

Teoria de Perturbação Dependente do Tempo

(a) Descrição de Interação

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (1)$$

H_0 é independente de t .

Definimos $|\psi; t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\psi; t\rangle_S \quad (2)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle_I = i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} H_0 |\psi; t\rangle_I + e^{iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle_S \right)$$

$$= -H_0 |\psi; t\rangle_I + e^{iH_0 t/\hbar} (H_0 + V(t)) |\psi; t\rangle_S$$

$$= -\cancel{H_0} |\psi; t\rangle_I + e^{iH_0 t/\hbar} (\cancel{H_0} + V(t)) e^{-iH_0 t/\hbar} |\psi; t\rangle_I$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle_I = V_I(t) |\psi; t\rangle_I \quad (3)$$

onde $V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (4)$

Note que os observáveis obedecem a

$$i\hbar \frac{dA_I}{dt} = [A_I, H_0] \quad \text{já que} \quad A_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A_S e^{-iH_0 t/\hbar}$$

A solução formal de (3) começa com o operador de evolução temporal

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} - V_I(t) \right) U_I(t, t') = 0 \quad (5a) \quad \text{com} \quad U_I(t, t) = \mathbb{1} \quad (5b)$$

sendo $|\psi; t\rangle_I = U_I(t, t') |\psi; t'\rangle_I$ (5c)

Obtremos a série de Dyson que para $U_I(t, t')$ e'

$$U_I(t, t') = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dz V_I(z)} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dz V_I(z) + \frac{1}{2!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t'}^t dz \int_{t'}^t dz' T[V_I(z) V_I(z')] + \dots$$

onde $T[V_I(z) V_I(z')] = \begin{cases} V_I(z) V_I(z') & \text{se } z > z' \\ V_I(z') V_I(z) & \text{se } z' > z \end{cases}$

$$\begin{aligned} |\psi; t\rangle_I &= e^{i \frac{H_0 t}{\hbar}} |\psi; t\rangle_S = e^{i \frac{H_0 t}{\hbar}} U(t, t_0) |\psi; t_0\rangle_S \\ &= \underbrace{e^{i \frac{H_0 t}{\hbar}} U(t, t_0) e^{-i \frac{H_0 t_0}{\hbar}}}_{U_I(t, t_0)} |\psi; t_0\rangle_I \quad (\text{usando (2)}) \end{aligned}$$

(5d)

(b) Probabilidade de Transição

Consideremos o estado no tempo $t=0$ como sendo um auto-estado de H_0 :

$$|\psi; t=0\rangle_I = |\psi\rangle \quad (6a)$$

$$H_0 |\psi\rangle = E_i |\psi\rangle \quad (6b)$$

Usando (5c) segue que

$$|i, t\rangle_I = U_I(t, 0) |i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | U_I(t, 0) | i \rangle \quad (7a)$$

↑ auto-estados de H_0

escrevemos então

$$|i, t\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (7b)$$

onde $c_n(t) = \langle n | U_I(t, 0) | i \rangle \quad (7c)$

É interessante aplicar (5d) na definição de $c_n(t)$:

$$c_n(t) = \langle n | e^{i H_0 t / \hbar} U(t, 0) e^{-i H_0 t_0 / \hbar} | i \rangle = e^{i E_n t / \hbar} \langle n | U(t, 0) | i \rangle \quad (8)$$

logo a probabilidade de partícula se encontrar no estado $|n\rangle$ é dada por

$$|c_n(t)|^2 = |\langle n | U_I(t, 0) | i \rangle|^2 = |\langle n | U(t, 0) | i \rangle|^2$$

↑
↳ na ~~descrição~~ de Schrödinger

Note que a última igualdade só vale se $|n\rangle$ e $|i\rangle$ forem autovetores de H_0 ! Em geral esse é o caso, e se não for podemos sempre expandir nesse base!

Usando a série de Dyson podemos tirar

$$c_n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_n^{(k)}(t) \quad (9)$$

Comparando (7c), (9) e a série de Dyson em potências de V segue que

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$$

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \langle n | V(t') | i \rangle dt' \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t e^{i \frac{(E_n - E_i)t'}{\hbar}} \langle n | V(t') | i \rangle dt' \end{aligned}$$

↑ Schrödinger

etc...

