F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
29/05/2023
Aula 21

Teoria de perturbação dependente do tempo

Definição do problema

Método aproximativo para Hamiltonianos dependentes do tempo:

PROBLEMAS DO TIPO:

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

H_0 É SUPOSTO SOLÚVEL:

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \qquad \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{m,n} \quad \text{(NÃO DEGENERADO)}$$

QUERO RESOLVER:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = [H_0 + \lambda \hat{W}(t)] |\psi(t)\rangle$$

E COM ELA QUERO CALCULAR: SUPONHA QUE

$|\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle \; (t > 0)$ E PEÇO:

$$P_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2$$

"PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO DE $|\varphi_i\rangle$ PARA $|\varphi_f\rangle$"

O método

EXPANDIMOS $|\psi(t)\rangle$ EM QUALQUER t NA BASE DE AUTO-ESTADOS DE H_0:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t)\,|\varphi_k\rangle \quad ; \quad c_k(t) = \langle \varphi_k|\psi(t)\rangle$$

LEVO NA EQ. DE SCHRÖDINGER:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \sum_k (i\hbar)\,\dot{c}_k(t)\,|\varphi_k\rangle$$

$$[H_0 + \lambda \hat{W}(t)]\,|\psi(t)\rangle = \sum_k [H_0 + \lambda \hat{W}(t)]\,c_k(t)\,|\varphi_k\rangle$$

$$= \sum_k c_k(t)\,[E_k|\varphi_k\rangle + \lambda\,\hat{W}(t)|\varphi_k\rangle]$$

$$\Rightarrow \sum_k (i\hbar)\,\dot{c}_k(t)\,|\varphi_k\rangle = \sum_k c_k(t)\,[E_k|\varphi_k\rangle + \lambda\,\hat{W}(t)|\varphi_k\rangle]$$

MULTIPLICO POR $\langle\varphi_m|$ PELA ESQUERDA:

$$\sum_k (i\hbar)\,\dot{c}_k(t)\,\underbrace{\langle\varphi_m|\varphi_k\rangle}_{\delta_{m,k}} = \sum_k \left[c_k(t)\,E_k\,\underbrace{\langle\varphi_m|\varphi_k\rangle}_{\delta_{m,k}} + \lambda\,c_k(t)\,\langle\varphi_m|\hat{W}(t)|\varphi_k\rangle\right]$$

$$i\hbar\,\dot{c}_n(t) = E_n c_n(t) + \lambda \sum_k c_k(t) \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{W}(t) | \varphi_k \rangle}_{\equiv \hat{W}_{nk}(t)}$$

$$\boxed{i\hbar\,\dot{c}_n(t) = E_n c_n(t) + \lambda \sum_k \hat{W}_{nk}(t) c_k(t)} \quad (1)$$

SUPONHAMOS $\hat{W}(t)=0$:

$$i\hbar\,\dot{c}_n(t) = E_n c_n(t) \Rightarrow c_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} c_n(0)$$

$$c_n(t) \equiv b_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

ESTRATÉGIA: DEFINO:

$$c_n(t) = b_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

LEVO EM (1):

$$\left[i\hbar\,\dot{b}_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar} + \cancel{E_n b_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar}} \right] =$$

$$= \cancel{E_n b_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar}} + \lambda \sum_k \hat{W}_{nk}(t)\, b_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}$$

$$i\hbar\, e^{-iE_n t/\hbar}\, \dot{b}_n(t) = \lambda \sum_k \hat{W}_{nk}(t)\, b_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}$$

$$i\hbar\, \dot{b}_n(t) = \lambda \sum_k e^{i(E_n - E_k)t/\hbar}\, \hat{W}_{nk}(t)\, b_k(t)$$

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$ (FREQUÊNCIAS ANGULARES DE BOHR)

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\, \dot{b}_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t}\, \hat{W}_{nk}(t)\, b_k(t)} \quad (2)$$

APROXIMAÇÃO: EXPANDO $b_n(t)$ EM SÉRIE DE λ

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda\, b_n^{(1)}(t) + \lambda^2\, b_n^{(2)}(t) + \cdots$$

LEVO EM (2):

$$i\hbar\left[\dot{b}_n^{(0)}(t) + \lambda\, \dot{b}_n^{(1)}(t) + \lambda^2\, \dot{b}_n^{(2)}(t) + \cdots\right] =$$

$$= \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t}\, \hat{W}_{nk}(t)\left[b_k^{(0)}(t) + \lambda\, b_k^{(1)}(t) + \lambda^2\, b_k^{(2)}(t) + \cdots\right]$$

EM ORDEM λ^0: $i\hbar \dot{b}_n^{(0)}(t) = 0 \Rightarrow b_n^{(0)}(t) = \text{CONST.} = b_n^{(0)}(0)$

