

Teoria de Perturbação dependente do tempo

Estratégia de Dirac (1927). A proposta de Dirac é familiar. Defina:

$$c_n(t) = \underbrace{c_n^{(0)}}_{0^a} + \underbrace{c_n^{(1)}}_{1^a} + \underbrace{c_n^{(2)}}_{2^a\text{-ordem}} + \dots$$

e suponha que inicialmente só $|i\rangle$ está populado.

ou seja, $c_n^{(0)} = \delta_{ni}$. A equação dos $c_n(t)$ foi obtida na aula 6, e escrita na forma matricial por:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{com } \omega_{21} = -\omega_{12}$$

Como V carrega um λ^1 , igualar termos de mesma ordem em λ , implica em comparar uma ordem superior de \dot{c}_j (especificamente $\dot{c}_j^{(k+1)}$) com uma ordem inferior de c_ℓ (especificamente $c_\ell^{(k)}$). Comece com $c_n^{(0)}$ e retire uma expressão para $\dot{c}_n^{(1)}$. Faça de novo e obtenha $c_n^{(2)}$, e assim por diante.

Teoria de Perturbação dependente do tempo

Estratégia de Dyson. No formalismo de Dyson utilizamos o operador de evolução temporal $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ do enfoque de interação. Para isso, vamos encontrar uma expansão perturbativa para $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ e no final, relacionar seus elementos de matriz com os c'_n s. Embora pareça que estamos construindo uma ferramenta muito sofisticada, ela será útil em problemas complexos, envolvendo teoria quântica de campos e teoria de muitos corpos.

Começamos por: $\underbrace{|\alpha, t_0; t\rangle_I = \mathcal{U}_I(t, t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_I}$

o operador foi construído para ter esta propriedade

Vimos que $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I$ e isso permite escrever:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_I(t, t_0) \right) \underbrace{|\alpha, t_0; t_0\rangle_I} = V_I \mathcal{U}_I(t, t_0) \underbrace{|\alpha, t_0; t_0\rangle_I}$$

independente do tempo

Como isso tem que valer para $\forall |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_I(t, t_0) = V_I \mathcal{U}_I(t, t_0)$

Precisamos resolver esta equação com a condição de contorno: $\mathcal{U}_I(t, t_0)|_{t=t_0} = 1$

Teoria de Perturbação dependente do tempo

Integrando, de $t = t_0$ até t , a equação diferencial que define $\mathcal{U}_I(t, t_0)$, temos:

$$i\hbar \int_{t_0}^t \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_I(t, t_0) = \int_{t_0}^t V_I(t') \mathcal{U}_I(t', t_0)$$

$$[\mathcal{U}_I(t, t_0) - \mathcal{U}_I(t_0, t_0)] = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') \mathcal{U}_I(t', t_0)$$

que com a condição de contorno: $\mathcal{U}_I(t, t_0)|_{t=t_0} = 1$, permite escrever:

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') \mathcal{U}_I(t', t_0)$$

O problema está resolvido? Não. $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ aparece nos dois lados. Proposta de solução iterativa:

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') \mathcal{U}_I(t'', t_0) dt'' \right)}_{\mathcal{U}_I(t', t_0)} dt'$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') + \dots +$$

$$+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^{(n)}) \Rightarrow \text{Série de Dyson}$$

Note série de potências em $V \Rightarrow$ lógica da teoria de perturbação.

Teoria de Perturbação dependente do tempo

Probabilidade de Transição. O conhecimento de $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ nos leva à

$$|i, t_0 = 0; t\rangle_I = \mathcal{U}_I(t, 0)|i\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\mathcal{U}_I(t, 0)|i\rangle}_{c_n(t)} \Rightarrow \text{vamos explorar isso}$$

Primeiro a conexão entre $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ e $\mathcal{U}(t, t_0)$. Tínhamos definido $|\alpha, t_0; t\rangle_I$,

$$\begin{aligned} \text{tal que } |\alpha, t_0; t\rangle_I &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\alpha, t_0; t\rangle_S = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_S = \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \mathcal{U}(t, t_0) \underbrace{e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\alpha, t_0; t_0\rangle_I}_{\text{o inverso de } |\alpha, t_0; t_0\rangle_I} \end{aligned}$$

o inverso de $|\alpha, t_0; t_0\rangle_I = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\alpha, t_0; t_0\rangle_S$

Comparando com $|\alpha, t_0; t\rangle_I = \mathcal{U}_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I$, temos:

