F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
05/06/2023
Aula 23

Aulas passadas

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:

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

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.

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

Aulas passadas

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:

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

Aulas passadas

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 $i \to f$

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

Aula passada

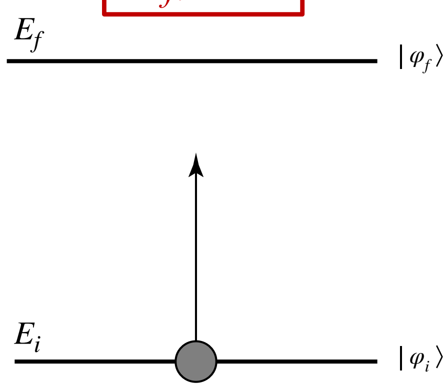
Perturbação senoidal: $\hat{W}_s(t) = \hat{W}\sin\omega t,\ \hat{W}_c(t) = \hat{W}\cos\omega t,$ $(\omega > 0)$

Se $\omega \approx |\omega_{fi}| \gg \dfrac{2\pi}{t}$ (ressonância):

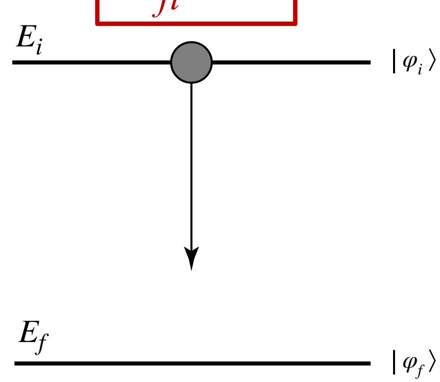
$$\mathcal{P}_{if}(t,\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin\left[(\omega_{fi}-\omega)t/2\right]}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right\}^2 \quad \text{se } \omega_{fi} > 0,$$

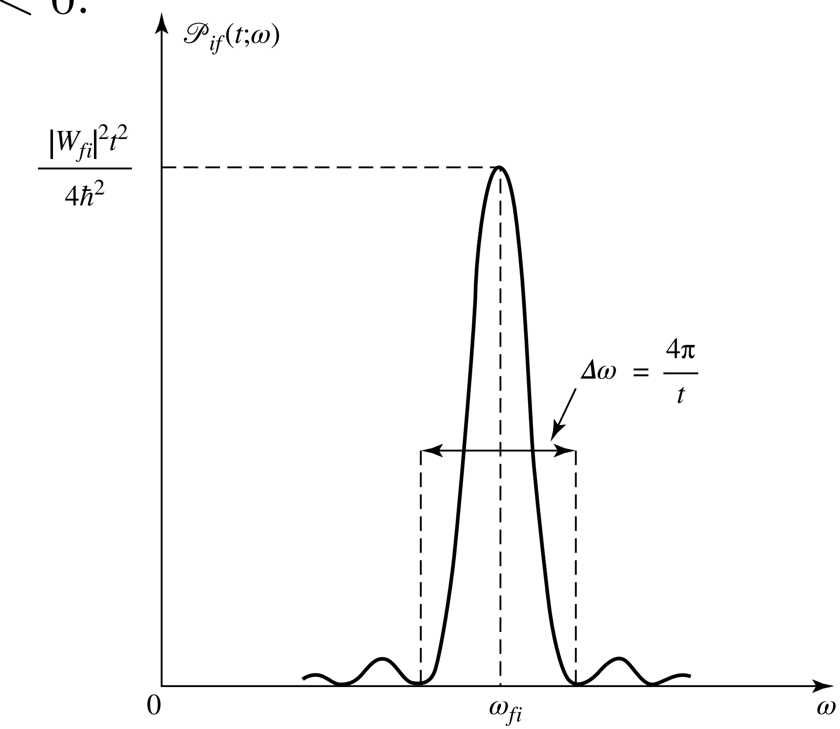
$$\mathcal{P}_{if}(t,\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{\sin\left[(\omega_{fi}+\omega)t/2\right]}{(\omega_{fi}+\omega)/2}\right\}^2 \quad \text{se } \omega_{fi} < 0.$$

