AULA 25

Mecânica Quântica I

Largura de Decaimento

AULA 25

<u>Objetivo</u>: estudar como ocorre o decaimento de um estado excitado.

<u>Hipótese</u>: para facilitar tomaremos $t_0 \longrightarrow -\infty$ e para evitar mudanças bruscas ligaremos lentamente a interação com $V(t) = e^{\eta t} V_0$ onde $V_0 = \text{const}$; no final tomamos $\eta \rightarrow 0$

Vamos recapitular a regra de ouro de Fermi novamente com $V(t) = e^{\eta t} V_0$ para verificar o método. Se $n \neq i$

$$c_n^{(0)} = 0$$

$$c_n^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \langle n|V_0|i\rangle \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{\eta t'} e^{i(E_n-E_i)t'/\hbar}$$

$$= \frac{-i}{\hbar} \langle n|V_0|i\rangle \frac{e^{\eta t + i(E_n-E_i)t/\hbar}}{\eta + i\frac{(E_n-E_i)}{\hbar}} \qquad (1)$$

logo a probabilidade de transição $i \to n$ é

$$|c_n(t)|^2 \simeq |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{|\langle n|V_0|i\rangle|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \frac{(E_n-E_i)^2}{\hbar^2}}$$

$$\Longrightarrow \frac{d}{dt}|c_n(t)|^2 \simeq \frac{2|\langle n|V_0|i\rangle|^2}{\hbar^2} \frac{\eta \, e^{2\eta t}}{\eta^2 + \left(\frac{E_n-E_i}{\hbar}\right)^2} \qquad (2)$$

Contudo $\lim\limits_{\eta \to 0} \frac{\eta}{\eta^2 + \left(\frac{E_n-E_i}{\hbar}\right)^2} = \pi \, \delta\left(\frac{E_n-E_i}{\hbar}\right) = \pi\hbar \, \delta(E_n - E_i)$ (3)

o que leva a

$$\text{taxa de transição} = \frac{d}{dt} |C_n(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V_0|i\rangle|^2 \delta(E_n - E_i)$$

o que leva a regra de ouro de Fermi quando somamos sobre estados finais!

Probabilidade de permanência no estado $|i\rangle$: vamos calcular até 2ª ordem:

* Ordem zero: $c_i^{(0)} = 1$ (4a)

* Ordem 1 : $c_i^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \langle i|V_0|i\rangle \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{\eta t'} =$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle i|V_0|i\rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta} \quad (4b)$$

* Ordem 2 :

$$c_i^{(2)} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{t} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \langle i| \underbrace{V_I}_{\sum_m |m\rangle\langle m|} V_I |i\rangle$$

$$= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m |\langle m|V_0|i\rangle|^2 \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{\eta t' + i(E_i - E_m)t'} \times$$

$$\int_{-\infty}^{t'} dt'' \, e^{\eta t'' + i(E_m - E_i)t''/\hbar}$$

$$= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |\langle i|V_0|i\rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2 e^{2\eta t}}{2\eta (E_i - E_m + i\hbar\eta)} \quad (4c)$$

Logo até segunda ordem

$$c_i(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar} \langle i|V_0|i\rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |\langle i|V_0|i\rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2}$$

$$\frac{-i}{\hbar} \sum_{m\neq i} \frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2 e^{2\eta t}}{2\eta\,(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

Obtemos uma equação diferencial para c_i:

$$\frac{dc_i(t)}{dt} \cong \frac{-i}{\hbar} \langle i|V_0|i\rangle e^{\eta t} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |\langle i|V_0|i\rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{\eta} - \frac{i}{\hbar} \sum_{m\neq i} \frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2}{}$$

$$\frac{\times\ e^{2\eta t}}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

$$\frac{\frac{dc_i(t)}{dt}}{c_i(t)} = \frac{-\frac{i}{\hbar}\langle i|V_0|i\rangle e^{\eta t} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |\langle i|V_0|i\rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{\eta} - \frac{i}{\hbar}\sum_{m\neq i} \frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2 e^{2\eta t}}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)}}{1 - \frac{i}{\hbar}\langle i|V_0|i\rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta} + \cdots}$$

