TEORIA DE PERTURBAÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO

UM DOS PROBLEMAS CENTRAIS EM MECÂNICA QUÂNTICA É RESOLVER A EQ. DE SCH. INDEPENDENTE DO TEMPO. MAS SÃO POUQUÍSSIMOS OS CASOS EM QUE É POSSÍVEL RESOLVÊ-LA EXATAMENTE. PORTANTO, PRECISAMOS DESENVOLVER APROXIMAÇÕES. TEORIA DE PERTURBAÇÃO É UMA DESSAS ESTRATÉGIAS.

DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

VAMOS ASSUMIR QUE O HAMILTONIANO DE INTERESSE É DA FORMA:

$$H = H_0 + W$$

ONDE CONHECEMOS OS AUTO-VALORES E AUTO-VETORES DE H_0 (CHAMADO DE "HAMILTONIANO NÃO PERTURBADO") MAS NÃO DE H. W É CHAMADO DE "PERTURBAÇÃO" E ELE É, NALGUM SENTIDO, "PEQUENO" EM RELAÇÃO A H_0 (VAMOS CARACTERIZAR MELHOR ESSA CONDIÇÃO MAIS ADIANTE).

PARA QUANTIFICAR EXPLICITAMENTE ESSA CONDIÇÃO, VAMOS ESCREVER

$$W = \lambda \hat{W} \qquad \text{ONDE} \qquad \lambda \ll 1$$

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W}$$

NOSSOS RESULTADOS SERÃO ESCRITOS COMO SÉRIES DE POTÊNCIAS DE λ.

VAMOS ASSUMIR QUE O ESPECTRO DE H_0 É DISCRETO E ESCREVEMOS:

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^{(i)}\rangle \qquad \begin{array}{l} p = 1, 2, \dots \\ i = 1, 2, \dots g_p \end{array}$$

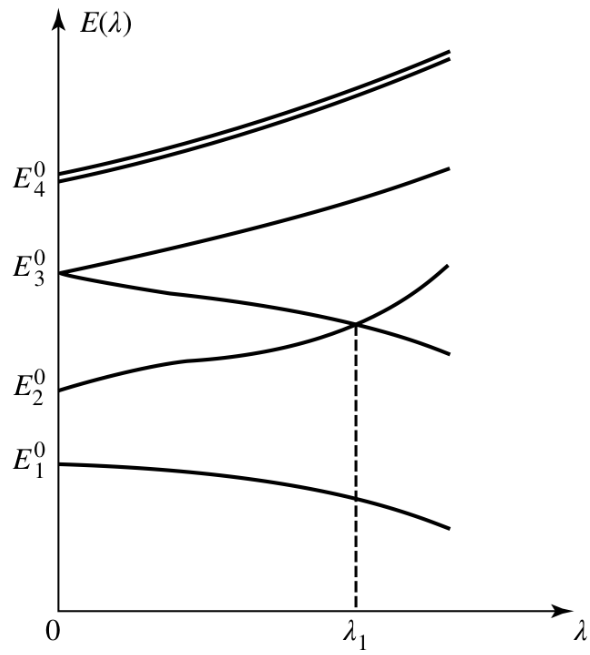
O ÍNDICE p ROTULA AS AUTO-ENERGIAS E O ÍNDICE i DISTINGUE OS AUTO-ESTADOS DEGENERADOS. ASSIM:

$$\langle \varphi_{p'}^{i'} | \varphi_p^i \rangle = \delta_{p,p'} \delta_{i,i'}$$

$$\sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i| = \mathbb{1}$$

EVIDENTEMENTE, OS AUTO-VALORES EXATOS (DESCONHECIDOS) DEPENDEM DE λ: $E(\lambda)$

VÁRIOS COMPORTAMENTOS DIFERENTES PODEM ACONTECER.



NA FIGURA ACIMA, CADA AUTO-ENERGIA NÃO PERTURBADA E_p^0 É MODIFICADA PELA PERTURBAÇÃO. NOTAMOS QUE:

E_1^0 É INICIALMENTE NÃO DEGENERADO E ASSIM PERMANECE À MEDIDA QUE λ AUMENTA

E_3^0 É INICIALMENTE DUPLAMENTE DEGENERADO, MAS O AUMENTO DE λ "LEVANTA" ESSA DEGENERESCÊNCIA

E_2^0 É NÃO DEGENERADO ATÉ $\lambda = \lambda_1$ ONDE ELE DEGENERA COM UM DOS NÍVEIS QUE SAI DE E_3^0

E_4° É INICIALMENTE DUPLAMENTE DEGENERADO E ASSIM PERMANECE, INDEPENDENTE DE $\underline{\lambda}$.

