8: Estados estacionários

Na equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t) \tag{39}$$

procuremos soluções da forma

$$\psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})T(t) \ , \tag{40}$$

que são um produto de uma função só de $\vec{r}$ por uma função só de t. Explicitando a forma do hamiltoniano,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \tag{41}$$

reescrevemos a Eq.(39) assim:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u(\vec{r})T(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 u(\vec{r})T(t) + V(\vec{r})u(\vec{r})T(t) \tag{42}$$

que pode ser reescrita:

$$i\hbar u(\vec{r})\frac{dT(t)}{dt} = -T(t)\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})u(\vec{r})T(t) \tag{43}$$

Dividindo por $u(\vec{r})T(t)$, temos

$$i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{u}\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 u + V(\vec{r}) \tag{44}$$

O primeiro membro não depende de $\vec{r}$, ou seja, só pode depender de t. Ele é igual ao segundo membro, que não pode depender de t. Logo, o primeiro membro não depende nem de $\vec{r}$ nem de t: não depende então de nada: é constante. O segundo membro, por força da equação, é igual ao primeiro, e então também constante. Designemos esta constante por E. Teremos então

$$i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = E \tag{45}$$

ou

$$\frac{dT}{T} = -\frac{i}{\hbar}Edt \tag{46}$$

que é integrada facilmente, dando

$$T(t) = Ke^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{47}$$

Logo,

$$\psi(\vec{r},t) = Ku(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{48}$$

Note-se que

$$\hat{H}\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(Ku(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right) = E\psi(\vec{r},t)$$

o que mostra duas coisas importantes:

1. Os $\psi(\vec{r},t)$ da forma $u(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ são autofunções do hamiltoniano.

2. E é o autovalor do hamiltoniano, e, portanto, a energia do sistema, quando neste estado.

Estados da forma

$$\psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})E^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{49}$$

são chamados estados estacionários. O nome é devido ao fato de que a densidade de probabilidade de posição, $|psi(\vec{r},t)|^2$, é independente do tempo, pois

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \left(u(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right)^*\left(u(\vec{r}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right) = |u(\vec{r})|^2 \tag{50}$$

pois $|e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|^2 = 1$.

Os estados estacionários são extremamente importantes na descrição quântica da natureza, não só por representarem os estados que têm energia definida, mas também porque o conjunto dos autoestados do hamiltoniano, que são os estados estacionários, é completo. Isto significa que qualquer estado pode ser representado como uma combinação linear de estados estacionários.

A determinação dos estados estacionários de um determinado hamiltoniano é feita normalmente resolvendo-se a equação, dita equação de Schrödinger independente do tempo,

$$\hat{H}u(\vec{r}) = Eu(\vec{r}) \tag{51}$$

Resolver esta equação significa não só determinar $u(\vec{r})$, mas o par(E $, u(\vec{r})$).

O número E é o autovalor de $\hat{H}$ associado à autofunção $u(\vec{r})$. Problemas desse tipo são chamado