Até ordem V_0^2, "$\eta \to 0$"

$$\frac{\frac{dc_i(t)}{dt}}{c_i(t)} \simeq \frac{-i}{\hbar}\langle i|V_0|i\rangle - \frac{i}{\hbar}\sum_{m\neq i} \frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)} = \frac{-i}{\hbar}\Delta_i \quad \underline{\text{constante}}! \quad (5)$$

Assim temos

$$\frac{dc_i(t)}{c_i(t)} = \frac{-i}{\hbar}\Delta_i\, dt \quad \Rightarrow \boxed{c_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_i t}} \quad (6) \quad c_i(0) = 1.$$

Interpretação: Na ~~representação~~ descrição de Schrödinger

$$|\psi;t\rangle_S = c_i(t)\, e^{-iE_i t/\hbar}|i\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i+\Delta_i)t}|i\rangle \quad (7)$$

Note que mesmo para $\eta \to 0$,

$$\Delta_i = \langle i|V_0|i\rangle + \sum_{m\neq i}\frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \quad (8)$$

pode ser complexo!

Em primeira ordem:

$$\Delta_i^{(1)} = \langle i|V_0|i\rangle \quad (9a)$$ que é só o deslocamento devido a teoria de perturbação, correção da energia.

Em segunda ordem:

$$\Delta_i^{(2)} = \sum_{m\neq i}\frac{|\langle m|V_0|i\rangle|^2}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \quad (9b)$$

Agora devemos lembrar que

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{x+i\epsilon} = \mathcal{P}.\frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (10)$$

o que permite escrever

$$\mathrm{Re}\,(\Delta_i^{(2)}) = \mathrm{V_p.} \sum_{m\neq i} \frac{|\langle i|V_0|m\rangle|^2}{E_i - E_m} \qquad (11a)$$

$$\mathrm{Im}\,(\Delta_i^{(2)}) = -\pi \sum_{m\neq i} |\langle i|V_0|m\rangle|^2\, \delta(E_i - E_m) \qquad (11b)$$

Por outro lado a regra de ouro de Fermi para transições $i \to n$, $m \neq i$ é

$$\frac{\sum_{m\neq i} \mathrm{Prob}_{i\to m}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m\neq i} |\langle m|V_0|i\rangle|^2\, \delta(E_i - E_m) \equiv \Gamma_i$$

logo $\quad \mathrm{Im}\,(\Delta_i^{(2)}) = -\dfrac{\hbar\,\Gamma_i}{2} \quad (12)$

O que conduz a (usando (6) e (11a) e (11b))

$$|c_i(t)|^2 = e^{2\,\mathrm{Im}(\Delta_i^{(2)})\,t/\hbar} = e^{-\Gamma_i t} \quad !$$

$$E_i' = E_i + \langle i|V_0|i\rangle + V_p \sum_{m\neq i} \frac{|\langle i|V_0|m\rangle|^2}{E_i - E_m}$$

(teoria de perturbação estacionária)

$$|i(t)\rangle = e^{-iE_i' t}\; e^{-\Gamma_i t/2}\; |i\rangle$$

Vemos que o resultado da perturbação é duplo:

