F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023

31/05/2023

Aula 23

Aula passada

Solução aproximada de um problema dependente do tempo com a seguinte forma:

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

Problema de auto-valor de H_0 é suposto resolvido (não degenerado):

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

Sistema é preparado num auto-estado de H_0 e deixado evoluir no tempo:

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle \to |\psi(t)\rangle$$

Pede-se a probabilidade de encontrá-lo num outro auto-estado de H_0 no instante t.

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle|^2}$$

Aula passada

Expande-se o estado na base de H_0

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t)\,|\varphi_k\rangle = \sum_k b_k(t)\,e^{-iE_k t/\hbar}\,|\varphi_k\rangle$$

Encontram-se as equações satisfeitas pelo coeficientes $b_k(t)$

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

$$\hat{W}_{nk}(t) = \langle\varphi_n|\,\hat{W}(t)\,|\varphi_k\rangle$$

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$

Supõe-se uma forma dos coeficientes como série de potências em λ:

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

Aula passada

Em primeira ordem em λ:

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

A probabilidade de transição $|\varphi_i\rangle \longrightarrow |\varphi_f\rangle$

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

Perturbações senoidal e constante

$\hat{W}_1(t) = \hat{W} \sin \omega t$ OU $\hat{W}_2(t) = \hat{W} \cos \omega t$ $(\omega > 0)$

PERTURBAÇÃO CONSTANTE: $\omega \to 0$ EM $\hat{W}_2(t)$

$\hat{W}_1(t) = \frac{\hat{W}}{2i}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right)$ OU $\hat{W}_2(t) = \frac{\hat{W}}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)$

SEGUE QUE, PARA O CASO $\hat{W}_1(t)$:

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} \frac{\hat{W}_{ni}}{2i}\left(e^{i\omega t'} - e^{-i\omega t'}\right) dt'$$

$$= -\frac{\hat{W}_{ni}}{2\hbar}\left[\left.\frac{e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'}}{i(\omega_{ni}+\omega)}\right|_0^t - \left.\frac{e^{i(\omega_{ni}-\omega)t'}}{i(\omega_{ni}-\omega)}\right|_0^t \right]$$

$$= \frac{\hat{W}_{ni}}{2i\hbar}\left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni}+\omega)t}}{\omega_{ni}+\omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\omega_{ni}-\omega} \right]$$

$$\Rightarrow P_{if}(t,\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} - \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

PARA $\hat{W}_2(t)$:

$$P_{if}(t,\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

FINALMENTE, PARA PERTURBAÇÃO CONSTANTE:

$$P_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i\omega_{fi}t}}{\omega_{fi}}\right|^2 = \frac{4|W_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right)$$

$$|1-e^{i\phi}|^2 = 1+1-2\,\mathrm{Re}[e^{i\phi}] = 2[1-\cos\phi] = 4\sin^2\frac{\phi}{2}$$

$$P_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}F(t,\omega_{fi}) \quad \text{ONDE} \quad F(t,\omega) = \frac{4}{\omega^2}\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

Ressonância na probabilidade de transição

CADA TERMO DAS PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO É DA FORMA:

