AULA 5 - TEORIA DE PERTUBAÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO

Mário Malcolms de Oliveira

Considere dois prótons localizados ao longo do eixo z e separados por uma distância d, sujeitos a um campo magnético externo ao longo do mesmo eixo. A Hamiltoniana que descreve os sistema é dada por

$$H_0 = -\left(\vec{m}_1 + \vec{m}_2\right) \cdot \vec{B}, \tag{1}$$

onde

$$\vec{m}_1 = \frac{g_p \mu_n}{\hbar} \vec{S}_1, \tag{2}$$

$$\vec{m}_2 = \frac{g_p \mu_n}{\hbar} \vec{S}_2 \tag{3}$$

são os momentos magnéticos dos prótons 1 e 2, respectivamente. g_p é o chamado fator giromagnético do próton e μ_n é o magneto nuclear de Bohr.

a) Desconsiderando qualquer interação entre os prótons, encontre os níveis de energia e os autoestados do problema.

Usando as eqs.(2) e (3) e o fato de que $\vec{B} = B\hat{z}$, podemos escrever a Hamiltoniana (1) como

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{g_p \mu_n}{\hbar} \left(\vec{S}_1 + \vec{S}_2\right) \cdot \vec{B} \\ &= -\frac{g_p \mu_n B}{\hbar} \left(S_1^z + S_2^z\right). \end{aligned} \tag{4}$$

Notamos que o operador que aparece na Hamiltoniana (4) é o momento angular total na direção z, isto é, $J^z = S_1^z + S_2^z$, e com isso, escrevemos

$$H_0 = -\frac{g_p \mu_n B}{\hbar} J^z. \tag{5}$$

Já sabemos da *teoria de soma de momento angular* que os estados de tripleto e singleto descrevem os estados de duas partículas de spin 1/2. Esses estados são dados por

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle - |-+\rangle\right), \tag{6}$$

$$|1,1\rangle = |++\rangle, \tag{7}$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle + |-+\rangle\right), \tag{8}$$

$$|1,-1\rangle = |--\rangle. \tag{9}$$

Logo, os autovalores da Hamiltonian (5) podem ser escritos como

$$H_0 \left|j, m_j\right\rangle = -g_p \mu_n B m_j \left|j, m_j\right\rangle,$$

e com isso, obtemos que

$$H_0 |0,0\rangle = E_0^{(0)} |0,0\rangle = 0, \tag{10}$$

$$H_0 |1,1\rangle = E_1^{(0)} |1,1\rangle = -g_p \mu_n B |1,1\rangle, \tag{11}$$

$$H_0 |1,0\rangle = E_2^{(0)} |1,0\rangle = 0, \tag{12}$$

$$H_0 |1,-1\rangle = E_3^{(0)} |1,-1\rangle = g_p \mu_n B |1,-1\rangle. \tag{13}$$

Note que o autovalor $E_0^{(0)} = E_2^{(0)} = 0$ é duplamente degenerado.

b) Considere agora que os prótons interajam via uma interação magnética dipolar dada por

$$H_{dip} = \frac{1}{r^3}\left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - \frac{3}{r^2}\left(\vec{m}_1 \cdot \vec{r}\right)\left(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}\right)\right], \tag{14}$$

onde $\vec{r}$ é o vetor que conecta os dois prótons. Expresse essa interação em termos dos operadores $\vec{J}^2$ e J_z.

Escrevendo $\vec{r} = d\hat{z}$ e usando as eqs. (2) e (3), podemos escrever (14) como

$$\begin{aligned} H_{dip} &= \frac{g_p^2\mu_n^2}{\hbar^2}\frac{1}{d^3}\left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - \frac{3}{d^2}\left(\vec{S}_1 \cdot d\hat{z}\right)\left(\vec{S}_2 \cdot d\hat{z}\right)\right] \\ &= \frac{g_p^2\mu_n^2}{\hbar^2 d^3}\left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3S_1^z S_2^z\right]. \\ &= \lambda\left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3S_1^z S_2^z\right], \end{aligned} \tag{15}$$

onde $\lambda = \frac{g_p^2\mu_n^2}{\hbar^2 d^3}$. Usando a definição do vetor de momento angular total $\left(\vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2\right)$ e do momento angular total na direção z ($J^z = S_1^z + S_2^z$), obtemos que

$$\vec{J}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \Rightarrow \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right), \tag{16}$$

$$\left(J^z\right)^2 = \left(S_1^z\right)^2 + \left(S_2^z\right)^2 + 2S_1^z S_2^z \Rightarrow S_1^z S_2^z = \frac{1}{2}\left[\left(J^z\right)^2 - \left(S_1^z\right)^2 - \left(S_2^z\right)^2\right]. \tag{17}$$