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \mathcal{U}(t, t_0) e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \text{ e assim}$$

$$c_n(t) = \langle n|\mathcal{U}_I(t, t_0)|i\rangle = e^{i\frac{(E_n t - E_i t)}{\hbar}} \langle n|\mathcal{U}(t, t_0)|i\rangle$$

onde $\langle n|\mathcal{U}(t, t_0)|i\rangle$ foi definida em FI001 como amplitude de transição

Teoria de Perturbação dependente do tempo

Assim, $\langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle$ não é bem a amplitude de transição, mas vale:

$$|\langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle|^2 = |\langle n | \mathcal{U}(t, t_0) | i \rangle|^2$$

Se o elemento de matriz for com kets que não são autokets de H_0 , temos, em

$$\text{geral: } |\langle b' | \mathcal{U}_I(t, t_0) | a' \rangle| \neq |\langle b' | \mathcal{U}(t, t_0) | a' \rangle| \Rightarrow \begin{cases} A | a' \rangle = a' | a' \rangle \\ B | b' \rangle = b' | b' \rangle \end{cases} \text{ mas } \begin{cases} [A, H_0] \neq 0 \\ [B, H_0] \neq 0 \end{cases}$$

Caso, precise do elemento envolvendo $| a' \rangle$ e $| b' \rangle$, basta expandir eles na base de autokets de H_0 e utilizar as expressões anteriores.

Retornando à $\langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle$. Normalmente, tomamos $| i, t_0; t_0 \rangle_S = | i \rangle$. com isso,

$$| i, t_0; t_0 \rangle_I = e^{i \frac{H_0 t_0}{\hbar}} | i, t_0; t_0 \rangle_S = e^{i \frac{E_i t_0}{\hbar}} | i, t_0; t_0 \rangle_S.$$

Quando trabalhamos no enfoque de interação, é conveniente tomar:

$| i, t_0; t_0 \rangle_S = e^{-i \frac{E_i t_0}{\hbar}} | i \rangle$ pois, assim $| i, t_0; t_0 \rangle_I = | i \rangle$. Feito isso, temos:

$$| i, t_0; t \rangle_I = \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle = \sum_n | n \rangle \underbrace{\langle n | \mathcal{U}_I(t, t_0) | i \rangle}_{c_n(t)}, \text{ conforme definimos no slide 4.}$$

Teoria de Perturbação dependente do tempo

Série de Dyson

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} V_I(t') V_I(t'') + \dots +$$

$$+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^{(n)})$$

podemos obter por comparação com $c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots$ os seguintes

resultados

$$\left\{ \begin{array}{l} c_n^{(0)} = \delta_{ni} \\ c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | \underbrace{V_I(t')}_{e^{i\frac{H_0}{\hbar}t'} V(t') e^{i\frac{H_0}{\hbar}t'}} | i \rangle dt' = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\frac{(E_n - E_i)}{\hbar}t'} \langle n | V(t') | i \rangle dt' \\ = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t} V_{ni}(t') dt', \text{ onde usamos } \frac{(E_n - E_i)}{\hbar} = \omega_{ni} \\ c_n^{(2)} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n | V_I(t') V_I(t'') | i \rangle = \\ = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{i\omega_{nm}t'} V_{nm}(t') e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t'') \end{array} \right.$$

A probabilidade de transição é então obtida por:

$$P(i \rightarrow n) = |c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots|^2 \quad (\text{para } i \neq n)$$

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } t < 0 \\ V & \text{se } t \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} V \text{ é independente de } t, \text{ mas pode depender} \\ \text{de } \mathbf{x} \text{ e } \mathbf{p}. \end{cases}$$

Se em $t = 0$ o sistema estiver em $|i\rangle$, podemos escrever:

$$c_n^{(0)} = c_n^{(0)}(0) = \delta_{in}$$

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt' = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{1}{i\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}t'} \Big|_0^t = \frac{V_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} (1 - e^{i\omega_{ni}t}) \\ &= \frac{V_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} e^{\frac{i\omega_{ni}t}{2}} \cdot (-2i) \left(\frac{e^{\frac{i\omega_{ni}t}{2}} - e^{-\frac{i\omega_{ni}t}{2}}}{2i} \right) = -\frac{2ie^{\frac{i\omega_{ni}t}{2}} V_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} \sin \frac{\omega_{ni}t}{2} \end{aligned}$$

$$\text{e } \therefore P(i \rightarrow n) = |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \frac{\omega_{ni}t}{2}$$