$\boxed{\omega_{fi} > 0}$



$\boxed{\omega_{fi} < 0}$

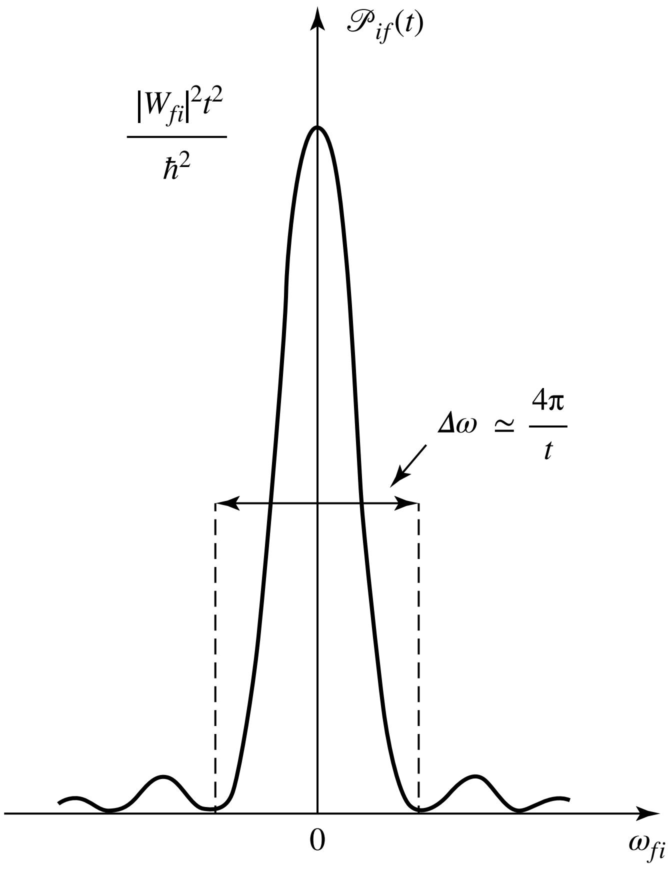




Aula passada

Perturbação constante: $\hat{W}_0\,(t) = \hat{W}$

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



Transição entre estados de mesma energia.

Aula passada

Condição de validade da teoria de perturbação de 1a. ordem: tempos curtos

$$t \ll \frac{2\hbar}{|W_{fi}|}$$

Condição de validade para expressão ressonante: tempos longos

$$t \gg \frac{2\pi}{|\omega_{fi}|} = \frac{2\pi\hbar}{|E_f - E_i|}$$

Só são compatíveis se:

$$\boxed{|W_{fi}| \ll |E_f - E_i|}$$

Acoplamento com estados do contínuo

ASSUMIMOS ATÉ AGORA QUE $|\varphi_i\rangle$ E $|\varphi_f\rangle$ SÃO AMBOS ESTADOS LIGADOS. MAS, VÁRIAS SITUAÇÕES FÍSICAS ENVOLVEM ESTADOS FINAIS NA REGIÃO DE ESTADOS DO CONTÍNUO, COMO:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

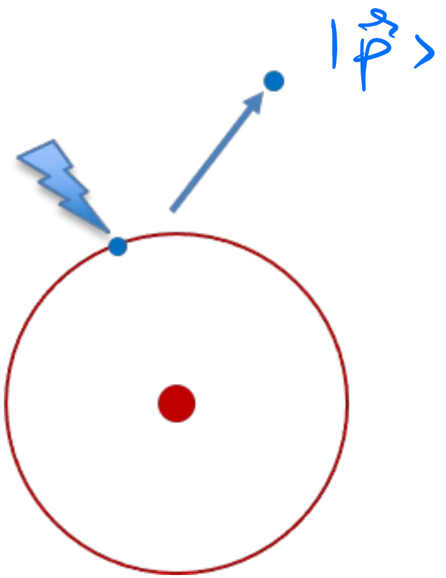
OU

$|\psi_{\vec{p}}^{(+)}\rangle$ (ESTADOS DE ESPALHAMENTO)

