{n} \frac{dw_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy} \right] \\ &= \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{d^2w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy^2}.\end{aligned}$$

Então,

$$\frac{n}{2}y \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{d^2w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy^2} + [2(\ell+1) - y] \frac{2}{n} \frac{dw_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy} + \left[2 - \frac{2}{n}(\ell+1)\right] w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right) = 0,$$

isto é,

$$\frac{2}{n}y \frac{d^2w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy^2} + [2(\ell+1) - y] \frac{2}{n} \frac{dw_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy} + \left[2 - \frac{2}{n}(\ell+1)\right] w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right) = 0,$$

ou seja,

$$y \frac{d^2w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy^2} + (2\ell+2-y) \frac{dw_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right)}{dy} + (n-\ell-1) w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right) = 0.$$

Comparando com

$$y \frac{d^2L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)}{dy^2} + (2\ell+2-y) \frac{dL_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y)}{dy} + (n-\ell-1) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y) = 0,$$

vemos que

$$w_\ell^p\left(\frac{n}{2}y\right) = L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(y).$$

Logo,

$$w_\ell^p(x) = L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2}{n}x\right).$$

Então,

$$\begin{aligned}v_\ell(x) &= x^{\ell+1} w_\ell^p(x) \\ &= x^{\ell+1} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2}{n}x\right).\end{aligned}$$

Do Exercício 7 acima vem que

$$v_\ell^m(x) \equiv \exp(\alpha x) u_\ell^m(x)$$

e, portanto,

$$u_\ell(x) = \exp(-\alpha x) x^{\ell+1} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left( \frac{2}{n} x \right),$$

já eliminando o sobrescrito espúrio  $m$ . Além disso, do Exercício 4 acima temos que

$$u_\ell^m(x) \equiv x R_\ell^m(r)$$

e, então,

$$R_\ell(r) = \exp(-\alpha x) x^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left( \frac{2}{n} x \right),$$

também já eliminando o sobrescrito espúrio  $m$ . Essa resposta deve ser ainda multiplicada por  $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  e normalizada, para termos as funções de onda do átomo de hidrogênio. Por causa disso, ao invés do sinal de igualdade, apenas dizemos que  $R_\ell(r)$  é proporcional ao que obtemos no membro direito acima. Então, escrevemos

$$R_\ell(r) \propto \exp(-\alpha x) x^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left( \frac{2}{n} x \right).$$

Notemos que nosso  $x$  é dado por

$$x \equiv \frac{r}{a_0},$$

com

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}.$$

do Exercício 3 acima. Do Exercício 10 acima,

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2},$$

já incluindo o subscrito  $n$ , de forma que também podemos escrever que

$$\begin{aligned} \frac{2}{n} x &= \frac{2r}{na_0} \\ &= r \sqrt{\frac{4}{n^2 a_0^2}} \\ &= r \sqrt{-\frac{8a_0 E}{a_0^2 e^2}} \\ &= r \sqrt{-\frac{8E_n}{a_0 e^2}} \\ &= r \sqrt{-\frac{8\mu e^2 E_n}{\hbar^2 e^2}} \\ &= r \sqrt{-\frac{8\mu E_n}{\hbar^2}} \\ &= \kappa r, \end{aligned}$$

onde definimos

$$\kappa \equiv \sqrt{-\frac{8\mu E_n}{\hbar^2}},$$

como no link [Laguerre polynomials and the hydrogen wave function](#), página 6.