# Física moderna 1 - 2º semestre/ 2010

Crédito-trabalho
Atividade 7: A teoria de Schrödinger da Mecânica Quântica
Data de entrega: 04/11/2010

1. **Teorema de Ehrenfest**.

a) Utilize o conceito de valor esperado e a equação de Schrödinger dependente do tempo para mostrar que:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]dx+\int_{-\infty}^{\infty}\left[V\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi)\right]dx \tag{1}$$

onde $\Psi=\Psi(x,t)$ é a função de onda (complexa) e $V=V(x)$ é a função energia potencial (real).
Mostre explicitamente os resultados:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}dx \tag{2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[V\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi)\right]dx=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\Psi dx \tag{3}$$

Sugestão: Para obter a equação 2, utilize integração por partes e lembre-se que $\Psi(x)$ e $d\Psi(x)/dx$ devem ser nulas quando $x$ tende a infinito.

Mostre, portanto, que:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\left\langle-\frac{dV}{dx}\right\rangle \tag{4}$$

Compare a equação 4 com seu equivalente clássico e discuta sua interpretação.

b) Utilize o conceito de valor esperado e a equação de Schrödinger dependente do tempo para obter:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^*x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi\right]dx \tag{5}$$

Mostre explicitamente, através de integração por partes, que:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^*x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi\right]dx=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)-\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi^*)\right]dx \tag{6}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)-\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi^*)\right]dx=-2\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi dx \tag{7}$$

Mostre, portanto, que:

$$\langle p\rangle = m\,\frac{d\langle x\rangle}{dt} \tag{8}$$

Compare e discuta o resultado 8 com o momento clássico.

c) Qual a diferença entre a posição $x$ na mecânica clássica e o argumento da função de onda $x$ na mecânica quântica?

2. **Equação da continuidade**.

Se fizermos uma medida da posição de uma partícula no instante $t$, a probabilidade de encontrá-la no intervalo [a,b] é:

$$P=\int_a^b \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx=\int_a^b \rho(x,t)dx \tag{9}$$

onde $\rho(x,t)$ é a *densidade de probabilidade.*

O fluxo da densidade de probabilidade, denominado *corrente de probalidade*, é definido por:

$$J=\frac{1}{m}Re\left[\Psi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right] \tag{10}$$

a) Utilize a equação 10 para obter a seguinte relação:

$$J=\frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right] \tag{11}$$

b) Mostre as relações:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{\partial\Psi}{\partial t}\Psi^*+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} \tag{12}$$

$$\frac{\partial J}{\partial x}=-\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right] \tag{13}$$

c) Mostre explicitamente que:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial J}{\partial x}=0 \tag{14}$$

Sugestão: Multiplique a equação de Schrödinger dependente do tempo por $(-i\Psi^*)$ e a equação complexo conjugada correspondente por $(i\Psi)$. Some as duas equações e identifique as equações 12 e 13.

d) A generalização da equação 14 no espaço tridimensional (equação 15), denominada *equação da continuidade*, é encontrada na mecânica dos fluidos (expressa a conservação de massa) e no eletromagnetismo (expressa a conservação de carga).

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{J}(\vec{r},t)=0 \tag{15}$$

Como exemplo, iremos mostrar o significado da equação da continuidade na mecânica dos fluidos. Considere um fluido de massa m atravessando um tubo cilíndrico em um tempo t com velocidade v na direção x, conforme ilustra a figura abaixo:


O fluxo do fluido para fora do tubo é igual à variação (diminuição) da massa do fluido no tubo em relação ao tempo:

$$\int \rho \mathbf{v} d\mathbf{A} = -\frac{dm}{dt} = -\frac{d}{dt}\int \rho dV \tag{16}$$

onde $\rho$ é a densidade de massa do fluido.

Entretanto, pelo teorema da divergência (ou teorema de Gauss):

$$\int \rho \mathbf{v} d\mathbf{A} = \int \nabla \cdot (\rho \mathbf{v})\, dV \tag{17}$$

Se igualarmos as integrais volumétricas das equaçãoes 16 e 17 e definirmos a variável corrente de probabilidade $\mathbf{J} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{v})$ (compare com a equação 10), obteremos a equação da continuidade.

Note que, como a velocidade do fluido está apenas na direção x, a equação da continuidade irá se reduzir à equação 14.

Qual o significado da equação da continuidade no contexto da mecânica quântica?

Observação: As questões 1 e 2 são dirigidas, portanto somente serão consideradas se todos os cálculos estiverem explicitamente indicados.

3. **Propriedades da equação de Schrödinger**.

a) Partindo a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \tag{18}$$

use o método de separação de variáveis para mostrar que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{19}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t) = E\phi(t), \tag{20}$$

onde $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$.

b) Supondo que $\psi(x)$ é solução da equação de Schrödinger independente do tempo mostre que $\psi^*(x)$ também é solução. Use a linearidade da equação de Schrödinger independente do tempo para mostrar que sua solução pode ser escolhida como sendo real ou imaginário puro.

c) Suponha que o potencial seja uma função par, isto é, $V(x) = V(-x)$. Mostre que se $\psi(x)$ é solução da equação de Schrödinger independente do tempo então $\psi(-x)$ também é solução. Conclua mostrando que a solução $\psi$ pode ser tanto uma função par como uma função ímpar.

d) Considere uma partícula sujeita ao potencial $V(x) = 0$, em um intervalo $-l < x < l$. Mostre que $\psi(x) = A\cos(kx) + B\text{sen}(kx)$ é solução da equação de Schrödinger independente do tempo explicitando qual é a relação entre $E$ e $k$. Construa $\psi_{\text{par}}$ e $\psi_{\text{impar}}$, como sendo a parte par e ímpar de $\psi$ respectivamente. Mostre que o valor esperado da posição $\langle x \rangle$ se anula nos estados $\psi_{\text{par}}$ e $\psi_{\text{impar}}$ enquanto é não nulo no estado $\psi$.

4. **Soluções de partícula livre - Ondas planas**

Uma partícula livre é descrita pela equação de Schrödinger dependente do tempo com o potencial $V(x) = 0$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \tag{21}$$

a) Mostre que a onda plana $\Psi(x,t) = \exp[\frac{i}{\hbar}(px - Et)]$ é solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. Qual deve ser a relação entre $p$ e $E$ para que a onda plana seja solução? Com base nesta relação, é consistente a interpretação de $E$ e $p$ como energia e momento, respectivamente?

b) Usando a definição do comprimento de onda e da frequência de uma onda que se propaga, mostre que $E$ e $p$ satisfazem as relações de de Broglie-Einstein.

c) Desde a velha mecânica quântica é conhecido que ondas planas possuem energia e momento bem definido. No contexto da teoria de Schrödinger a energia e o momento são descritos por operadores diferenciais. Definimos os operadores de energia e momento, respectivamente, como

$$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{22}$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}. \tag{23}$$

Mostre que $\hat{H}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$ e $\hat{p}\Psi(x,t) = p\Psi(x,t)$ para uma onda plana, o que mostra que no contexto da teoria de Schrödinger as ondas planas também possuem energia e momento bem definido. De fato, do ponto de vista histórico, foram as propriedades das ondas planas que orientaram a construção dos operadores de momento e energia.