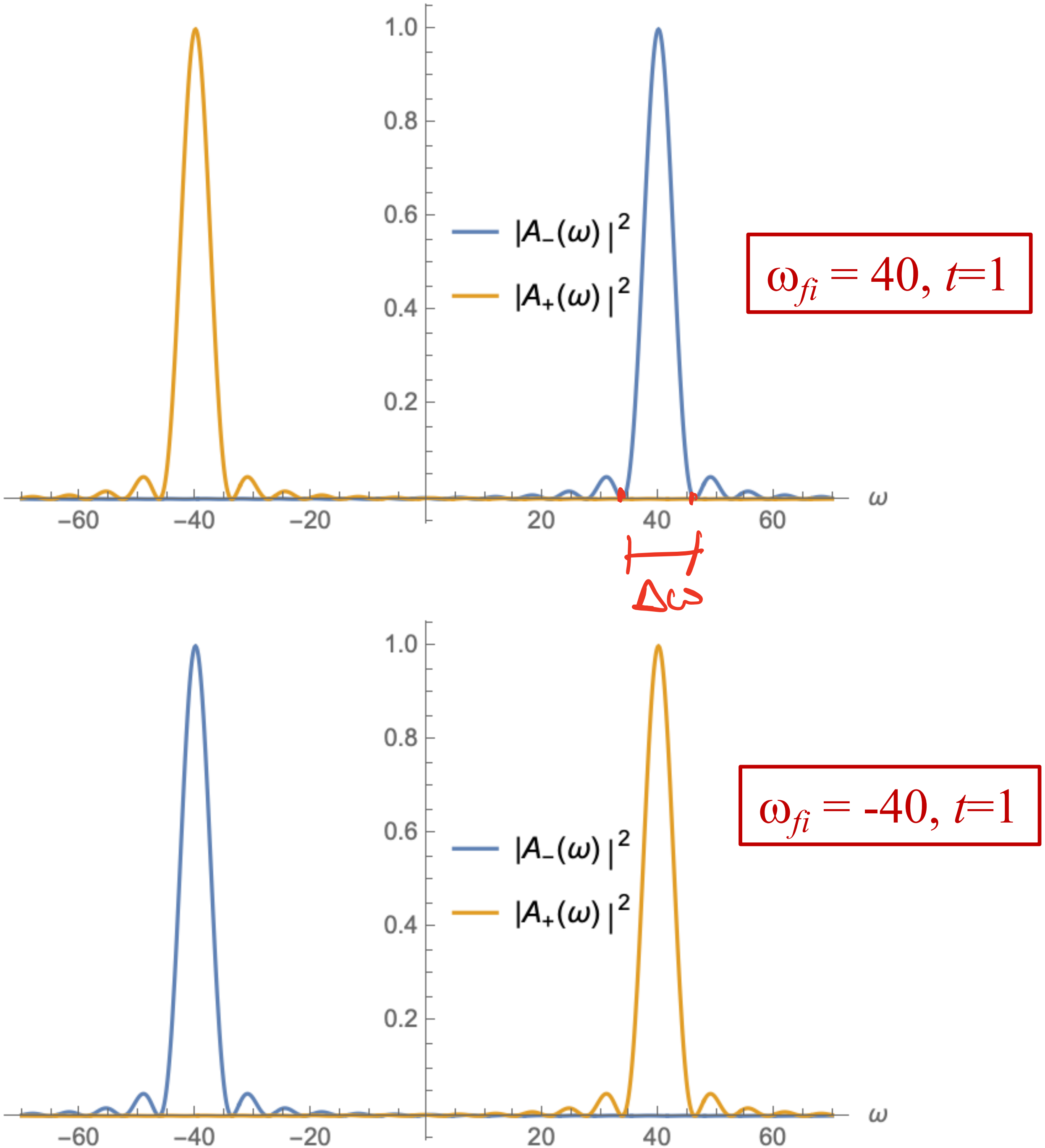
$$\frac{1-e^{i(\omega_{fi}\pm\omega)t}}{\omega_{fi}\pm\omega} = e^{i(\omega_{fi}\pm\omega)t/2}\left[\frac{e^{-i(\omega_{fi}\pm\omega)t/2}-e^{i(\omega_{fi}\pm\omega)t/2}}{\omega_{fi}\pm\omega}\right]$$

$$= -i\,e^{i(\omega_{fi}\pm\omega)t/2}\left[\frac{\sin[(\omega_{fi}\pm\omega)t/2]}{(\omega_{fi}\pm\omega)/2}\right] \equiv A_\pm$$

CLARAMENTE, $A_\pm$ SÃO RESSONANTES (TÊM UM MÁXIMO) EM $\omega = \mp\omega_{fi}$. OU SEJA:

SE $\omega \simeq \omega_{fi}$: $|A_-| \gg |A_+|$

SE $\omega \simeq -\omega_{fi}$: $|A_+| \gg |A_-|$



1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
−60
−40
−20
20
40
60
ω
$|A_-(\omega)|^2$
$|A_+(\omega)|^2$
$\omega_{fi} = 40, t=1$
$\Delta\omega$
$\omega_{fi} = -40, t=1$