Suponha que existam muitos estados finais \rightarrow praticamente um contínuo de

energias $\omega \equiv \frac{E_n - E_i}{\hbar}$ com ω variando continuamente. Vamos plotar $\frac{|c_n^{(1)}(t)|^2}{|V_{ni}|^2}$

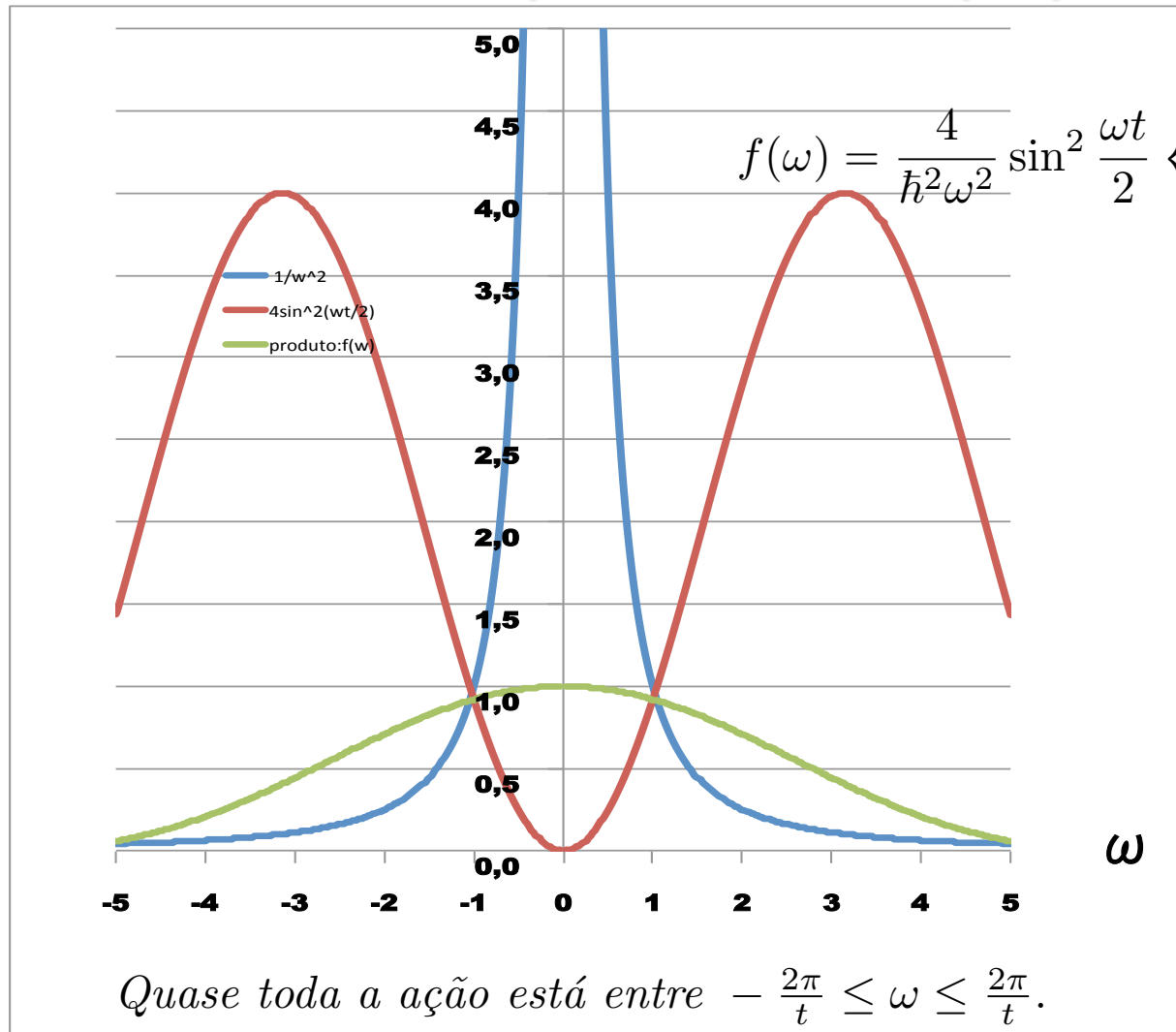
como função de ω para um dado t . Isto é, no slide seguinte apresentamos uma

figura de $f(\omega) = \frac{|c_n^{(1)}(t)|^2}{|V_{ni}|^2} = \frac{4}{\hbar^2\omega^2} \sin^2 \frac{\omega t}{2}$. Note: $\lim_{\omega \rightarrow 0} f(\omega) = \frac{4}{\hbar^2\omega^2} \left(\frac{\omega t}{2}\right)^2 = \frac{t^2}{\hbar^2}$

A amplitude cresce quadraticamente no tempo se $\omega \approx 0$.

