8 - Equação de Schrödinger

Consideremos a representação de Schrödinger, para analisar a evolução temporal de um estado $|\psi(t)\rangle$; na representação da posição, esse estado pode ser descrito por uma função de onda

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$$

A Hamiltoniana do sistema é descrita como

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

Pela equação de Schrödinger:

$$\boxed{\mathcal{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle}$$

Na representação da posição:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x)\right]\psi(x,t)$$

Seja:

$$A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \; ; \text{ onde } [A,\mathcal{H}]=0$$

$$\langle x|a_i(t)\rangle = \langle x|a_i\rangle e^{-iE_i t/\hbar}$$

Substituindo na equação de Schrödinger:

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x)\right]\psi_i(x) = E_i\,\psi_i(x)}$$

Seja:

$$\rho_{(t)} = |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 = |\psi(x,t)|^2$$

A densidade de probabilidade:

$$\frac{d}{dt}\rho_{(t)} = \left[\psi(x,t)\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t) - \psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\right]$$

Pela equação de Schrödinger dependente do tempo em uma dimensão (para simplificar).

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x,t)\right]$$

Onde $U(x) \in \mathbb{R}$. Substituindo em $\rho(t)$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}\left[-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t) - \psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right)\right]$$

Nesso contexto

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x}J(x,t)}$$

Equação de continuidade

Onde:

$$\boxed{J(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t) - \psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right)}$$

Que pode ser interpretada como uma corrente de probabilidade. Generalizando para 3 dimensões:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho_{(t)} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}_{(\vec{r},t)} = 0}$$

$\vec{J}$ descreve o fluxo de probabilidade por unidade de tempo e por unidade de área.

Para potenciais reais a probabilidade se conserva! Como a massa na hidrodinâmica e a carga no Eletromagnetismo. A Probabilidade é Física!

Dessa maneira descrevemos a probabilidade como um fluído heterogêneo, e $J(x,t)$ é a taxa de fluxo desse fluido!

Suponhamos uma função de onde genérica no formato:

$$\psi(x,t) = R(x,t)\, e^{iS(x,t)/\hbar}$$

Dessa maneira:

$$|\psi_{(x,t)}|^2 = |R_{(x,t)}|^2 = \rho(x,t)$$

Substituindo na corrente de probabilidade:

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left\{ R^{*}_{(x,t)} e^{-iS(x,t)/\hbar} \frac{\partial}{\partial x}\left[R(x,t)\cdot e^{iS(x,t)/\hbar}\right] - R(x,t) e^{iS(x,t)/\hbar} \cdot \frac{\partial}{\partial x}\left[R^{*}_{(x,t)} e^{-iS(x,t)/\hbar}\right]\right\}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left\{ R^{*}_{(x,t)} e^{-iS(x,t)/\hbar}\left[R(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\left(e^{iS(x,t)/\hbar}\right) + e^{iS(x,t)/\hbar}\frac{\partial R(x,t)}{\partial x}\right] - R(x,t) e^{iS(x,t)/\hbar}\left[R^{*}_{(x,t)}\frac{\partial}{\partial x}\left(e^{-iS(x,t)/\hbar}\right) + e^{-iS(x,t)/\hbar}\frac{\partial R(x,t)}{\partial x}\right]\right\}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left[-\frac{2i}{\hbar}\left|R(x,t)\right|^{2}\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)\right]$$

$$= \left|R(x,t)\right|^{2}\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)$$

Generalizando para 3 dimensões:

$$\boxed{\vec{J} = \frac{\rho}{m}\vec{\nabla} S(\vec{r},t)}$$

Se considerarmos o exemplo de uma onda Plana

$$\Psi_{(x,t)} = C e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)} \Longrightarrow S_{(x,t)} = \vec{p}\cdot\vec{x} - Et$$

Nesse caso:

$$\vec{J} = \rho \frac{\vec{p}}{m} \Longrightarrow \boxed{\vec{J} = \rho\vec{v}}$$

Logo a velocidade da partícula pode ser vista como a velocidade de grupo de uma onda plana! Substituindo na equação da continuidade.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{v}) = 0$$

Equação de continuidade do fluido!

Se substituirmos nossa função de onda:

$$\Psi_{(x,t)} = R_{(x,t)}\, e^{iS_{(x,t)}/\hbar}$$

na equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_{(x,t)}}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_{(x)}\right]\Psi_{(x,t)}$$

Obtemos que:

$$i\hbar\, e^{iS(x,t)/\hbar}\left[\frac{\partial}{\partial t}R(x,t) + \frac{i}{\hbar}R(x,t)\frac{\partial S(x,t)}{\partial t}\right] = e^{iS(x,t)/\hbar}\,\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}R(x,t) + \right.$$

$$\left. + \frac{2i}{\hbar}\left(\frac{\partial}{\partial x}R(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)\right) - \frac{1}{\hbar^2}R(x,t)\left|\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)\right|^2 + \frac{i}{\hbar}R(x,t)\frac{\partial^2 S(x,t)}{\partial x^2}\right\} +$$

$$+\; U(x)\,R(x,t)\,e^{iS(x,t)/\hbar}$$

Exercício: Façam o limite: $\hbar << 1$ e mostre a partir da equação de Schrödinger dependente do tempo (acima) obtemos a Equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{1}{2m}\left|\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)\right|^2 + U(x) + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = 0$$

Onde $S[q(t)] = \int_{(q,t)} \mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t)]\, dt$

é a função principal de Hamilton ou funcional ação.

Com $\mathcal{L}[q(t), \dot{q}(t)]$ satizfazendo a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}$$

Onde

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p \Longrightarrow \langle \hat{p} \rangle = \frac{\partial S}{\partial x}$$

Assim, apesar do princípio de incerteza proibir a definição de trajetórias o princípio de Hamilton nos dirá que:

$$\delta_{\text{funcionos}} S[q(t)] = 0$$

Assim os valores esperados de uma trajetória seguem a dinâmica clássica, como esperado pelo Teorema de Ehrenfest, qualquer desvio desse valor esperado é puramente quântico!