F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
26/04/2023
Aula 15

Aula passada

Teoria de perturbação independente do tempo: estratégia para encontrar soluções aproximadas da equação de Schrödinger independente do tempo.

$$\boxed{H|\psi\rangle = E|\psi\rangle}$$

$$H = H_0 + W = H_0 + \lambda\hat{W} \;\; (\lambda \ll 1)$$

- H_0 é o Hamiltoniano não perturbado: conhecemos seu auto-valores e auto-vetores.
- W é a perturbação: bem menor que H_0. O parâmetro λ controla o tamanho de W.
- O espectro de H_0 é discreto, com possíveis degenerescências:

$$H_0|\varphi_p^i\rangle = E_p^0|\varphi_p^i\rangle$$

$$\langle\varphi_p^i|H_0 = \langle\varphi_p^i|E_p^0$$

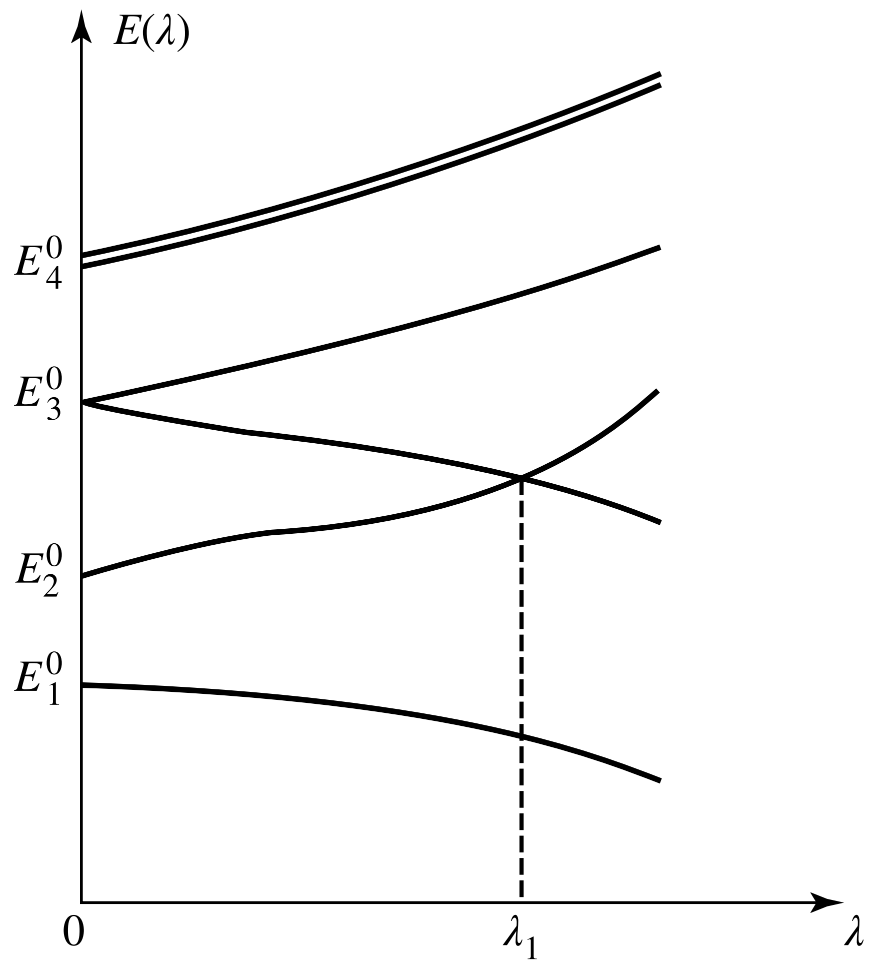
$$\left\langle \varphi_{p'}^{i'} \middle| \varphi_p^i \right\rangle = \delta_{p,p'}\delta_{i,i'} \qquad \text{(ortonormalidade)}$$

$$\sum_p \sum_{i=1}^{g_p} |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i| = \mathbb{1} \qquad \text{(fechamento)}$$

Aula passada

Os diferentes comportamentos possíveis dos auto-valores $E(\lambda)$ como funções da força da perturbação λ.