Probabilidades perto das ressonâncias

SE OS PICOS SÃO BEM SEPARADOS:

$$2\,|\omega_{fi}| \gg \Delta\omega$$

ONDE $\underline{\Delta\omega}$ É A LARGURA DE CADA PICO, PODEMOS DESPREZAR O TERMO NÃO RESSONANTE FRENTE AO TERMO RESSONANTE:

$$P_{fi}(t,\omega) \cong \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right\}^2 \qquad (\text{SE } \omega \simeq \omega_{fi} > 0)$$

$$P_{fi}(t,\omega) \cong \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}+\omega)t/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2}\right\}^2 \qquad (\text{SE } \omega \simeq -\omega_{fi} > 0)$$

AS PROBABILIDADES NO PICO $[\omega = \pm\omega_{fi}]$ SÃO:

$$P_{fi}(t, \pm\omega_{fi}) = \frac{|W_{fi}|^2\, t^2}{4\hbar^2}$$

Condição para que os picos sejam bem separados

$$2|\omega_{fi}| \gg \Delta\omega$$

ESTIMANDO $\Delta\omega$ COMO A SEPARAÇÃO ENTRE OS PRIMEIROS NÓS DO PADRÃO DE "DIFRAÇÃO":

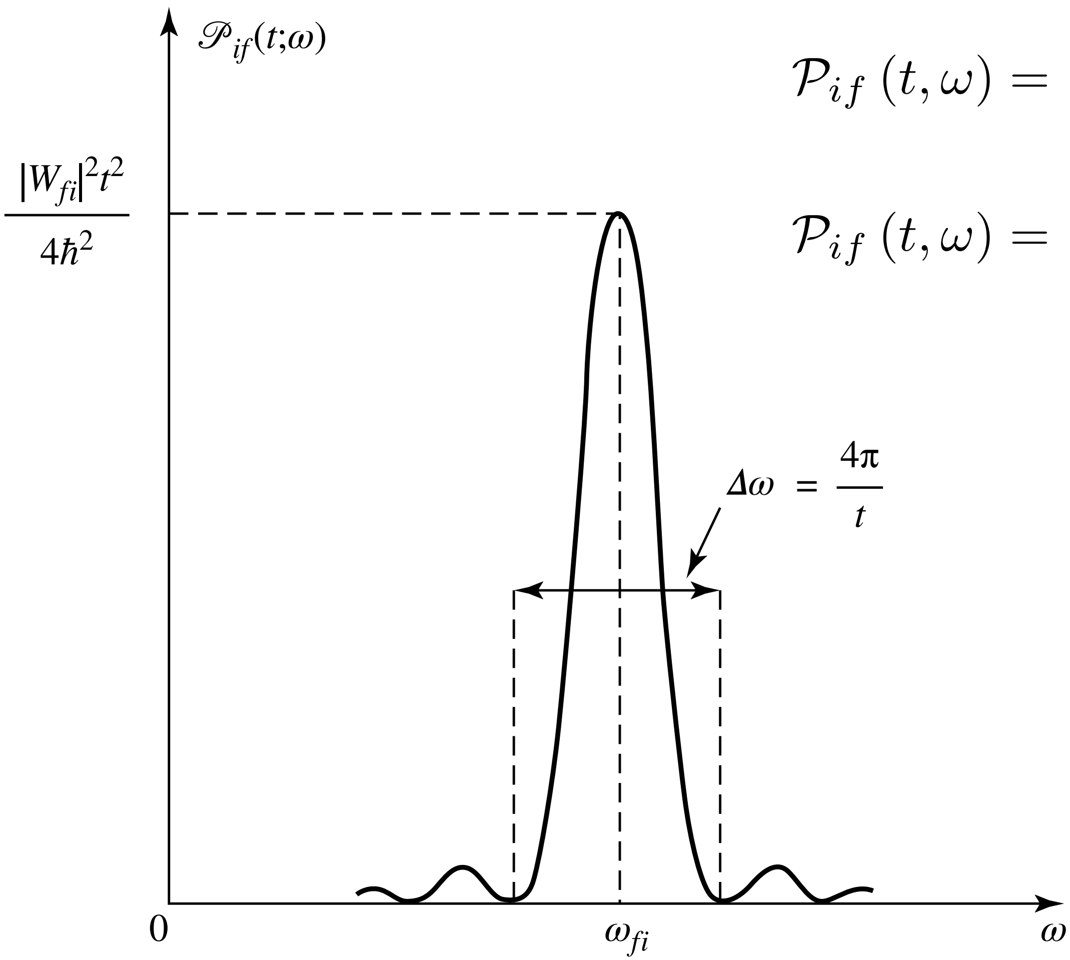
$$|\omega-\omega_{fi}|\frac{t}{2} = \pi \Rightarrow \omega-\omega_{fi} = \pm\frac{2\pi}{t}$$

