AULA 4 - TEORIA DE PERTUBAÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO

Mário Malcolms de Oliveira

Espectro não degenerado

Considere partícula carregada de carga q e massa m se movendo em uma dimensão numa armadilha ótica harmônica com frequência ω na presença de um campo elétrico externo E fraco (pense nisso!!) na direção x. A Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + qEx. \tag{1}$$

a) Encontre a expressão exata para os níveis de energia de (1).

Como temos um termo linear e um quadático em x, vamos completar quadrados. Lembre-se que

$$(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2 \tag{2}$$

logo, reescrevendo (1) como

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + \frac{2qE}{m\omega^2}x\right), \tag{3}$$

identificamos $a = x$ e portanto

$$2xb = \frac{2qE}{m\omega^2}x \Rightarrow b = \frac{qE}{m\omega^2}. \tag{4}$$

Adicionando e subtraindo (4) ao quadrado em (3), obtemos:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left[x^2 + \frac{qE}{m\omega^2}x + \left(\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2 - \left(\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2\right] \\ \Rightarrow H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \frac{qE}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \tag{5}$$

Denotando $\eta = x + \frac{qE}{m\omega^2}$ $\left(\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial\eta^2} = \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$ (derivada que aparece na representação em coordenadas cartesianas do operador momento), temos

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\eta^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2} \\ \Rightarrow E_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2} \end{aligned} \tag{6}$$

Note que a ação do campo elétrico foi deslocar os níveis de energia do oscilador.

b) Tratando $H_E = qEx$ como uma pertubação aos níveis do oscilador harmônico, calcule a primeira correção não nula e compare-a com o resultado exato obtido em (a).

Como estamos analisando o oscilador harmônico, devemos expressar o operador x em termos dos operadores criação e aniquilação (a e $a^\dagger$):

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a + a^\dagger\right). \tag{7}$$

Baseados em (7), notamos que a correção de primeira ordem é nula:

$$E_n^{(1)} = \langle n |x| n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left\langle n \left| \left(a + a^\dagger\right) \right| n \right\rangle = 0, \tag{8}$$

pois

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle , \tag{9}$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle , \tag{10}$$

$$\langle m |n\rangle = \delta_{mn}. \tag{11}$$

Já a correção de segunda ordem é dada por

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle m |H_E| n\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \\ &= q^2E^2 \sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle m |x| n\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \tag{12}$$

Usando (7), (8) e (9), obtemos que a ação do operador x no estado $|n\rangle$ é dada por

$$\begin{aligned} x |n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a + a^\dagger\right) |n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\, |n-1\rangle + \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle\right). \end{aligned} \tag{13}$$

Usando a ortonormalidade dos autoestados do oscilador harmônico, eq.(11), obtemos o elemento de matriz em (12):

$$\langle m |x| n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right) \tag{14}$$

Note que a eq.(14) nos diz que os únicos estados que contribuem para o somatório dado um nível de energia n são os estados dos níveis de energia $n+1$ e $n-1$!!

Agora, usando a expressão para os autoenergias do oscilador harmônico, encontramos que

$$E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)} = -\hbar\omega, \tag{15}$$

$$E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)} = \hbar\omega. \tag{16}$$

(Lembre-se que os níveis de energia do oscilador harmônico são igualmente espaçados !!).

Por fim, substituindo (14), (15) e (16) em (12) chegamos que

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= q^2 E^2 \left[\frac{|\langle n+1 \,|x|\, n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{|\langle n-1 \,|x|\, n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} \right] \\ &= \frac{\hbar q^2 E^2}{2m\omega} \left(-\frac{n+1}{\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega} \right) \\ &= -\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \tag{17}$$

Logo, os espectro do oscilador corrigido devido à presença do campo elétrico é dado por

$$\begin{aligned} E_n &\approx E_n^{(0)} + E_n^{(2)} \\ &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}, \end{aligned} \tag{18}$$

e nesse caso, coincide com a solução exata encontrada em (6).

Espectro degenerado

Considere que um dado sistem descrito pela Hamiltoniana H_0 esteja sujeito à uma pertubação descrita por H_p:

$$H_0 = E_0 \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \; H_p = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{19}$$

com $\lambda \ll E_0$.

Encontre as autoenergias da Hamiltoniana total $H = H_0 + H_p$ em PRIMEIRA ORDEM de pertubação.

Primeiramente, notamos que a Hamiltoniana não pertubada H_0 possui um autovalor não degenerado $E_1^{(0)} = 5E_0$ e outro autovalor triplamente degenerado $E_2^{(0)} = E_3^{(0)} = E_4^{(0)} = 3E_0$ e os autovetores correspondentes são

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \ |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \ e \ |\psi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

A correção do nível não degenerado é dada por

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_1 | H_p | \psi_1 \rangle = 0. \tag{21}$$

Note que o resultado anterior, eq.(21), já era esperado pois a matriz da pertubação descrita em (19) mistura apenas estados cujos espectro é degenerado (não podemos aplicar o formalismo utilizado no caso *não degenerado*).

A matriz que representa a pertubação no subspaço degenerado é dada por

$$\tilde{H}_p = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2\lambda \\ 0 & 2\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Diagonalizando (22), obtemos

$$E_2^{(1)} = 0, \tag{23}$$

$$E_3^{(1)} = 2\lambda, \tag{24}$$

$$E_4^{(1)} = -2\lambda, \tag{25}$$

e portanto, as autoenergias corrigidas são

$$E_1 = 5E_0, \tag{26}$$

$$E_2 = 3E_0 + 2\lambda, \tag{27}$$

$$E_3 = 3E_0 - 2\lambda, \tag{28}$$

$$E_4 = 3E_0. \tag{29}$$

Notamos que nesse caso, a pertubação H_p foi capaz que quebrar toda a degenerescência do sistema, ou seja, na presença de H_p, encontramos quatro autovalores não degenerados.(Diagonalize exatamente a matriz H e veja o que acontece !)