As degenerescências dos níveis podem ser mantidas ou removidadas ("levantadas")



Aula passada

Expandimos auto-vetores e auto-valores em série de potências de λ:

$$\boxed{\begin{gathered}|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \ldots \\ E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \ldots\end{gathered}}$$

Levando na eq. de Schrödinger e igualando as potências de λ dos dois lados:

$$\left(H_0 + \lambda\hat{W}\right)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$$

$$H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$$

$$\Rightarrow \quad (H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right)|0\rangle = 0$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right)|1\rangle + \varepsilon_2|0\rangle = 0$$

$$\vdots$$

Normalização

VAMOS SUPOR QUE $|\psi(\lambda)\rangle$ É NORMALIZADO:

$$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1$$

$$\Rightarrow \left[\langle 0| + \lambda\langle 1| + \lambda^2\langle 2| + \dots\right]\left[|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \dots\right] = 1$$

$$\forall \lambda$$

$$\lambda^0: \langle 0|0\rangle = 1 \qquad (1)$$

$$\lambda^1: \langle 0|1\rangle + \underbrace{\langle 1|0\rangle}_{(\langle 0|1\rangle)^*} = 0 \quad \Bigg\} \quad Re[\langle 0|1\rangle] = 0 \qquad (2)$$

$$\lambda^2: \underbrace{\langle 0|2\rangle + \langle 2|0\rangle}_{2\,Re[\langle 0|2\rangle] = -\langle 1|1\rangle} + \langle 1|1\rangle = 0 \quad \Bigg\} \quad Re[\langle 0|2\rangle] = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle \qquad (3)$$

Escolha de fase

COMO A FASE DE $|\psi(\lambda)\rangle$ É LIVRE, FAÇO A ESCOLHA:

$$\langle 0|\psi(\lambda)\rangle \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow \langle 0| \left[|0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots \right] \in \mathbb{R}$$ NOTE QUE $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\langle 0|0\rangle + \lambda \langle 0|1\rangle + \lambda^2 \langle 0|2\rangle + \dots \in \mathbb{R}$$

λ^0: $\langle 0|0\rangle \in \mathbb{R}$ JÁ GARANTIDO PELA EQ. (1)

λ^1: $\langle 0|1\rangle \in \mathbb{R}$ ⊕ $\mathrm{Re}[\langle 0|1\rangle] = 0 \Rightarrow \langle 0|1\rangle = 0 = \langle 1|0\rangle$ (4)

λ^2: $\langle 0|2\rangle \in \mathbb{R}$ ⊕ $\mathrm{Re}[\langle 0|2\rangle] = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle$

$$\langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle \quad (5)$$

Equações centrais

$$H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle$$

$$(H_0 - \varepsilon_0) |1\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right) |0\rangle = 0$$

$$(H_0 - \varepsilon_0) |2\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right) |1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle = 0$$

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

$$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$$

$$\langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2} \langle 1|1\rangle$$

PODEMOS / DEVEMOS DISCUTIR SEPARADAMENTE OS CASOS EM QUE OS AUTO-VALORES E_p^0 SÃO $\begin{cases} \text{NÃO DEGENERADOS} \\ \text{DEGENERADOS} \end{cases}$

Caso não degenerado

Correção da energia em primeira ordem: $H_0|\varphi_n\rangle = E_n^0|\varphi_n\rangle \,;\, g_n = 1$

DE $H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle \Rightarrow \varepsilon_0 = E_n^0$ E $|0\rangle = |\varphi_n\rangle$

$\langle 0|0\rangle = 1$ JÁ ESTÁ SATISFEITO POR HIPÓTESE

DA EQ. EM ORDEM λ^1: $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right)|0\rangle = 0$