$$\Rightarrow \Delta\omega = \frac{4\pi}{t}$$

$$\Rightarrow 2|\omega_{fi}| \gg \frac{4\pi}{t} \Rightarrow |\omega_{fi}|t \gg 2\pi \Rightarrow \omega t \gg 2\pi$$

$\Rightarrow$ A PERTURBAÇÃO DEVE OSCILAR VÁRIAS VEZES NO INTERVALO DE TEMPO $\underline{t}$.

Ressonância da probabilidade de transição

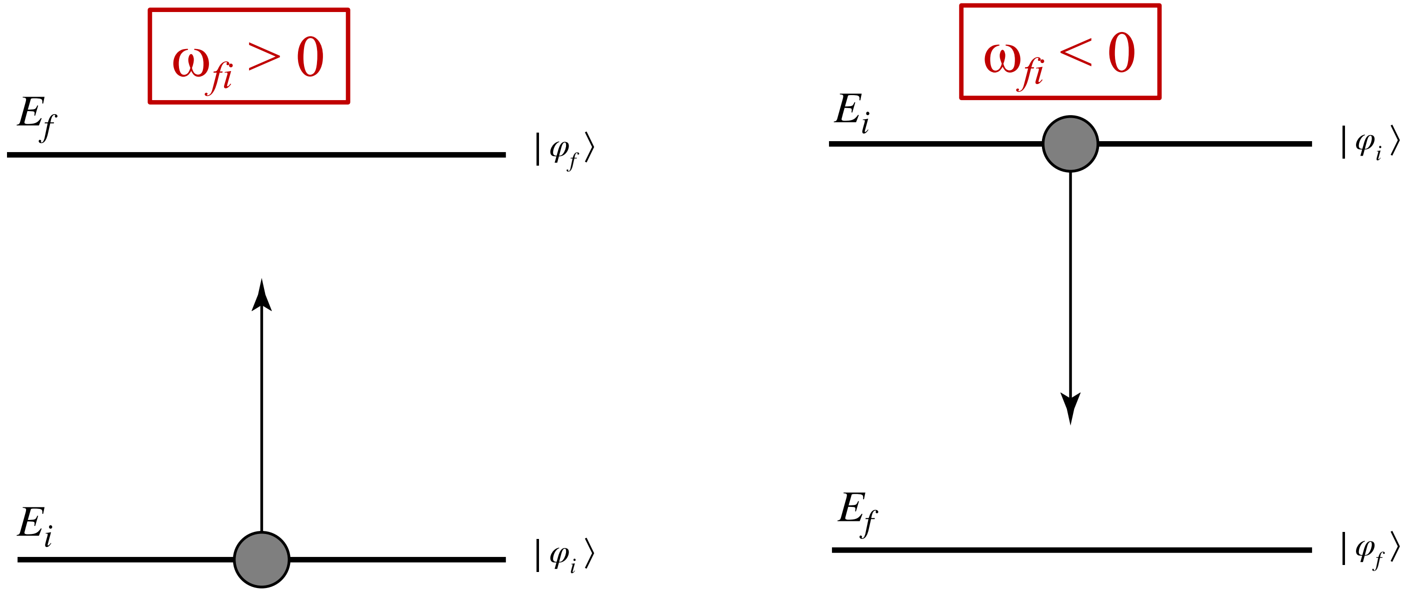


$$\mathcal{P}_{if}\left(t,\omega\right) = \frac{\left|W_{fi}\right|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin\left[\left(\omega_{fi}-\omega\right)t/2\right]}{\left(\omega_{fi}-\omega\right)/2}\right\}^2 \text{ se } \omega_{fi} > 0,$$

$$\mathcal{P}_{if}\left(t,\omega\right) = \frac{\left|W_{fi}\right|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin\left[\left(\omega_{fi}+\omega\right)t/2\right]}{\left(\omega_{fi}+\omega\right)/2}\right\}^2 \text{ se } \omega_{fi} < 0.$$

$$\mathcal{P}_{if}(t,\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin\left[(\omega_{fi}-\omega)\,t/2\right]}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right\}^2 \quad \text{se } \omega_{fi} > 0,$$

