Desafio III - Física II

1 Parte A

Considere uma série de osciladores harmônicos conectados por molas com distância de equilíbrio a. Suponha que a força sobre a n-éssima partícula seja dada por

$$F_n = -m\omega_0^2[(x_n - x_{n-1}) + (x_n - x_{n+1})] = m\ddot{x}_n \tag{1}$$

onde x_n é o desvio da n-éssima partícula em relação a posição de equilíbrio

1. Encontre uma relação entre ω e α para que $x_n = A_n e^{i\omega t}$ com $A_n = e^{in\alpha}$ seja solução do problema dinâmico dado em (1).

2. Mostre que há uma frequência máxima $\omega = 2\omega_0$.

3. Assuma que o desvio x_n é dado por uma função $u(x,t)$ para a partícula n na posição x quando em equilíbrio e, portanto, $x_{n\pm1} = u(x \pm a, t)$. Mostre que para valores pequenos de a a equação (1) leva à equação de onda em uma dimensão, dada por
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{2}$$
onde $v = \omega_0 a$.

4. Encontre uma equação diferencial para $f(x)$ usando que $u(x,t) = e^{i\omega t} f(x)$ deve satisfazer a equação (2).

5. Supondo que $f(x) = Ae^{ikx}$, escreva k em termos de ω e v.

2 Parte B

Agora iremos utilizar o que aprendemos na parte A do desafio para estudarmos a equação de Schrödinger unidimensional, isto é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}, \tag{3}$$

onde m é a massa da partícula, $V(x)$ é o potencial do qual a partícula está submetida e $\hbar$ é a constante de Planck dividida por 2π. A função $\psi(x,t)$ é a famosa função de onda da partícula. Diferentemente da mecânica clássica, onde as partículas têm posição, momento e energia bem definidas, na mecânica quântica nós temos que trabalhar com probabilidades. Como veremos a diante com mais detalhes, $|\psi(x,t)|^2$ fornece a distribuição de probabilidades que nós precisamos para, por exemplos, determinar a probabilidade de uma partícula estar numa certa posição x no instante t.

Vamos estudar o problema da partícula na caixa, que consiste de uma partícula de massa m submetida a um potencial $V(x) = 0$ no intervalo $x \in [0, L]$, com condições de contorno

$$\psi(0,t) = \psi(L,t) = 0. \tag{4}$$

Dadas essas informações:

1. Considere que $\psi(x,t)$ é da forma

$$\psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \tag{5}$$

Mostre que a equação de (3) se reduz a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x), \tag{6}$$

que é conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo.

2. Utilizando o que você aprendeu até agora sobre equações diferenciais, mostre que

$$\phi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx), \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{7}$$

3. Mostre que utilizando as condições de contorno (4), é possível obter que

$$A = 0, \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}, \tag{8}$$

onde $n = 1, 2, \cdots$. Determine também a expressão para E_n.

4. Por último, vamos determinar a constante B. Isso pode ser feito por meio de um argumento ligado a probabilidade. Se $|\psi(x,t)|^2$ fornece a probabilidade de a partícula estar na posição x num dado instante t, podemos calcular a probabilidade da partícula estar no intervalo $\Delta x = x_2 - x_1$ por meio de

$$P(x_2, x_1) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x,t)|^2\, dx. \tag{9}$$

Dito isso, se o intervalo $\Delta x = L$, que é o comprimento da caixa, a partícula deve ter 100% de chance de estar nesse intervalo. Tal fato implica que

$$\int_0^L \left|\psi_n\left(x,t\right)\right|^2 dx = 1, \tag{10}$$

onde $\psi_n\left(x,t\right)$ são as soluções de (6) já levando em conta o k_n encontrado no item c). Use (10) para mostrar que

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}}. \tag{11}$$

Dica: $\sin^2\left(x\right) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(2x\right)\right).$

As funções $\psi_n\left(x,t\right)$ que você encontrou no desafio são estados que descrevem o comportamento de partículas com energia bem definidas E_n. Como você também determinou no desafio, E_n pode assumir somente alguns valores proporcionais a n^2. Dizemos que o espectro de energia da partícula é discreto. Essa é uma característica de partículas confinadas em mecânica quântica, seja por algum poço de potencial, por exemplo, o potencial harmônico, ou por condições de contorno da forma (4). Por fim, a partícula não necessariamente precisa ter energia bem definida em mecânica quântica. Nesse caso, a função de onda $\psi\left(x,t\right)$ que descreve a partícula é uma combinação linear das funções $\psi_n\left(x,t\right)$, isto é

$$\psi\left(x,t\right) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n\left(x,t\right), \tag{12}$$

onde $\left|C_n\right|^2$ é a probabilidade da partícula ter energia E_n. Sem entrar muito em detalhes, a expensão acima é muito utilizada não só em mecânica quântica, mas também em mecânica ondulatória, como vocês verão em breve ao estudarem modos normais de vibração e séries de Fourier.