APLICO $\langle\varphi_n|$ PELA ESQUERDA:

$$\langle\varphi_n|\underbrace{\cancel{(H_0 - E_n^0)}}_{\to 0}|1\rangle + \langle\varphi_n|(\hat{W} - \varepsilon_1)|\varphi_n\rangle = 0 \quad (*)$$

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n^0|\varphi_n\rangle \longrightarrow \langle\varphi_n|H_0 = \langle\varphi_n|E_n^0 \Rightarrow \langle\varphi_n|(H_0 - E_n^0) = 0$$

$$(*) \Rightarrow \boxed{\varepsilon_1 = \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle}$$

$$E(\lambda) = E_n^0 + \lambda\varepsilon_1 + O(\lambda^2) = E_n^0 + \lambda\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle + O(\lambda^2)$$

$$\boxed{E(\lambda) = E_n^0 + \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle + O(\lambda^2)}$$

Correção do estado em primeira ordem:

APLICANDO $\langle \varphi_p^i |$ $(p \neq n)$ EM $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right)|0\rangle = 0$

$$\underbrace{\langle \varphi_p^i | (H_0 - E_n^0) | 1 \rangle}_{\langle \varphi_p^i | (E_p^0 - E_n^0) | 1 \rangle} + \langle \varphi_p^i | (\hat{W} - \varepsilon_1) | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\Rightarrow (E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_p^i | 1 \rangle = - \langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle \quad \text{POIS} \quad \langle \varphi_p^i | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \quad (p \neq n)$$

DE $\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \Rightarrow \langle \varphi_n | 1 \rangle = \langle 1 | \varphi_n \rangle = 0$

$$\Rightarrow |1\rangle = \left(|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i| \right) |1\rangle$$

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} |\varphi_p^i\rangle \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

$\sim W$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\langle \varphi_p^i | \lambda \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + O(\lambda^2)$$

Correção da energia em segunda ordem: APLICANDO $\langle \varphi_n |$ EM

$$(H_0 - \varepsilon_0)\,|2\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right)|1\rangle + \varepsilon_2\,|0\rangle = 0$$

$$\underbrace{\langle \varphi_n | (H_0 - E_n^0) | 2 \rangle}_{\langle \varphi_n | (E_n^0 - E_n^0) | 2 \rangle = 0} + \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{W} - \varepsilon_1 | 1 \rangle}_{\langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle} - \underbrace{\langle \varphi_n | \varepsilon_2 | \varphi_n \rangle}_{\varepsilon_2} = 0$$

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle = \langle \varphi_n | \hat{W} \left(\sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \, |\varphi_p^i\rangle \right)$$

$$= \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p^i \rangle$$

$$\varepsilon_2 = \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + O(\lambda^3)$$

Resumo: caso não degenerado

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\left| \left\langle \varphi_p^i \right| W \left| \varphi_n \right\rangle \right|^2}{E_n^0 - E_p^0} + \mathcal{O}\left(\lambda^3\right)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\left\langle \varphi_p^i \right| W \left| \varphi_n \right\rangle}{E_n^0 - E_p^0} \left| \varphi_p^i \right\rangle + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right)$$

Solução da P1

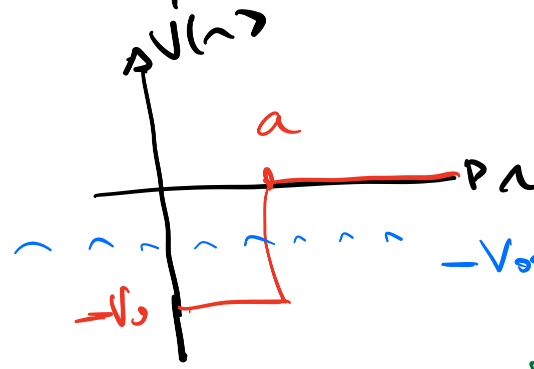
1. Considere os **estados ligados** de uma partícula de massa μ sujeita a um potencial esférico atrativo ($V_0 > 0$)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

