# F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
03/05/2023
Aula 16

# Aula passada

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

$$H\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \qquad H = H_0 + W = H_0 + \lambda\hat{W} \;\; (\lambda \ll 1)$$

$$H_0\left|\varphi_p^i\right\rangle = E_p^0\left|\varphi_p^i\right\rangle \qquad \left\langle\varphi_{p'}^{i'}\middle|\varphi_p^i\right\rangle = \delta_{p,p'}\delta_{i,i'}$$ (ortonormalidade)

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

Expandimos auto-vetores e auto-valores em série de potências de $\lambda$:

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

$$\left|\psi(\lambda)\right\rangle = \left|0\right\rangle + \lambda\left|1\right\rangle + \lambda^2\left|2\right\rangle + \ldots$$
$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \ldots$$

# Aula passada

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

Normalização e escolha de fase:

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

Se o auto-valor não perturbado $E_n^0$ é não degenerado:

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

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

$$\sum_{p \neq n} \frac{\langle p | W | n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |p\rangle$$

# Exemplo: oscilador harmônico deslocado

$$H = \underbrace{\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2}_{H_0} + \underbrace{\alpha X}_{W}$$

$\alpha$ É PEQUENO

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \lambda\,(\hbar\omega)\left(\frac{X}{b}\right);\quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},\quad \lambda = \frac{b\alpha}{\hbar\omega} = \frac{\alpha}{\sqrt{\hbar m\omega^3}}$$

$\lambda << 1$

$\alpha << \sqrt{\hbar m\omega^3}$

$\alpha = \lambda\sqrt{\hbar m\omega^3}$

DEFINIDO: $\frac{X}{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$

$\Rightarrow H_0 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$; $W = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hbar\omega)(a + a^\dagger)$

SOLUÇÃO EXATA:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(X + \frac{\alpha}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2}$$

NOVO OPERADOR: $X' = X + \frac{\alpha}{m\omega^2} \Rightarrow [X', P] = [X, P] = i\hbar$

$$H + \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X'^2 = \hbar\omega\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n_b + \frac{1}{2}\right)$$

$n_b = 0, 1, 2, \ldots$

AUTO-VALORES DE H SÃO:

$$E_{n_b} = -\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2} + \hbar\omega\left(n_b + \frac{1}{2}\right) \quad ; \quad n_b = 0, 1, 2, \ldots$$

$$E_0 = -\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2} = \frac{1}{2}\frac{1}{\cancel{m\omega^2}}\lambda^2\hbar\omega^{\cancel{2}}m = \frac{\lambda^2}{2}\hbar\omega$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\left[1 - \lambda^2\right] \Rightarrow \boxed{E_{n_b} = \hbar\omega\left[n_b + \frac{1}{2} - \frac{\lambda^2}{2}\right]}$$

TEORIA DE PERTURBAÇÃO:

- EM ORDEM ZERO $(\lambda^0)$:

$$|0\rangle = |\varphi_n\rangle = |n\rangle \quad ; \quad E_n^0 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

- EM ORDEM UM $(\lambda^1)$:

$$E_n^1 = \langle n|W|n\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hbar\omega)\langle n|(a + a^\dagger)|n\rangle =$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hbar\omega)\langle m| \left[ \sqrt{m}\,|m-1\rangle + \sqrt{m+1}\,|m+1\rangle \right] = 0$$

- EM 2ª ORDEM ($\lambda^2$):

$$(p \neq m): \langle p|W|m\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hbar\omega)\langle p|(a+a^\dagger)|m\rangle$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hbar\omega)\langle p| \left[ \sqrt{m}\,|m-1\rangle + \sqrt{m+1}\,|m+1\rangle \right]$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hbar\omega)\left[ \sqrt{m}\,\delta_{p,m-1} + \sqrt{m+1}\,\delta_{p,m+1} \right]$$

$$(p \neq m): E_m^0 - E_p^0 = \hbar\omega\left(m + \cancel{\tfrac{1}{2}}\right) - \hbar\omega\left(p + \cancel{\tfrac{1}{2}}\right) = \hbar\omega(m-p)$$

$$E_m^2 = \sum_{p \neq m} \frac{\lambda^2}{2}(\hbar\omega)^{\cancel{2}} \frac{\left[ \sqrt{m}\,\delta_{p,m-1} + \sqrt{m+1}\,\delta_{p,m+1} \right]^2}{\cancel{\hbar\omega}(m-p)}$$

$$= \frac{\lambda^2}{2}(\hbar\omega)\sum_{p \neq m}\left(\frac{1}{m-p}\right)\left[ m\,\delta_{p,m-1} + (m+1)\,\delta_{p,m+1} + 2\sqrt{m(m+1)}\,\underbrace{\delta_{p,m-1}\delta_{p,m+1}}_{0} \right]$$

$$= \frac{\lambda^2}{2}(\hbar\omega)\left[ \frac{m}{\cancel{m}-(\cancel{m}-1)} + \frac{m+1}{\cancel{m}-(\cancel{m}+1)} \right] = \frac{\lambda^2}{2}(\hbar\omega)\left[ m-(m+1) \right] = -\frac{\lambda^2}{2}(\hbar\omega)$$ ✓