(c) Exemplo de Perturbação Constante

Suponha que

$$V(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ V & t \geq 0 \end{cases}$$

↑ constante mas V um operador!

Nesse caso: $c_n^{(0)} = c_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}$

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \langle n | V | i \rangle \int_0^t dt' e^{i \frac{(E_n - E_i)t'}{\hbar}} \\ &= \frac{\langle n | V | i \rangle}{(E_n - E_i)} \left(1 - e^{i \frac{(E_n - E_i)t}{\hbar}} \right) \end{aligned}$$

Note que a probabilidade do partícula se encontrar no estado $|n\rangle$ depende de $\langle n|V|i\rangle$ e de $E_n^{(0)} - E_i^{(0)}$ (para $n \neq i$)

$$|C_n^{(1)}|^2 = \frac{|\langle n|V|i\rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} \left(2 - 2 \cos \left(\frac{E_n - E_i}{\hbar} t \right) \right)$$

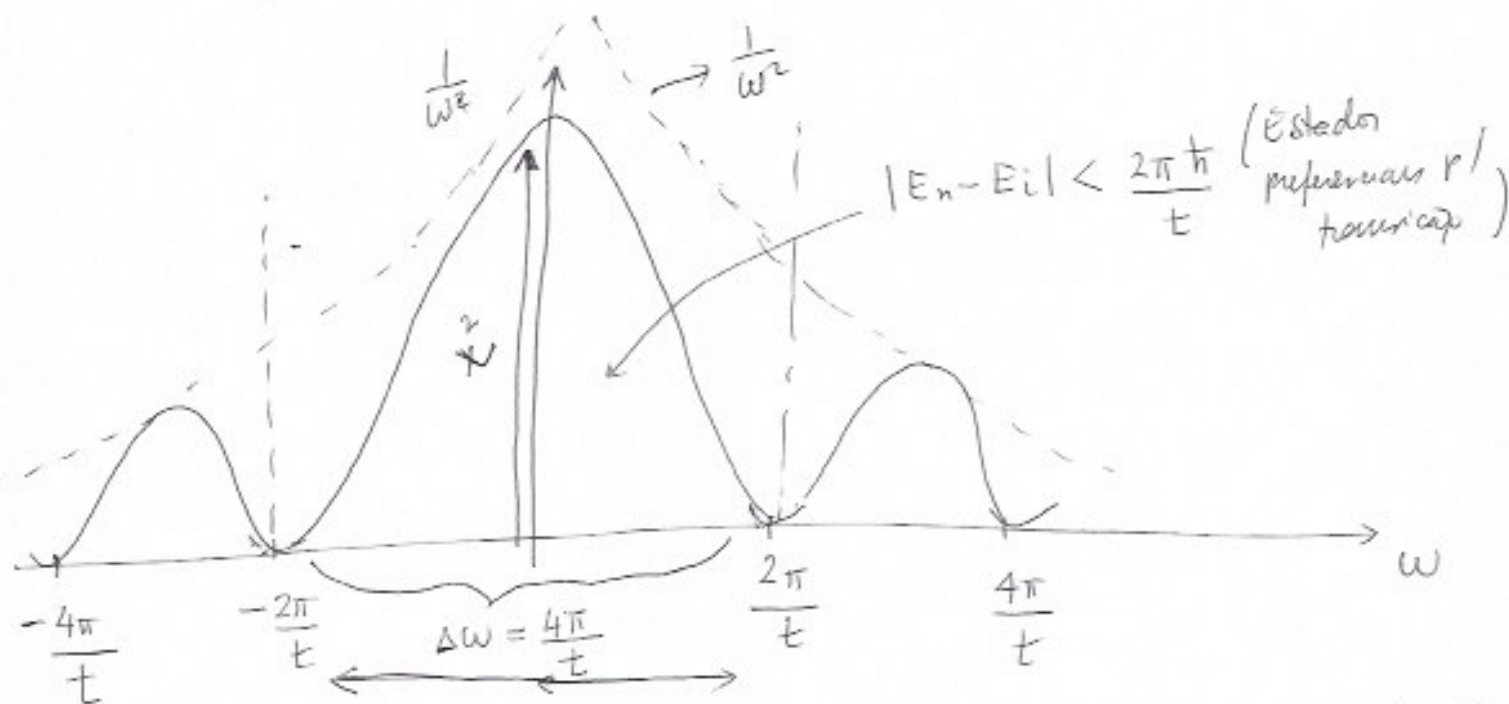
$$= 4 \frac{|\langle n|V|i\rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right]$$