EM ORDEM λ^1: $i\hbar \dot{b}_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t)\, b_k^{(0)}(t)$

EM ORDEM λ^2: $i\hbar \dot{b}_n^{(2)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t)\, b_k^{(1)}(t)$

$\vdots$

EM ORDEM λ^n: $i\hbar \dot{b}_n^{(n)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}(t)} \hat{W}_{nk}(t)\, b_k^{(n-1)}(t)$

A solução em primeira ordem

EM ORDEM ZERO: $b_n^{(0)}(t) = \text{CONST.}$

VAMOS SUPOR QUE A PERTURBAÇÃO $W(t)$ SEJA "LIGADA" EM $t=0$:

$$W(t) = \begin{cases} 0 & \text{SE } t<0 \\ W(t) & \text{SE } t>0 \end{cases}$$

E QUE $|\psi(t)\rangle = |\varphi_i\rangle$ EM $t<0$:

$$b_n(t) = \delta_{ni} \quad \text{SE } t<0$$

EM $t=0^+$, $b_n(t) = \delta_{ni}$ EM TODAS AS ORDENS DE λ.

PARA PROVAR ISSO, INTEGRAMOS (2) NO TEMPO DE $0-\varepsilon, 0+\varepsilon$

$$i\hbar \int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} \dot{b}_n(t)\,dt = \lambda \sum_k \int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} e^{i\omega_{nk}t}\, \hat{W}_{nk}(t)\, b_k(t)\, dt$$

$$\Rightarrow i\hbar\left[b_m(0+\varepsilon) - b_m(0-\varepsilon)\right] = \lambda \sum_k \left[e^{i\omega_{mk}t}\, \hat{W}_{mk}(t)\, b_k(t)\right]_{t_0\in[-\varepsilon,\varepsilon]} (2\varepsilon)$$

$$= \lambda \sum_k \left[e^{i\omega_{mk}t_0}\, \underbrace{\hat{W}_{mk}(t_0)}_{\substack{\text{MÁXIMO DE} \\ \hat{W}_{mk}(t)}}\, b_k(t_0)\right](2\varepsilon) \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 0$$

$$\Rightarrow b_m(0+\varepsilon) = b_m(0-\varepsilon) \Rightarrow b_m(t) \text{ É CONTÍNUA EM } t=0$$

PORTANTO:

$$b_m(0^+) = b_m(0^-) = \delta_{mi}$$ EM TODAS AS ORDENS DE λ

EM ORDEM ZERO:

$$\left[b_m^{(0)}(0^+) + \lambda\, b_m^{(1)}(0^+) + \lambda^2\, b_m^{(2)}(0^+) + \dots\right] = \delta_{mi}$$

$$\Rightarrow \boxed{b_m^{(0)}(0^+) = \delta_{mi} \quad \text{E} \quad b_m^{(n)}(0^+) = 0 \quad n \geq 1}$$ CONDIÇÕES INICIAIS

EM ORDEM ZERO: $b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} = \text{CONST.} \quad (3)$

EM ORDEM UM: $i\hbar\, \dot{b}_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t}\, \hat{W}_{nk}(t)\, b_k^{(0)}(t) \quad (4)$

USANDO (3) EM (4):

$$i\hbar\, \dot{b}_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t}\, \hat{W}_{nk}(t)\, \delta_{ki} = e^{i\omega_{ni}t}\, \hat{W}_{ni}(t) \quad (5)$$

CONDIÇÃO INICIAL: $b_n^{(1)}(0^+) = 0 \quad (6)$

SOLUÇÃO DE (5) SUJEITA À CONDIÇÃO INICIAL (6):

$$\boxed{b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'}\, \hat{W}_{ni}(t')\, dt'} \quad (7)$$

A PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO $|\varphi_i\rangle \longrightarrow |\varphi_f\rangle$:

$$P_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \varphi_f | \sum_k c_k(t) |\varphi_k\rangle|^2$$

$$= |\sum_k c_k(t) \underbrace{\langle \varphi_f | \varphi_k \rangle}_{\delta_{k,f}}|^2 = |c_f(t)|^2 = |b_f(t)|^2$$

SE $f \neq i \Rightarrow b_f(t) = \underbrace{b_f^{(0)}}_{\delta_{fi}=0} + \lambda b_f^{(1)}(t) + O(\lambda^2)$

$$P_{if}(t) = |\lambda b_f^{(1)}(t)|^2 + O(\lambda^3)$$

$$P_{if}(t) \simeq \left| \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \hat{W}_{fi}(t')\, dt' \right|^2$$

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t')\, dt' \right|^2$$

Resultados em primeira ordem

$$b_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'}\hat{W}_{fi}(t')\,dt'$$

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'}W_{fi}(t')\,dt'\right|^2$$