Estranho! Porque?

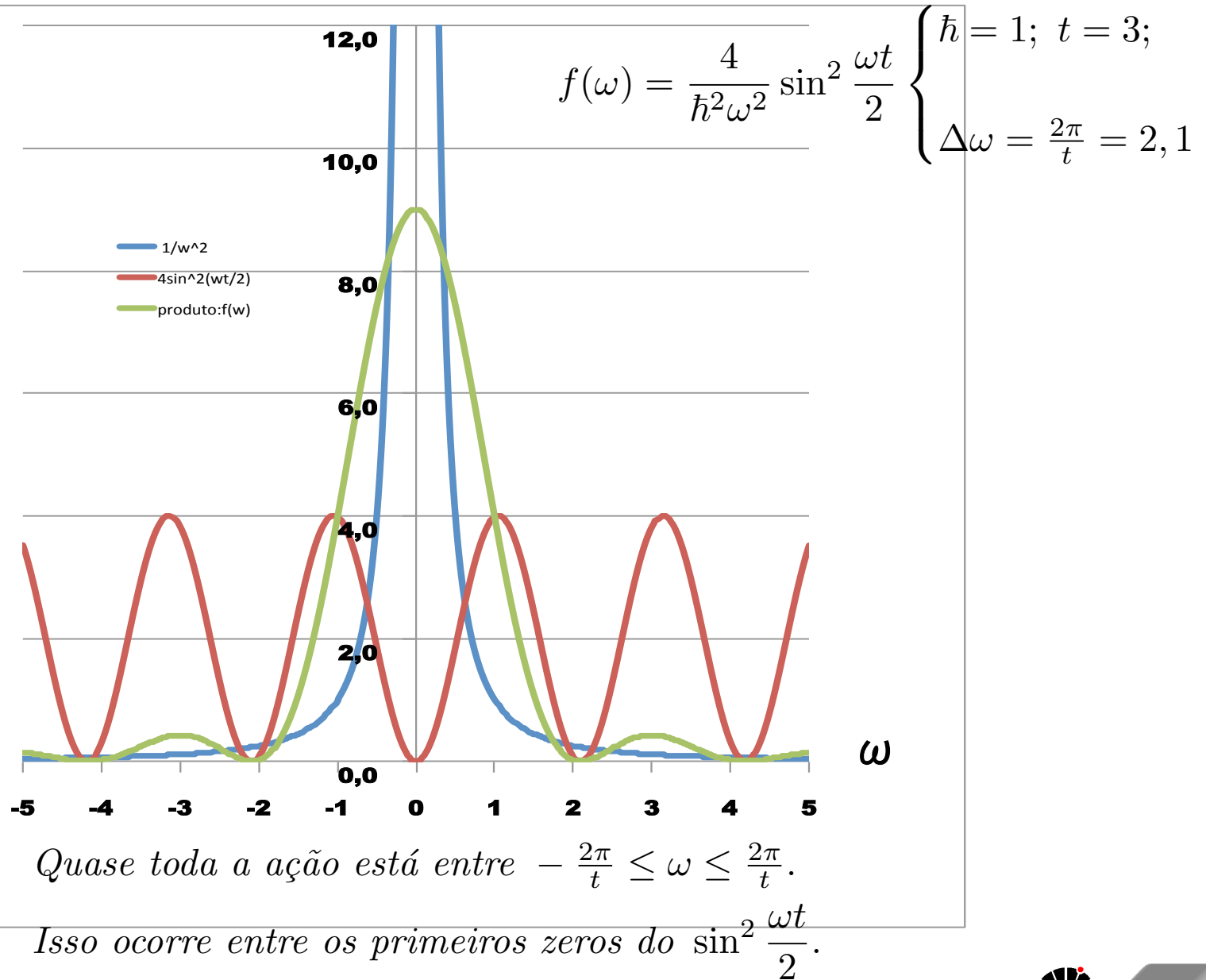
Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