(a) Escreva a forma geral da função de onda radial s ($l = 0$), $u_{k,0}(r)$, nas duas regiões, $r < a$ e $r > a$.
(b) Escreva as condições que a função $u_{k,0}(r)$ deve satisfazer em $r = 0$, $r = a$ e $r \to \infty$.
(c) Aplicando as condições do item (b), encontre a equação transcendental que determina as auto-energias. *Não tente resolver a equação transcendental.*

a) $$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \cancelto{0}{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}} + V(r)\right]u_{k,l}(r) = E_{k,l}\,u_{k,l}(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V(r)\right]u_{k,0}(r) = E_{k,0}\,u_{k,0}(r)$$



$-V_0 < E_{k0} < 0$

$\Downarrow$

$0 < E_{k0} + V_0$

$r < a$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} - V_0 - E_{k,0}\right]u_{k,0}(r) = 0$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\underbrace{(V_0 + E_{k,0})}_{>0}\right]u_{k,0}(r) = 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 + E_{k,0})}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow u_{k,0}(r) = A\sin(kr) + B\cos(kr)$$

$r>a$: $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr} - E_{k,0}\right]u_{k,0}(r)=0$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{2\mu E_{k,0}}{\hbar^2}}_{-\rho^2}\right]u_{k,0}(r)=0 \qquad \rho = \frac{\sqrt{2\mu|E_{k,0}|}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow u_{k,0}(r) = C e^{-\rho r} + D e^{+\rho r}$$

b) $r=0 \Rightarrow u_{k,0}(r) \xrightarrow[r\to 0]{} r$ $\boxed{B=0}$

$r\to\infty \Rightarrow u_{k,0}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$ $\boxed{D=0}$

$$\int_0^\infty dr\,|u_{k,0}(r)|^2 = 1$$

EM $r=a$: $u_{k,0}(r)$ E $u'_{k,0}(r)$ SÃO AMBAS CONTÍNUAS

$u_{k,0}(r=a^-) = u_{k,0}(r=a^+) \Rightarrow A \sin(ka) = C e^{-\rho a}$ (1)

$u'_{k,0}(r=a^-) = u'_{k,0}(r=a^+) \Rightarrow kA\cos(ka) = -\rho C e^{-\rho a}$ (2)

c) DIVIDINDO (1) POR (2):

$$\frac{\tan(ka)}{k} = -\frac{1}{\delta}$$

JOGUE AQUI k E δ.

2. Um átomo de hidrogênio é preparado no seguinte estado **normalizado** em $t = 0$

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{2}{\sqrt{9}} R_{n=1,l=0}(r)\, Y_{0,0}(\theta, \phi) + \frac{1}{\sqrt{9}} R_{n=2,l=1}(r)\left[Y_{1,0}(\theta, \phi) - 2Y_{1,-1}(\theta, \phi)\right],$$

onde as $R_{n,l}(r)$ são as funções radiais normalizadas e $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ são os harmônicos esféricos (também normalizados).
(a) Encontre $\psi(\mathbf{r}, t)$, para $t > 0$.
(b) Quais os resultados possíveis de medidas de L_z no instante $t > 0$ e suas probabilidades?
(c) Quais os resultados possíveis de medidas de $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$ no instante $t > 0$ e suas probabilidades?

a) $\psi(\vec{r}, t) = \frac{2}{\sqrt{9}} e^{-iE_1 t/\hbar} R_{1,0} Y_{0,0} + \frac{1}{\sqrt{9}} e^{-iE_2 t/\hbar} R_{2,1}\left[Y_{10} - 2Y_{1,-1}\right]$