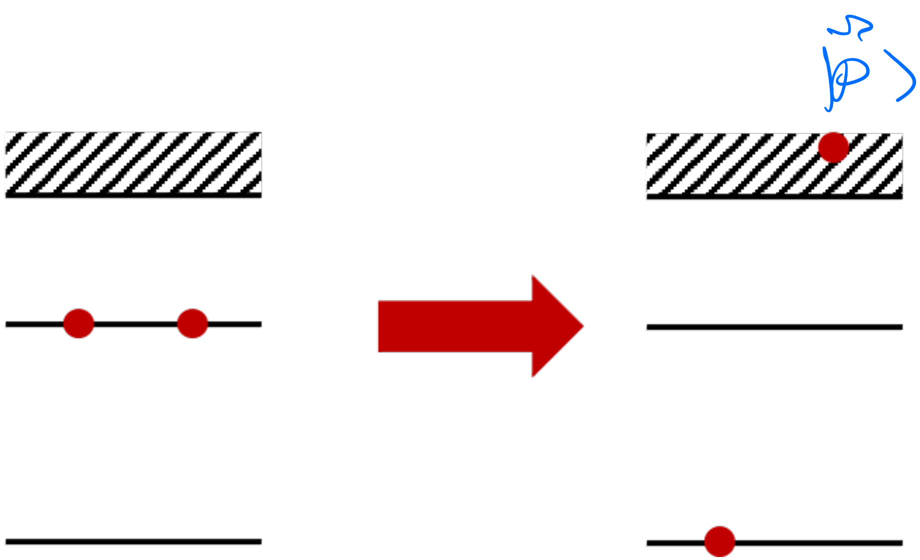
Exemplos

Acoplamento com estados do contínuo:

a) Fotoionização (efeito fotoelétrico): radiação eletromagnética incidente "arranca" um elétron e ioniza o átomo.



b) Auto-ionização (efeito Auger): um estado ligado decai num estado com um elétron em nível mais baixo e outro elétron ejetado pra fora do átomo; átomo de Hélio $2s^2 \rightarrow 1s, 1\mathbf{p}$. A perturbação é o próprio H.



SUPONHAMOS QUE NO ESTADO FINAL O ELÉTRON SEJA EJETADO NUM ESTADO DE ONDA PLANA:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

SE A ENERGIA CINÉTICA $\frac{\vec{p}^2}{2m}$ DO ELÉTRON EJETADO É GRANDE O SUFICIENTE, É UMA BOA APROXIMAÇÃO USAR COMO ESTADO FINAL UMA ONDA PLANA E NÃO O ESTADO DE ESPALHAMENTO $\psi^{(+)}_{\vec{p}}(\vec{r})$ QUE LEVA EM CONTA O POTENCIAL COULOMBIANO DO ÁTOMO IONIZADO.

NESSE CASO, DEVEMOS OBTER UMA <u>DENSIDADE</u> DE PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO:

$$dP(\vec{p},t) = |\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle|^2 d^3p$$

MEDIDAS TÍPICAS DETECTAM O FOTOELÉTRON COM UMA CERTA ENERGIA NO INTERVALO $[E_f, E_f+\delta E_f]$ CUJO MOMENTO LINEAR ESTÁ NUM CERTO ÂNGULO SÓLIDO $\delta\Omega_f$

$$d^3p = p^2\, d\Omega\, dp \qquad d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

SE $E_f = \dfrac{p_f^2}{2m} \Rightarrow dE_f = \dfrac{p_f}{m}\, dp_f$

$$p_f^2\, dp_f = \frac{m}{\cancel{p_f}}\, p_f^{\cancel{2}}\, dE_f = m\, p_f\, dE_f = m\sqrt{2mE_f}\, dE_f$$

$$\Rightarrow d^3p_f = p_f^2\, dp_f\, d\Omega_f = m\sqrt{2mE_f}\, dE_f\, d\Omega_f \equiv \rho(E_f)\, dE_f\, d\Omega_f$$

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = m\sqrt{2mE}$$: DENSIDADE DE ESTADOS POR INTERVALO DE ENERGIA

ASSIM:

$$dP(\vec{p}_f, t) = |\langle \vec{p}_f | \psi(t) \rangle|^2 \rho(E_f)\, dE_f\, d\Omega_f$$

A PROBABILIDADE DO ELÉTRON SER DETECTADO EM $[E_f, E_f + \delta E_f]$ COM MOMENTO LINEAR NA DIREÇÃO $\delta\Omega_f$

$$\delta P(\vec{p}, t) = \int_{\substack{\Omega_f \in [\Omega_f, \Omega_f + \delta\Omega_f] \\ E_f \in [E_f, E_f + \delta E_f]}} |\langle \vec{p}_f | \psi(t) \rangle|^2 \rho(E_f)\, dE_f\, d\Omega_f$$