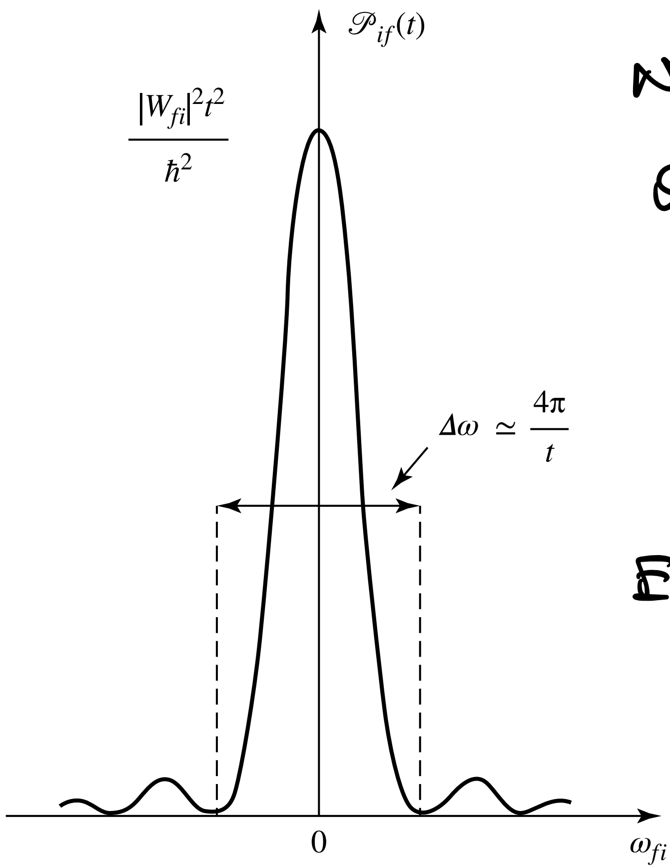
$$\mathcal{P}_{if}(t,\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin\left[(\omega_{fi}+\omega)\,t/2\right]}{(\omega_{fi}+\omega)/2}\right\}^2 \quad \text{se } \omega_{fi} < 0.$$



Perturbação constante

$$P_{fi}(t) = \frac{4|W_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2\left(\frac{\omega_{fi} t}{2}\right) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{fi})$$

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\left[\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2}\right]^2$$



A RESSONÂNCIA, NESSE CASO, OCORRE QUANDO: $\omega_{fi} = 0$

$\Rightarrow E_f = E_i$

INDUZ TRANSIÇÕES ENTRE NÍVEIS DE MESMA ENERGIA.

Validade da teoria de primeira ordem

$$P_{fi}(t, \omega = |\omega_{fi}|) = \frac{|W_{fi}|^2 t^2}{4\hbar^2}$$

UMA ESTIMATIVA DA VALIDADE DE TRUNCAR EM PRIMEIRA ORDEM É:

$$\frac{|W_{fi}|^2 t^2}{4\hbar^2} << 1 \Rightarrow t << \frac{\hbar}{|W_{fi}|}$$

COMPARANDO COM A CONDIÇÃO DE RESSONÂNCIA

$$|\omega_{fi}| t >> 2\pi \Rightarrow t >> \frac{2\pi}{|\omega_{fi}|}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{2\pi}{|\omega_{fi}|} << t << \frac{\hbar}{|W_{fi}|} \Rightarrow \frac{2\pi}{|\omega_{fi}|} << \frac{\hbar}{|W_{fi}|} \Rightarrow |W_{fi}| << |E_f - E_i|$$