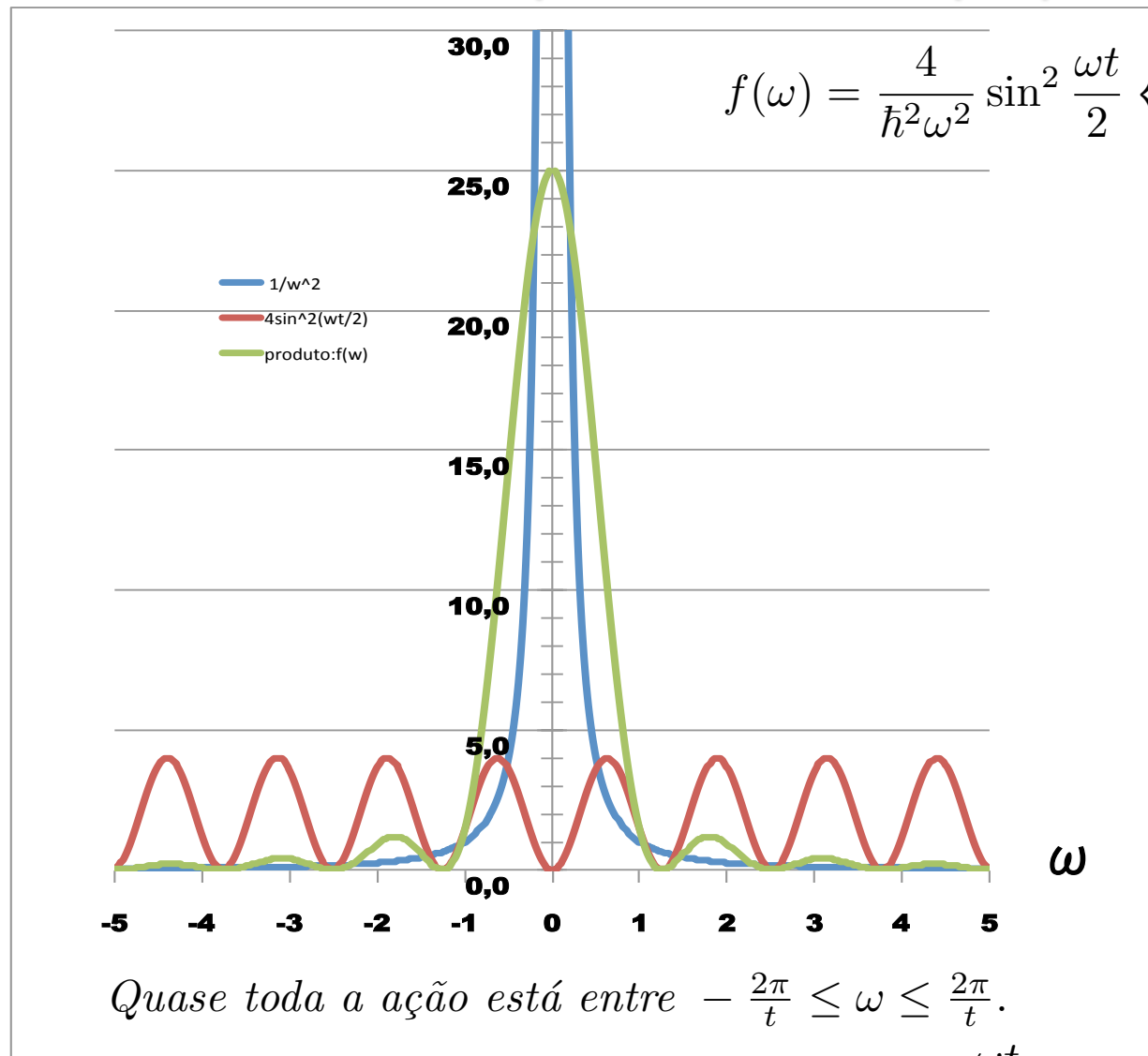
Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2 \frac{\omega t}{2}$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