Lembrando que:

$$\cos \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{2} \right) = \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2} = 1 - 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}$$

$$\Rightarrow \sin^2 \frac{\alpha}{2} = \frac{1}{2} (1 - \cos \alpha)$$

Definimos $\boxed{\omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar}}$ para ver o comportamento de $|C_n^{(1)}(t)|^2$



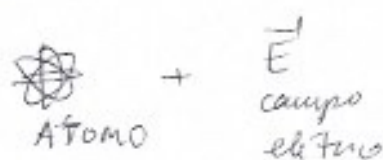
Estados preferenciais para transições (medida no intervalo de tempo $\Delta t \ll t$ é finita conservação da energia não é perfeita $\Rightarrow \Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$) (5)

Enquanto uma perturbação ligada de repente pode causar transições de 1ª ordem para qualquer estado com $\langle n | V | i \rangle \neq 0$ a probabilidade é maior quando a transição conserva energia dentro de $\Delta E = 2\pi\hbar/t$.

Se antes os níveis E_n e E_i são discretos e $E_n \neq E_i$ a probabilidade de transição simplesmente oscila com período $\frac{2\pi\hbar}{|E_n - E_i|}$.

Se $|i\rangle$ e $|n\rangle$ forem degenerados a probabilidade de transição cresce com t^2 . Mas a probabilidade não pode ser maior que 1 $\Rightarrow$ os efeitos de ordem mais alta que não levamos em conta até agora se tornam importante depois de algum tempo, impedindo a probabilidade de exceder 1.

Caso Importante: se E_n pertencer ao espectro contínuo temos a transição para um grupo de estados em torno de $|n\rangle$. Por exemplo, no efeito fotoelétrico (densidade de probabilidade)



$\Rightarrow$ estado onde a energia é bem definida mas a direção não.

Outro exemplo é o espalhamento de uma partícula por um potencial a probabilidade de transição é

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |\langle n | V | i \rangle|^2 \left[\frac{\sin \left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar} t \right)}{\frac{(E_n - E_i)}{2}} \right]^2 \quad (10)$$

A probabilidade é picada para $E_n \approx E_i$ para tempos grandes

$$\frac{\sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)}{2\hbar} t \right)}{\left(\frac{E_n - E_i}{2} \right)^2} = \frac{t}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right]}{t \left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar} \right)^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{t}{\hbar^2} \pi \delta \left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar} \right) \quad (6)$$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_n - E_i) \quad (11)$$

onde usamos que $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x)$

A probabilidade de transição para os estados degenerados do contínuo é

$$\sum_n P_{i \rightarrow n}(t) = \int dE_n g(E_n) P_{i \rightarrow n}(t) \quad (12)$$

degenerados

onde $g(E_n)$ é a densidade de estados, isto é, $g(E_n) dE_n$ é o número de estados com energia entre E_n e $E_n + dE_n$. Substituindo (11) em (12) segue que

(Note que experimentos reais a resolução de energia é sempre finita!)

$$\begin{aligned} \sum_n P_{i \rightarrow n}(t) &= \int dE_n g(E_n) \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_n - E_i) |\langle n|V|i\rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi t}{\hbar} g(E_n) \Big|_{E_n=E_i} |\langle n|V|i\rangle|^2 \end{aligned}$$

Logo a probabilidade de transição por unidade de tempo é (taxa de transição)

$$\Gamma \equiv \frac{\sum_n P_{i \rightarrow n}(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V|i\rangle|^2 g(E_n) \Big|_{E_n=E_i} \quad \text{(Regra de Ouro de Fermi)} \quad (13)$$

EXEMPLO 1: Espalhamento por um potencial V

Para facilitar o cálculo de g consideremos que a partícula/nítida esteja em uma caixa cúbica de lado L . Os autoestados/energias de partícula livre são

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar}}{L^{3/2}} \quad \text{com} \quad \vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L} (n_x \vec{e}_x + n_y \vec{e}_y + n_z \vec{e}_z)$$

$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Condições periódicas $\psi(x, y, z) = \psi(x+L, y+L, z+L)$