Resolução da P2

1. O estado de um elétron é dado, em coordenadas esféricas, pelo spinor

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} R_{2,1}(r)\left[Y_{1,1}(\theta,\phi) - \frac{1}{2}Y_{1,-1}(\theta,\phi)\right] \\ R_{2,1}(r)\,Y_{1,-1}(\theta,\phi) \end{pmatrix},$$

$$\frac{|\psi\rangle}{N} = |2\,1\,1\,+\rangle - \frac{1}{2}|2,1,-1,+\rangle + |2,1,-1,-\rangle$$

onde N é uma constante de normalização, $R_{n,l}(r)$ são as funções radiais **normalizadas** do átomo de hidrogênio e $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ são harmônicos esféricos (que já são normalizados na parte angular).
(a) Encontre N de forma a normalizar o spinor.
(b) Quais são as probabilidades de se medir a componente S_z do spin do elétron como sendo $\hbar/2$ e $-\hbar/2$?
(c) Quais são os possíveis resultados de medidas da componente S_x e quais são suas probabilidades?
(d) O resultado de uma medida da componente L_z do momento angular orbital é $\hbar$. Qual é o spinor **normalizado** logo após a medida?

a) $$\int d^3r \left[|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2\right] = \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega\, |N|^2 |R_{21}(r)|^2 \times$$

$$\times\left[\left|Y_{11} - \frac{1}{2}Y_{1,-1}\right|^2 + \underline{|Y_{1,-1}|^2}\right] = |N|^2 \int d\Omega \left[1 + |Y_{11}|^2 + \frac{|Y_{1,-1}|^2}{4} - \right.$$

$$\left. - 2\,\mathrm{Re}\left[Y_{11}^* Y_{1-1}\right]\right] = |N|^2\left[1 + 1 + \frac{1}{4}\right] = \frac{9}{4}|N|^2 = 1$$

$$|N|^2 = \frac{4}{9} \qquad |N| = \frac{2}{3}$$

b) $P_{S_z}(+\frac{\hbar}{2}) = |N|^2 \int d^3r \; |R_{21}(r)|^2 \; |Y_{11} - \frac{1}{2} Y_{1,-1}|^2$

$$= \frac{5}{9}$$

$$P_{S_z}(-\hbar/2) = \frac{4}{9}$$

c) AUTO-VETORES DE S_x: $+\frac{\hbar}{2} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle] = |+\rangle_x$

$-\frac{\hbar}{2} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle - |-\rangle] = |-\rangle_x$

$$P_{S_x}(\pm\frac{\hbar}{2}) = \int d^3r \; |{}_x\langle \vec{r}, \pm|\psi\rangle|^2$$

$$= \int d^3r \; \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle \vec{r}, +| \pm \langle \vec{r}, -| \right] |\psi\rangle \right|^2$$

$$= \int \frac{d^3r}{2} \; |\psi_+(\vec{r}) \pm \psi_-(\vec{r})|^2 = \begin{cases} +\frac{\hbar}{2} : & \frac{5}{18} \\ -\frac{\hbar}{2} : & \frac{13}{18} \end{cases}$$

d) $N'\begin{pmatrix} R_{21} Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{21} Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix}$

2. Um sistema consiste de dois elétrons cujos graus de liberdade orbitais podem ser ignorados. Considere a base de auto-estados das componentes S_{1z} e S_{2z} dos spins dos elétrons, $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$, onde $\varepsilon_{1,2} = \pm$, tais que

$$S_{1z} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1 \frac{\hbar}{2} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle,$$
$$S_{2z} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_2 \frac{\hbar}{2} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle.$$

O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = \frac{\omega}{\hbar} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2,$$

onde ω é uma constante real.
(a) Encontre todas as auto-energias do sistema e suas degenerescências.
(b) No instante $t = 0$, o estado do sistema é $|\psi(0)\rangle = |+, -\rangle$. Encontre o estado do sistema $|\psi(t)\rangle$, para $t > 0$.
(c) Qual é a probabilidade de se medir simultaneamente S_{1z} e S_{2z} no instante $t > 0$ e obter os resultados $-\frac{\hbar}{2}$ e $\frac{\hbar}{2}$, respectivamente?

a) $\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \Rightarrow$

$$H = \frac{\omega}{2\hbar}\left[\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right] = \frac{\omega}{2\hbar}\left[\vec{S}^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2\right]$$

$$= \frac{\omega}{2\hbar}\left[\vec{S}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\right]$$