Perturbação constante

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

$|\varphi_f\rangle \longrightarrow |\vec{p}_f\rangle$

$P_{if}(t) \longrightarrow dP(\vec{p}, t)$

$$W_{fi} = \langle \vec{p}_f | W | \varphi_i \rangle = \langle \Omega_f, E_f | W | \varphi_i \rangle$$

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

$$dP(t) = \frac{|\langle \Omega_f, E_f | W | \varphi_i \rangle|^2}{\hbar^2} F\left(t, \frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) \rho(E_f)\, dE_f\, d\Omega_f$$

ONDE $F(t, \omega) = \left[\frac{\sin(\omega t/2)}{\omega/2}\right]^2$

$$\delta P(t) = \int_{\substack{\Omega \in \delta\Omega_f \\ E_f \in \delta E_f}} \frac{|\langle \Omega_f, E_f | W | \varphi_i \rangle|^2}{\hbar^2} F\left(t, \frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) \rho(E_f)\, dE_f\, d\Omega_f$$

COMO $F(t,\omega) \longrightarrow (2\pi t)\,\delta(\omega)$ QUANDO $t \to \infty$, ELA "FILTRA" O INTEGRANDO EM $E_f = E_i$

$$F(t,\omega) = 4\,\frac{\sin^2(\omega t/2)}{\omega^2} = 2\pi t \left[\frac{\sin^2(\omega t/2)}{\pi t\, \omega^2/2}\right] \xrightarrow[t\to\infty]{} 2\pi t\,\delta(\omega)$$

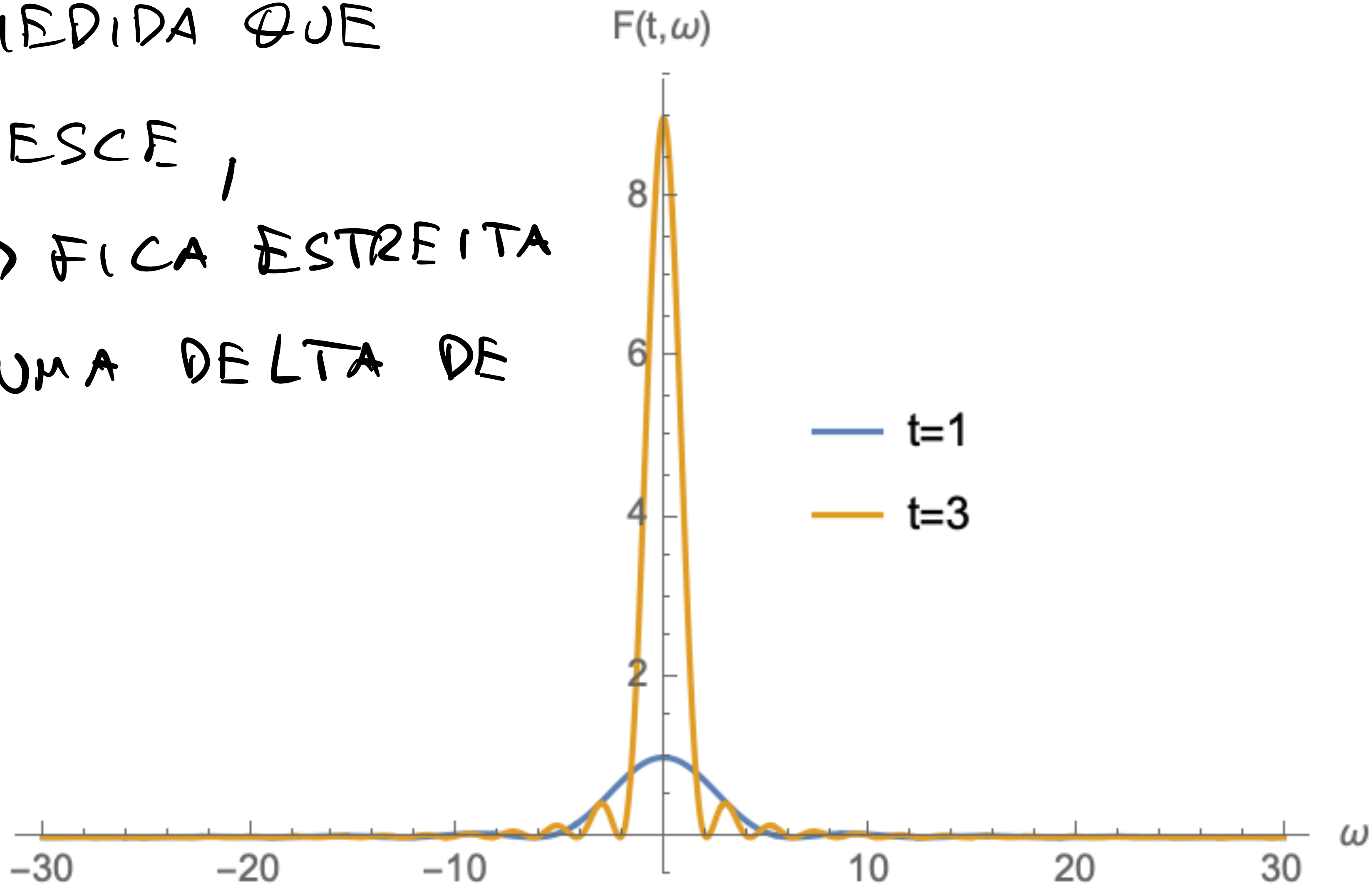
(EQ. 11 DO APÊNDICE II DO COHEN)