- AUTO-ESTADO ATÉ 1ª ORDEM:

$$\lambda|1\rangle = \sum_{p\neq n} \frac{\langle p|W|n\rangle}{E_n^0 - E_p^0}|p\rangle$$

$$= \sum_{p\neq n} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \frac{\cancel{(\hbar\omega)}\left[\sqrt{n}\,\delta_{p,n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{p,n+1}\right]}{\cancel{\hbar\omega}(n-p)}|p\rangle$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left[\frac{\sqrt{n}}{\underbrace{n-(n-1)}_{1}}|n-1\rangle + \frac{\sqrt{n+1}}{\underbrace{n-(n+1)}_{-1}}|n+1\rangle\right]$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{n}\,|n-1\rangle - \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right]$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |n\rangle + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{n}\,|n-1\rangle - \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right] + O(\lambda^2)$$

# Caso degenerado

EM ORDEM ZERO:

$$H_0 |\varphi_n^i\rangle = E_n^0 |\varphi_n^i\rangle \qquad (i = 1, 2, \dots, g_n > 1)$$

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

$$\varepsilon_0 = E_n^0 \qquad \text{MAS} \qquad |0\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_i |\varphi_n^i\rangle \; (1) \; c_i \in \mathbb{C}$$

DE: $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + \left(\hat{W} - \varepsilon_1\right)|0\rangle = 0$ APLICANDO $\langle\varphi_n^i|$ :

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

$$\Rightarrow \langle\varphi_n^i|\hat{W}|0\rangle = \varepsilon_1 \langle\varphi_n^i|0\rangle$$

USANDO (1):

$$\langle\varphi_n^i|\hat{W}\left(\sum_{j=1}^{g_n} c_j |\varphi_n^j\rangle\right) = \varepsilon_1 \langle\varphi_n^i|\left(\sum_{j=1}^{g_n} c_j |\varphi_n^j\rangle\right) = \varepsilon_1 \sum_{j=1}^{g_n} c_j \delta_{i,j}$$

$$= \varepsilon_1 c_i$$

$$\sum_{j=1}^{g_n} \langle\varphi_n^i|\hat{W}|\varphi_n^j\rangle c_j = \varepsilon_1 c_i$$

$\langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^j \rangle = \hat{W}_{ij}^{(n)}$ É A CHAMADA <u>RESTRIÇÃO</u> DE $\hat{W}$ AO AUTO-SUB-ESPAÇO DO AUTO-VALOR $E_n^0$

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & \begin{matrix} W_{11}^{(n)} & W_{12}^{(n)} \\ W_{21}^{(n)} & W_{22}^{(n)} \end{matrix} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} W_{11}^{(n)} & W_{12}^{(n)} \\ W_{21}^{(n)} & W_{22}^{(n)} \end{pmatrix}$$

É A RESTRIÇÃO

$$\sum_{j=1}^{g_n} \hat{W}_{ij}^{(n)} c_j = \varepsilon_1 c_i$$

EQUAÇÃO DE AUTO-VALOR DE DIMENSÃO $g_n$

$$\begin{pmatrix} & & \\ & \hat{W}^{(n)} & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{g_n} \end{pmatrix} = \varepsilon_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{g_n} \end{pmatrix}$$

ESSA EQ. DE AUTO-VALOR (LEMBRE-SE DE QUE A RESTRIÇÃO $\hat{W}^{(m)}_{ij}$ É HERMITIANA) NOS DARÁ:

$f_n$ AUTO-VALORES $\varepsilon_1^j$ $(j = 1, 2, \ldots, f_n \leq g_n)$

$c_i^j \rightarrow$ AUTO-VETORES

QUE NOS DÃO:

$$E_{n,ij}(\lambda) = E_n^0 + \lambda \varepsilon_1^j + O(\lambda^2)$$ (CORREÇÃO ATÉ 1ª ORDEM)

$$|0\rangle_j = \sum_{i=1}^{g_n} c_i^j |\varphi_n^i\rangle + O(\lambda)$$ (CORREÇÃO ATÉ 0ª ORDEM)

SE $f_n = g_n$ (TODOS OS $\varepsilon_1^j$ SÃO NÃO DEGENERADOS) A PERTURBAÇÃO W QUEBROU COMPLETAMENTE A DEGENERESCÊNCIA DE $E_n^0$. SE $f_n < g_n$, A DEGENERESCÊNCIA FOI QUEBRADA PARCIALMENTE OU NÃO ($f_n = 1$)