$S = 0, 1$

$$\vec{S}^2 = S(S+1)\hbar^2 \begin{cases} S=0: & 0 \quad (1) \rightarrow E_0 = -\frac{3}{4}\hbar\omega \\ S=1: & 2\hbar^2 \quad (3) \rightarrow E_1 = \frac{\hbar\omega}{4} \end{cases}$$

b) $|\psi(0)\rangle = |+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|S=1, M=0\rangle + |S=0, M=0\rangle\right]$

$|S=1, M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle + |-+\rangle\right]$

$|S=0, M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle - |-+\rangle\right]$

$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\frac{\omega t}{4}}|S=1, M=0\rangle + e^{3i\omega t/4}|S=0, M=0\rangle\right]$ ✓

c) $P_{-+} = |\langle -+|\psi(t)\rangle|^2$

$= \frac{1}{2}\left|e^{-i\omega t/4}\underbrace{\langle -+|S=1, M=0\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2}}} + e^{3i\omega t/4}\underbrace{\langle -+|S=0, M=0\rangle}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}\right|^2$

$= \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right).$

3. A posição de uma partícula que está confinada a se mover no plano xy em um círculo de raio fixo é determinada pelo ângulo α que ela faz com o eixo x. As funções de onda da partícula são do tipo $\psi(\alpha)$, $\alpha \in [0, 2\pi)$, e o produto escalar de duas funções de onda $\phi(\alpha)$, $\psi(\alpha)$ é dado por

$$(\phi, \psi) = \int_0^{2\pi} \phi^*(\alpha)\, \psi(\alpha)\, d\alpha.$$

O operador momento angular da partícula em torno do eixo que passa pelo centro do círculo perpendicular ao plano xy pode ser escrito como

$$M = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\alpha}.$$

As auto-funções **normalizadas** de M com auto-valores $m\hbar$ são

$$\varphi_m(\alpha) = \frac{e^{im\alpha}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots).$$

O Hamiltoniano H da partícula é dado por $H = H_0 + W$, onde

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{A}{\hbar^2} M^2, \\ W &= \lambda \cos(2\alpha). \end{aligned}$$

A e λ são constantes reais com dimensão de energia e $\lambda \ll A$.
(a) Quais são as auto-energias de H_0 e suas respectivas degenerescências?
(b) Considere agora o **primeiro estado excitado** de H_0. Use teoria de perturbação e encontre as auto-energias correspondentes de H em primeira ordem em λ e as auto-funções correspondentes em ordem zero em λ.

a) $M \rightarrow m\hbar \Rightarrow H_0 \rightarrow E_m = \frac{A}{\hbar^2}(m\hbar)^2 = Am^2$

$m = 0$: $E_0 = 0 \Rightarrow g_0 = 1$

$m \neq 0$: $E_m = Am^2 \Rightarrow g_{m\neq 0} = 2$

b) $m = \pm 1$ $\quad \varphi_1(\alpha) = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2\pi}} \quad \varphi_{-1}(\alpha) = \frac{e^{-i\alpha}}{\sqrt{2\pi}}$

MATRIZ DE H NO SUB-ESPAÇO DE $\varphi_1(\alpha)$ E $\varphi_{-1}(\alpha)$

$W_{-1,-1}$, $W_{1,1}$, $W_{1,-1}$, $W_{-1,1}$

$$W_{11} = \int_0^{2\pi} \varphi_1^*(\alpha) \lambda \cos(2\alpha) \varphi_1(\alpha)\, d\alpha$$

$$= \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\alpha)\, d\alpha = 0 = W_{-1,-1}$$

$$W_{1,-1} = \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\alpha} \cos(2\alpha) e^{-i\alpha}\, d\alpha$$

$$= \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-2i\alpha} \left[\frac{e^{2i\alpha} + e^{-2i\alpha}}{2} \right] d\alpha = \frac{\lambda}{2} = W_{-1,1}$$

$$W = \frac{\lambda}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\lambda}{2}\sigma_x$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|m=1\rangle \pm |m=-1\rangle\right)$$

$$E_\pm = E_{m=\pm 1} \pm \frac{\lambda}{2} = A \pm \frac{\lambda}{2}$$

$$\langle \alpha | \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1(\alpha) \pm \varphi_{-1}(\alpha)\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[e^{i\alpha} \pm e^{-i\alpha}\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{Bmatrix} \cos\alpha \\ i\sin\alpha \end{Bmatrix}$$