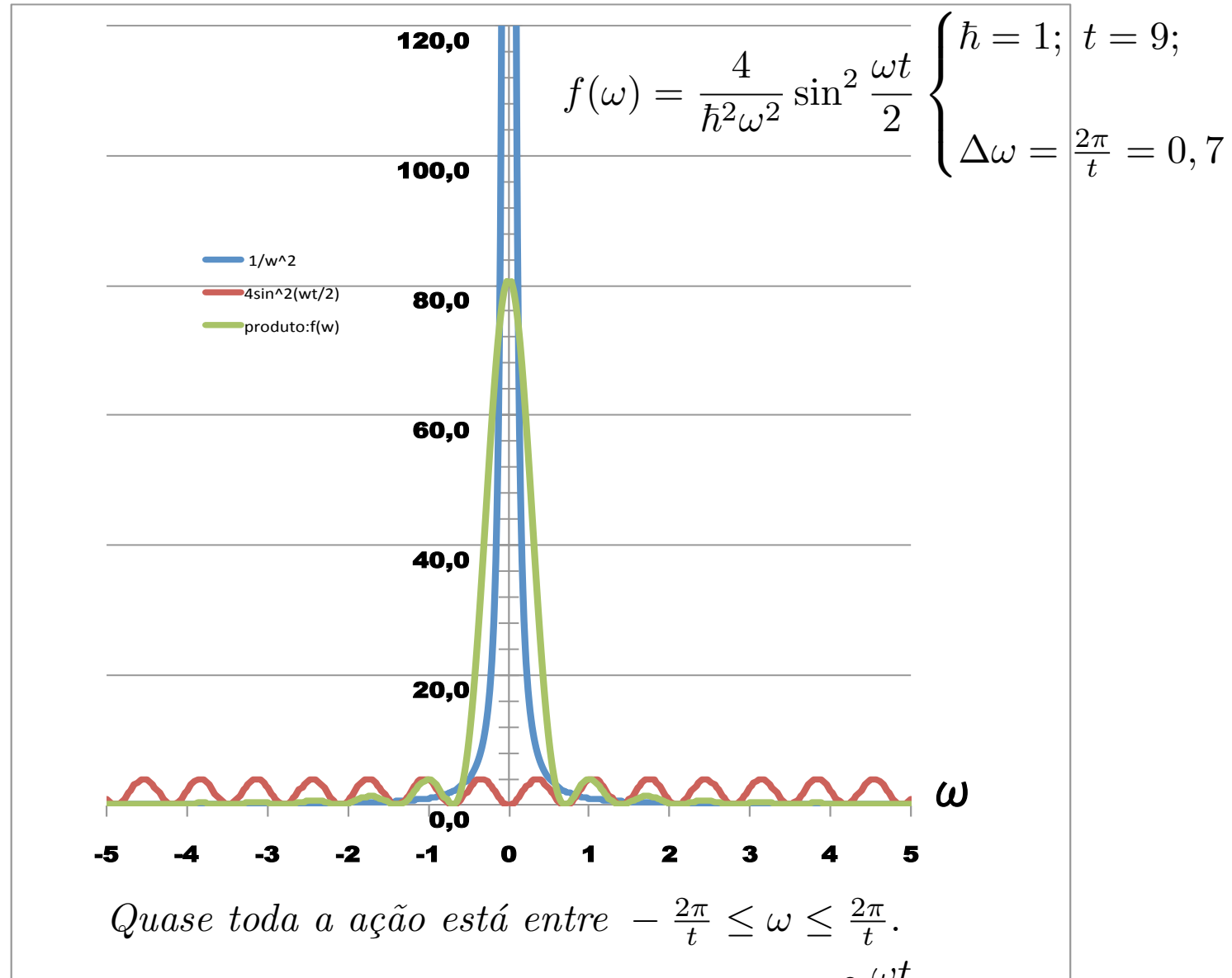
Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2 \frac{\omega t}{2}$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2 \frac{\omega t}{2}$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante

Conclusões:

- Quando t cresce, $f(\omega)$ fica apreciável no intervalo $0 \leq |\omega| \leq \frac{2\pi}{t}$. Isso permite escrever a largura em energia dos estados finais possíveis (estados que podem ser excitados por terem amplitudes de probabilidade relevantes). Para isso, tome $|\omega|_{max} = \frac{E_n^{max} - E_i}{\hbar} = \frac{\Delta E}{\hbar} \sim \frac{2\pi}{t} = \frac{2\pi}{\Delta t}$, onde $\Delta t = t$ é o tempo de potencial ligado. Pode-se expressar isso de uma forma conhecida: $\underbrace{\Delta E \Delta t}_{\text{largura em energia envolvida no processo}} \sim \hbar$.

largura em energia envolvida no processo

- ∴
- Se Δt pequeno: a largura em energia é grande { transições podem violar a conservação de energia
 - Se Δt grande: a largura em energia é pequena { transições respeitam a conservação de energia

- Para transições “finas”, com $E_n = E_i$, temos $|c_n(t)|^2 = \frac{|V_{ni}|^2 t^2}{\hbar^2}$, ou seja, a probabilidade de haver mudança é quadrática em t . Precisamos discutir o significado disso. Antes dessa discussão, na próxima aula, apresentaremos dois exemplos de transições sem perda de energia (para $\Delta E = 0$.)