Agora, note que no caso de um problema cujo spin da partícula é 1/2, podemos escrever

$$\vec{S}_i^2\left|1/2, 1/2; j, m_j\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|1/2, 1/2; j, m_j\right\rangle \tag{18}$$

e

$$\left(S_i^z\right)^2\left|1/2, \pm 1/2\right\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\left|1/2, \pm 1/2\right\rangle, \tag{19}$$

onde $i = 1, 2$. Com isso, reescrevemos (16) e (17) como

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{\vec{J}^2}{2} - \frac{3}{4}\hbar^2, \tag{20}$$

$$S_1^z S_2^z = \frac{\left(J^z\right)^2}{2} - \frac{\hbar^2}{4}. \tag{21}$$

Substituindo (20) e (21) em (15), obtemos

$$H_{dip} = \frac{\lambda}{2}\left[\vec{J}^2 - 3\left(J^z\right)^2\right]. \tag{22}$$

c) Considerando H_{dip} como uma pertubação, calcule a correção dos níveis de energia em primeira ordem de teoria de pertubação.

Como o espectro do problema possui autovalores degenerados e não degenerados, consideraremos os dois casos separadamente.

(A) Autovalores não degenerados ($E_1^{(0)}$ *e* $E_3^{(0)}$):

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} = \langle 1,1 \left| H_{dip} \right| 1,1 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \left\langle 1,1 \left| \left[\vec{J}^2 - 3 \left(J^z\right)^2 \right] \right| 1,1 \right\rangle, \\ &= -\frac{\lambda}{2} \hbar^2, \\ &= -\frac{g_p^2 \mu_n^2}{2d^3}. \end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned} E_3^{(1)} = \langle 1,-1 \left| H_{dip} \right| 1,-1 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \left\langle 1,-1 \left| \left[\vec{J}^2 - 3 \left(J^z\right)^2 \right] \right| 1,-1 \right\rangle, \\ &= -\frac{g_p^2 \mu_n^2}{2d^3}. \end{aligned} \tag{24}$$

(B) Autovalores degenerados $\left(E_0^{(0)} \; e \; E_2^{(0)}\right)$:

A matriz da interação no subspaço degenerado é dada por:

$$\tilde{H}_{dip} = \begin{pmatrix} \langle 0,0 \left| H_{dip} \right| 0,0 \rangle & \langle 0,0 \left| H_{dip} \right| 1,0 \rangle \\ \langle 1,0 \left| H_{dip} \right| 0,0 \rangle & \langle 1,0 \left| H_{dip} \right| 1,0 \rangle \end{pmatrix}. \tag{25}$$

Baseado na eq. (22), notamos que a interação não mistura estados com diferentes valores de momento angular total, isto é, autovalores do operador $\vec{J}^2$, e portanto, concluimos que

$$\langle 1,0 \left| H_{dip} \right| 0,0 \rangle = \langle 0,0 \left| H_{dip} \right| 1,0 \rangle = 0. \tag{26}$$

Os termos diagonais são dados por

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} = \langle 0,0 \left| H_{dip} \right| 0,0 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \left\langle 0,0 \left| \left[\vec{J}^2 - 3 \left(J^z\right)^2 \right] \right| 0,0 \right\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} = \langle 1,0 \left| H_{dip} \right| 1,0 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \left\langle 1,0 \left| \left[\vec{J}^2 - 3 \left(J^z\right)^2 \right] \right| 1,0 \right\rangle \\ &= \frac{g_p^2 \mu_n^2}{d^3}. \end{aligned} \tag{28}$$

Logo, a correção em primeira ordem em teoria de pertubação do espectro do problem é dada por

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = 0, \tag{29}$$

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} = -g_p \mu_n \left(\frac{g_p \mu_n}{2d^3} + B \right), \tag{30}$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} = \frac{g_p^2 \mu_n^2}{d^3}, \tag{31}$$

$$E_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)} = g_p \mu_n \left(\frac{g_p \mu_n}{2d^3} - B \right). \tag{32}$$

A interação dipolar foi capaz de quebrar toda a degenerescência que havia no sistema.