ONDE $E_1 = -E_I = -13{,}6\,eV$ $\quad E_2 = -\frac{E_I}{4}$

b) $L_z \to m\hbar$

$m = 0 \quad P_{L_z}(0) = \left|\frac{2}{\sqrt{9}}\right|^2 + \left|\frac{1}{\sqrt{9}}\right|^2 = \frac{5}{9}$

$m = -1 \quad P_{L_z}(-\hbar) = 1 - \frac{5}{9} = \frac{4}{9} = \left|-\frac{2}{\sqrt{9}}\right|^2$

c) $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$
$= \left[\ell(\ell+1) - m^2\right]\hbar^2$

$$\begin{cases} L_x^2 + L_y^2 = 0\hbar^2 \Rightarrow P_{L_x^2+L_y^2}(0) = \left|\frac{2}{\sqrt{9}}\right|^2 = \frac{4}{9} \\ = 2\hbar^2 \Rightarrow P_{L_x^2+L_y^2}(2\hbar^2) = \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{1}{9} \end{cases}$$

$$L_x^2 + L_y^2 = \hbar^2 \Rightarrow P_{L_x^2+L_y^2}(\hbar^2) = \left(1 - \frac{2}{\sqrt{5}}\right)^2 = \frac{4}{5}$$

3. Considere o espalhamento em onda parcial $l = 0$ (onda s) de uma partícula de massa μ e energia

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

por um potencial esférico atrativo $(V_0 > 0)$

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 \equiv -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu}, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

(a) Escreva a função de onda radial para $u_{k,0}(r)$ nas duas regiões, $r < a$ e $r > a$, e encontre as condições que a função $u_{k,0}(r)$ deve satisfazer em $r = a$.
(b) Encontre a equação que a defasagem $\delta_0(k)$ deve satisfazer, a partir do resultado do item (a).
(c) Obtenha a defasagem $\delta_0(k)$ no limite de baixas energias, $ka \ll 1$. Lembre-se que, quando $k \to 0$, $\delta_0(k) \to bk$, onde b é uma constante. Ignore a possibilidade de ressonâncias.
(c) Ignorando a contribuição de todas as ondas parciais com $l > 0$, escreva as expressões das seções de choque diferencial e total em baixas energias, $ka \ll 1$.

(a) $r < a$: $\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E)\right] u_{k,0}(r) = 0$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\right)\right] u_{k,0}(r) = 0$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{(k^2 + k_0^2)}_{g^2}\right] u_{k,0}(r) = 0 \Rightarrow u_{k,0}(r) = A \sin gr \quad (r<a)$$

$r > a$: $\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right] u_{k,0}(r) = 0 \Rightarrow u_{k,0}(r) = B \sin(kr + \delta_0) \quad (r > a)$

ou $= B \sin kr + C \cos kr$

$u_{k,0}(r)$ E $u'_{k,0}(r)$ CONTÍNUAS EM $r=a$?

$$\sin \rho a = B \sin(ka+\delta_0)$$

$$\rho \cos \rho a = kB\cos(ka+\delta_0)$$

b) DIVIDINDO AS DUAS:

$$\frac{\tan \rho a}{\rho} = \frac{\tan(ka+\delta_0)}{k}$$

c) DEFASAGEM PARA $ka \ll 1$ $\quad \rho \to k_0$

$$k \to 0 \quad \frac{\tan k_0 a}{k_0} = \frac{\tan(ka+\delta_0)}{k} \simeq \frac{ka+\delta_0}{k} = a + \frac{\delta_0}{k}$$

$$\delta_0 = -ka + \frac{k}{k_0}\tan k_0 a = k\left[\frac{\tan k_0 a}{k_0} - a\right] = bk$$

d) $$\sigma_k(\theta) = \left[\frac{\tan k_0 a}{k_0} - a\right]^2$$

$$\sigma_k = 4\pi\left[\frac{\tan k_0 a}{k_0} - a\right]^2$$