$$\delta P(t) = \int \frac{|\quad|^2}{\hbar^2}\, 2\pi t\, \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) \rho(E_f)\, dE_f\, d\Omega_f$$

$$= \int_{\Omega_f \in \delta\Omega_f} \frac{|\langle \Omega_f, \overset{=E_i}{E_f} | W | \varphi_i \rangle|^2}{\hbar}\, 2\pi t\, \rho(E_f = E_i)\, d\Omega_f$$

$$\delta\left(\frac{x}{a}\right) = |a|\,\delta(x)$$

À MEDIDA QUE t CRESCE, $F(t,\omega)$ FICA ESTREITA COMO UMA DELTA DE DIRAC



SE O INTERVALO $\delta\Omega_f$ É MUITO PEQUENO:

$$\delta P(t) = \frac{2\pi}{\hbar} t \, |\langle \Omega_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \, \delta(E_f - E_i) \, \delta\Omega_f$$

DEFINIMOS UMA TAXA DE TRANSIÇÃO POR UNIDADE DE TEMPO:

$$W(\varphi_i, \Omega_f) = \frac{d \, \delta P(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Omega_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \, \delta\Omega_f$$

FINALMENTE, PODE-SE DEFINIR UMA TAXA DE TRANSIÇÃO POR UNIDADE DE TEMPO POR UNIDADE DE ÂNGULO SÓLIDO:

$$w(\varphi_i, \Omega_f) = \frac{W(\varphi_i, \Omega_f)}{\delta\Omega_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Omega_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

"REGRA DE OURO DE FERMI"

PARA O CASO DE UMA PERTURBAÇÃO SENOIDAL:

$$w(\varphi_i, \Omega_f) = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle \Omega_f, E_f = E_i + \hbar\omega | W | \varphi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f = E_i + \hbar\omega)$$

Interação de um átomo com ondas eletromagnéticas (complemento A_{XIII})

O HAMILTONIANO DE UM ELÉTRON NUM ÁTOMO NA PRESENÇA DE CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS:

ESCOLHA DE CALIBRE

$$H = \frac{1}{2m}\left[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R},t)\right]^2 + V(R) - \frac{q}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{R},t) + \cancel{q\Phi(\vec{R},t)}$$

$A(\vec{r},t)$ É O POTENCIAL VETOR QUE DÁ ORIGEM AOS CAMPOS $\vec{E}(\vec{r},t)$ E $\vec{B}(\vec{r},t)$.