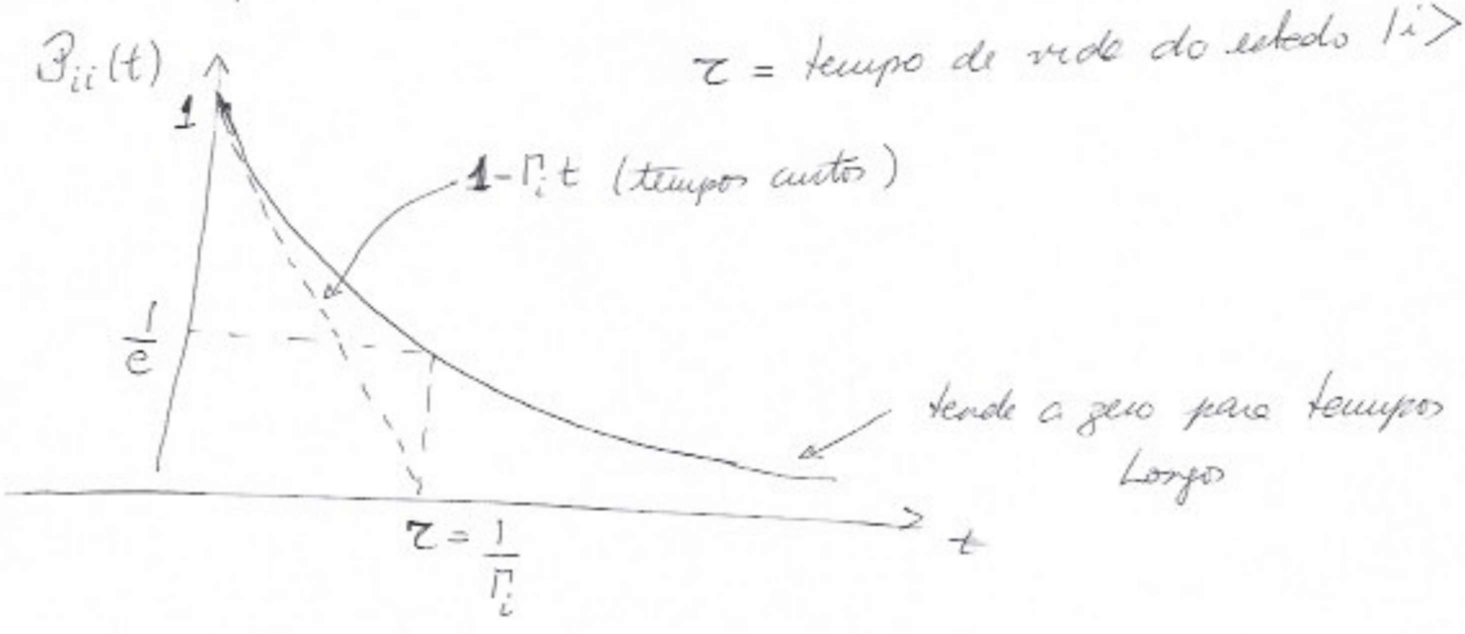
— muda a energia original do estado discreto $|i\rangle$

$$E_i \rightarrow E_i + \langle i|V_0|i\rangle + V_P \sum_{m\neq i} \frac{|\langle i|V_0|m\rangle|^2}{E_i - E_m}$$

— o potencial induz transições de $|i\rangle \rightarrow |m\rangle$ com uma taxa Γ devido ao acoplamento com o contínuo de estados de mesma energia

$$|\langle i|i(t)\rangle|^2 \sim e^{-\Gamma_i t}$$

a amplitude para permanecer no estado inicial decai exponencialmente quando existe uma taxa de transição constante para outros estados



Comportamento irreversível a ser contrastado ao comportamento oscilatório entre 2 estados discretos submetidos a uma perturbação ressonante acoplando os 2 estados

No caso particular de <u>emissão espontânea</u> de um fóton por um átomo, ΔE representa o desvio do nível atômico estudado devido ao acoplamento com o contínuo de estados finais (átomo em um estado discreto na presença de um fóton). A diferença entre os deslocamentos dos estados $2s_{1/2}$ e $2p_{1/2}$ do átomo de hidrogênio não é outro que o "Lamb shift".

— " —

Uma vez que o estado discreto se desintegra, isto é, quando $t \gg 1/\Gamma_i$, o estado final do sistema pertence a um contínuo de estados $\{|n\rangle\}$