Com a normalização $\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z}$

Os níveis de energia são $E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ e a densidade de

estados vem de

$$\left(\left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 d^3\vec{p} \right) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 p^2 dp d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 p m d\Omega dE_p$$

$\uparrow$
 $dE_p = \frac{2p dp}{2m}$

densidade de estados no espaço $\vec{p}$ $\equiv$ # de níveis no volume $d^3\vec{p}$ centrado em $\vec{p}$

$$\Rightarrow g = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m p d\Omega$$

Elemento de matriz no caso dado por

$$\langle \vec{p}' | V | \vec{p} \rangle = \int d^3x \frac{e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{x} / \hbar}}{L^{3/2}} V(\vec{x}) \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar}}{L^{3/2}} = \int \frac{d^3x}{L^3} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}} V(\vec{x})$$

$\uparrow$
 $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

$$\equiv \frac{1}{L^3} \mathcal{F}[V] (\vec{k}' - \vec{k})$$

Usando a regra de ouro de Fermi

$$d\Gamma_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}'} = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m p' d\Omega' \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\mathcal{F}[V] (\vec{k}' - \vec{k})|^2}{L^6}$$

$$= \frac{d\Omega'}{L^3} \frac{m p'}{4\pi^2 \hbar^4} |\mathcal{F}[V] (\vec{k}' - \vec{k})|^2 \quad \left(\begin{array}{l} \text{Note que a energia} \\ \text{final é igual à} \\ \text{inicial } S(E_n - E_i) \\ \text{Espalhamento} \\ \text{Elastico} \end{array} \right)$$

A seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ é definida como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{taxa de espalhamento em } d\Omega}{\text{fluxo incidente}}$$

$$\begin{aligned} \text{fluxo incidente} \\ = \frac{p}{m} L^3 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |\mathcal{F}[V] (\vec{k}' - \vec{k})|^2} \quad \left(\begin{array}{l} \text{Aproximação de} \\ \text{Born} \end{array} \right)$$

Espalhamento Elástico

Exemplo 2: Decaimento radioativo de um núcleo

$$\begin{array}{ccc} |i\rangle & \longrightarrow & |f; \hbar \vec{k}\rangle \\ \text{estado inicial} & & \text{estado final} \\ \text{do núcleo} & & \text{do núcleo residual} \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{momento da partícula} \\ \text{emitida.} \end{array}$$

Para a regra de ouro de Fermi

$$d\Gamma = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m p d\Omega \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f; \hbar \vec{k} | V | i \rangle|^2 \quad \begin{array}{l} \text{taxa de} \\ \text{decaimento} \end{array} \quad (9)$$

$$\Gamma = \frac{m p L^3}{4\pi^2 \hbar^4} \int d\Omega |\langle f, \hbar \vec{k} | V | i \rangle|^2$$

Note que novamente a dependência L^3 cancela pois a normalização de $|f; \hbar \vec{k}\rangle$ envolve $\frac{1}{L^{3/2}}$

Note também que $E_i = E_f + \epsilon_k$ $\leftarrow$ energia do partícula emitida.

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$$

$$\therefore \Gamma = \frac{m k L^3}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int d\Omega |\langle f, \hbar \vec{k} | V | i \rangle|^2$$

esse é a taxa de decaimento do núcleo, logo se começarmos com N_0 núcleos em $t=0$, a teoria de perturbação nos diz que teríamos depois de um tempo t $\Delta N = N_0 \Gamma t$ menos núcleos. Essa expressão é válida para tempo curto pois o número

N_0 diminuir $\nearrow$ Assim $\frac{dN(t)}{dt} = - \underset{\substack{\uparrow \\ N(t) \Gamma}}{\text{termo}} \Rightarrow \boxed{N(t) = N_0 e^{-\Gamma t}}$

Na nossa derivação de (10) assumimos que a interação é ligada repentinamente em $t=0$. Em muitas situações

físicas é mais realista pensar que isso ocorre adiabaticamente

Por exemplo, se iluminarmos um átomo, a frente de onda luminosa não é perfeitamente definida $\nearrow$ imediatamente a amplitude que atinge o átomo leva algum tempo para atingir o estado estacionário.

A luz, do ponto de vista do átomo, é ligada de vez. $\tilde{V} = e^{i\eta t} V$

$\eta > 0$. Podemos mostrar que $\Gamma_{i \rightarrow n}$ tem a mesma forma que (13) (10)