$\Phi(\vec{r},t)$ É O POTENCIAL ESCALAR

$\frac{q}{m}\vec{S} = g\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S} = \vec{M} \Rightarrow$ MOMENTO MAGNÉTICO DO ELÉTRON DEVIDO AO SPIN $(g=2)$ $\left(\mu_B = \frac{q\hbar}{2m}\right)$

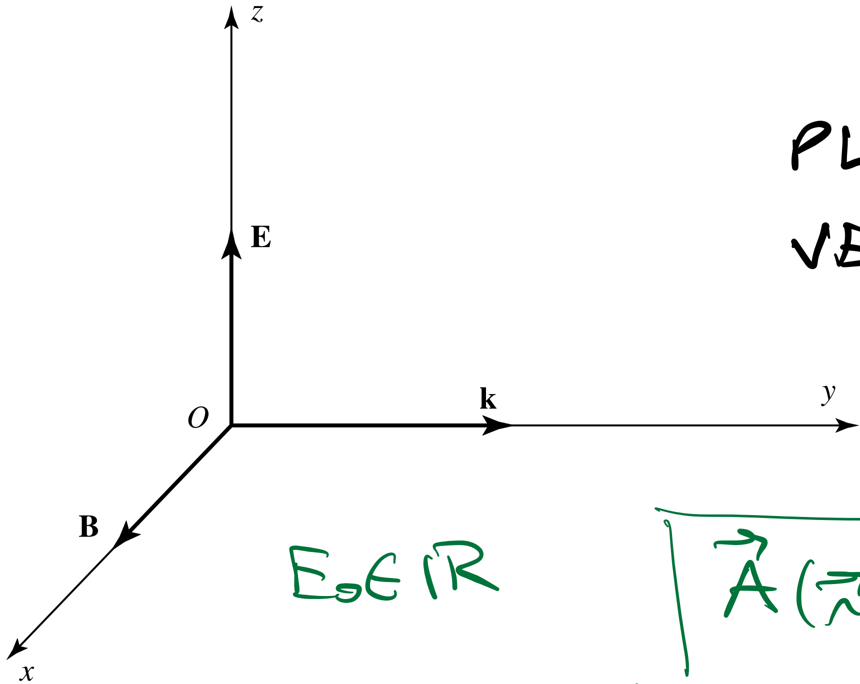
$$-\frac{q}{m}\vec{S}\cdot\vec{B} = -\vec{M}\cdot\vec{B}$$

$$\vec{E}(\vec{x},t) = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{B}(\vec{x},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

PODEMOS ESCOLHER TRABALHAR NO CALIBRE ("GAUGE") EM QUE $\Phi(\vec{x},t) = 0$

Onda eletromagnética



ONDA ELETROMAGNÉTICA PLANA DE FREQUÊNCIA ω E VETOR DE ONDA $\vec{k} = k\hat{y}$ COM $\boxed{\omega = ck}$

$\vec{E} \parallel \hat{z}$, $\vec{B} \parallel \hat{x}$

PARA ISSO, POSSO ESCOLHER:

$E_0 \in \mathbb{R}$

$$\boxed{\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{E_0}{\omega}\sin(ky-\omega t)\hat{z}} \; ; \; \Phi(\vec{r},t) = 0$$

$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = E_0\cos(ky-\omega t)\hat{z}$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{\nabla}\times\vec{A} = -\cancelto{0}{\frac{\partial A_z}{\partial x}}\hat{y} + \frac{\partial A_z}{\partial y}\hat{x} = \frac{kE_0}{\omega}\cos(ky-\omega t)\hat{x}$$

$$= \frac{E_0}{c}\cos(ky-\omega t)\hat{x} \equiv B_0\cos(ky-\omega t)\hat{x} \; ; \; B_0 = \frac{E_0}{c}$$

VETOR DE POYNTING: $\vec{S} = \varepsilon_0 c^2 \vec{E} \times \vec{B} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B}$

$$\Rightarrow \vec{S} = \varepsilon_0 \cancel{c^2} \left(\frac{E_0^2}{\cancel{c}} \right) \cos^2(ky - \omega t)\, \hat{y}$$

MÉDIA TEMPORAL DE $\vec{S}$:

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{\varepsilon_0 c E_0^2}{2} \hat{y}$$ ONDE USAMOS $\langle \cos^2(ky-\omega t)\rangle = \frac{1}{2}$

O VETOR DE POYNTING APONTA NA DIREÇÃO DE PROPAGAÇÃO DA ONDA E SEU MÓDULO DÁ A QUANTIDADE DE ENERGIA POR UNIDADE DE TEMPO (OU SEJA, POTÊNCIA) POR UNIDADE DE ÁREA TRANSVERSAL À DIREÇÃO DE PROPAGAÇÃO TRANSMITIDA PELA ONDA.