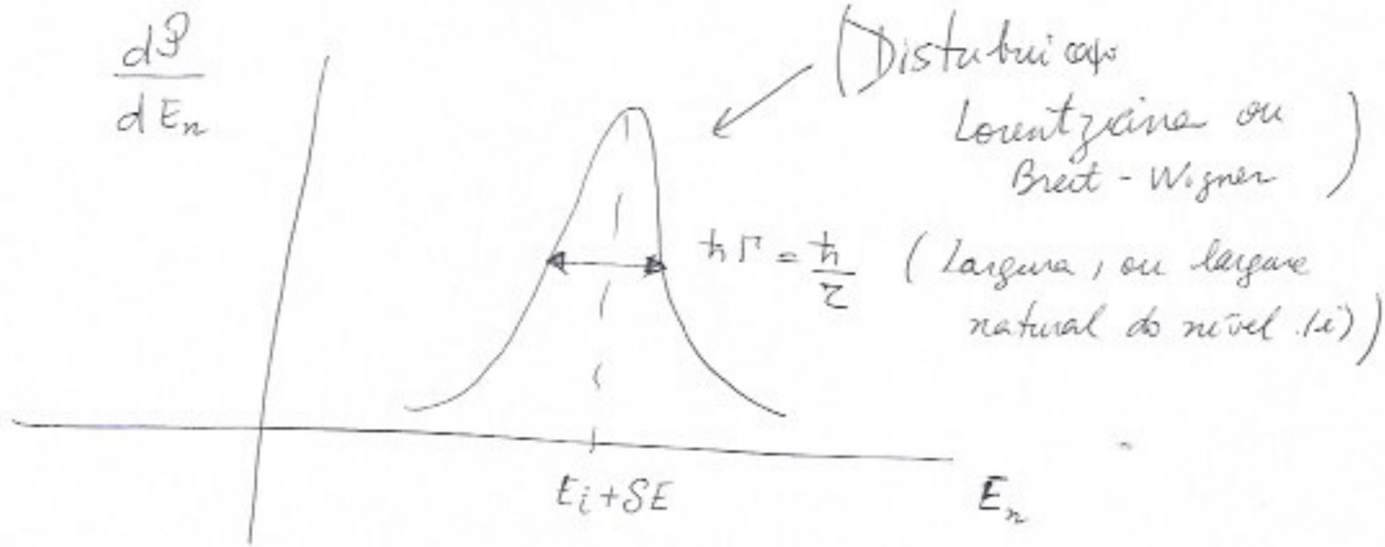
$$c_n^{(1)}(t) \overset{t \gg 1/\Gamma_i}{=} \frac{-i}{\hbar} \langle n|V_0|i\rangle \int_0^t dt'\, e^{i(E_n - E_i' + i\frac{\Gamma_i \hbar}{2})t'/\hbar}$$

$$= \frac{\langle n|V_0|i\rangle}{\hbar} \; \frac{1 - e^{-\Gamma_i t/2}\, e^{i(E - E_i - \delta E)t/\hbar}}{\frac{1}{\hbar}(E_n - E_i - \delta E) + i\frac{\Gamma}{2}}$$

$$E_i' = E_i + \delta E \qquad \delta E = \langle i|V_0|i\rangle + V_p \sum_{m \neq i} \frac{|\langle i|V_0|m\rangle|^2}{E_i - E_m}$$

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 \underset{t \gg \frac{1}{\Gamma_i}}{\simeq} |\langle n|V_0|i\rangle|^2 \; \frac{1}{(E_n - E_i - \delta E)^2 + \hbar^2 \Gamma_i^2/4}$$

$|c_n^{(1)}(t)|^2$ representa uma densidade de probabilidade de estados.



distribuição de energia dos estados finais

$$d\mathcal{P}(E_n,t) = |\langle E_n|V_0|i\rangle|^2 \rho(E_n) \frac{1}{(E_n-E_i-\delta E)^2+\hbar^2\Gamma_i^2/4} dE_n$$

Note que quanto maior $\hbar\Gamma$, ou seja, quanto menor for o tempo de vida do estado discreto $|i\rangle$, maior a dispersão de energia dos estados finais em torno do valor máximo $E_i+\delta E$ (energia do estado $|i\rangle$ corrigida de δE devido ao acoplamento com o contínuo)

$$\Delta E_n = \hbar\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$$

Na presença do acoplamento V_0 o estado $|i\rangle$ não pode ser observado que por um tempo $\sim\tau$ (finito). Quando queremos determinar sua energia medindo a energia do estado final do sistema, a incerteza ΔE sobre o resultado não pode ser muito inferior a $\hbar/\tau$.

Para entender isso melhor é preciso discutir a teoria qual de espalhamento o que será feito em M. Q. II.