TEORIA DE PERTURBAÇÃO

DADO O PROBLEMA A SER RESOLVIDO:

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$$

ASSUMIMOS QUE $|\psi(\lambda)\rangle$ E $E(\lambda)$ ADMITEM UMA SOLUÇÃO EM SÉRIE DE POTÊNCIAS DE λ:

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \dots$$

LEVANDO NA EQUAÇÃO A SER RESOLVIDA:

$$(H_0 + \lambda\hat{W})\left[\sum_q \lambda^q |q\rangle\right] = \left[\sum_n \lambda^n \varepsilon_n\right]\left[\sum_q \lambda^q |q\rangle\right]$$

$$\sum_{q=0} \lambda^q H_0|q\rangle + \sum_{q=0} \lambda^{(q+1)}\hat{W}|q\rangle = \sum_{\substack{n=0\\q=0}}^{\infty} \lambda^{(n+q)}\varepsilon_n|q\rangle$$

IGUALAMOS OS COEFICIENTES DE CADA POTÊNCIA DE λ:

λ^0: $H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$

λ^1: $H_0|1\rangle + \hat{W}|0\rangle = \varepsilon_0|1\rangle + \varepsilon_1|0\rangle$

$$\Rightarrow (H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

λ^2: $H_0|2\rangle + \hat{W}|1\rangle = \varepsilon_0|2\rangle + \varepsilon_1|1\rangle + \varepsilon_2|2\rangle$

$$\Rightarrow (H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0$$

E ASSIM POR DIANTE:

VAMOS ASSUMIR QUE $|\psi(\lambda)\rangle$ É NORMALIZADO.
$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1$:

$$[\langle 0| + \lambda\langle 1| + \lambda^2\langle 2| + \cdots][|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \cdots] = 1$$

QUE, ORDEM A ORDEM, DÁ:

$\langle 0|0\rangle = 1$; $\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle = 2\,\mathrm{Re}[\langle 0|1\rangle] = 0$

$\langle 2|0\rangle + \langle 1|1\rangle + \langle 0|2\rangle = 0$

$\Rightarrow 2\,\mathrm{Re}[\langle 0|2\rangle] = -\langle 1|1\rangle$, ETC.

ALÉM DISSO, PODEMOS ESCOLHER A FASE DE $|\psi(\lambda)\rangle$. IMPOMOS QUE:

$$\langle 0|\psi(\lambda)\rangle \text{ É REAL}$$

$$\Rightarrow \langle 0|\left[|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \cdots\right] \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow \langle 0|0\rangle + \lambda\langle 0|1\rangle + \lambda^2\langle 0|2\rangle + \cdots \in \mathbb{R}$$

COMO $\langle 0|0\rangle = 1$ E $\lambda \in \mathbb{R}$:

$$\langle 0|1\rangle \in \mathbb{R}$$

MAS COMO VIMOS $Re[\langle 0|1\rangle] = 0$

$$\Rightarrow \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$$

ALÉM DISSO: $\langle 0|2\rangle \in \mathbb{R}$ E COMO VIMOS:

$$Re[\langle 0|2\rangle] = \langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle$$

E ASSIM POR DIANTE.

PODEMOS ASSIM COLECIONAR OS RESULTADOS ATÉ 2ª ORDEM:

$$(1) \quad H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$$
$$(2) \quad (H_0-\varepsilon_0)|1\rangle + (\hat{W}-\varepsilon_1)|0\rangle = 0$$
$$(3) \quad (H_0-\varepsilon_0)|2\rangle + (\hat{W}-\varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0$$

$$(4) \quad \langle 0|0\rangle = 1$$
$$(5) \quad \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$$
$$(6) \quad \langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle$$

CASO NÃO DEGENERADO

SUPONHA UM AUTO-ESTADO NÃO DEGENERADO DE H_0:

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n^0|\varphi_n\rangle$$

OBVIAMENTE: $\varepsilon_0 = E_n^0$ E $|0\rangle = |\varphi_n\rangle$

VEJA OS EXEMPLOS E_1^0, E_2^0 DA FIGURA.

APLICANDO $\langle\varphi_n|$ À EQ. (2):

$$\underbrace{\langle\varphi_n|(H_0-\varepsilon_0)|1\rangle}_{(E_n^0-E_n^0)\langle\varphi_n|1\rangle=0}+\langle\varphi_n|(\hat{W}-\varepsilon_1)|0\rangle=0$$

$$\Rightarrow \varepsilon_1 = \langle 0|\hat{W}|0\rangle = \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle$$

PORTANTO, ATÉ PRIMEIRA ORDEM:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle + O(\lambda^2)$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle + O(\lambda^2)$$

A CORREÇÃO À ENERGIA, EM 1ª ORDEM, É O VALOR MÉDIO DA PERTURBAÇÃO NO ESTADO NÃO PERTURBADO.

PARA OBTERMOS AS CORREÇÕES AO ESTADO, APLICAMOS OS OUTROS AUTO-ESTADOS COMO BRAS EM (1):

$$\underbrace{\langle \varphi_p^i | (H_0 - \mathcal{E}_0) | 1 \rangle}_{(E_p^0 - E_n^0)\langle \varphi_p^i | 1 \rangle} + \underbrace{\langle \varphi_p^i | (\hat{W} - \mathcal{E}_1) | \varphi_n \rangle}_{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle} = 0$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \quad (p \neq n)$$

ALÉM DISSO, DE (5):

$$\langle \varphi_n | 1 \rangle = \langle 0 | 1 \rangle = 0$$

ASSIM:

$$| 1 \rangle = \left(| \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} | \varphi_p^i \rangle \langle \varphi_p^i | \right) | 1 \rangle$$

$$| 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} | \varphi_p^i \rangle$$

E:

$$| \psi_n(\lambda) \rangle = | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{i=1}^{g_p} \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} + O(\lambda^2)$$

NOTE COMO A PERTURBAÇÃO AGE MISTURANDO OS OUTROS ESTADOS NO ESTADO NÃO PERTURBADO.

PARA OBTERMOS A CORREÇÃO DE 2ª ORDEM NA ENERGIA, ATUAMOS COM $\langle\varphi_n|$ EM (3):

$$\underbrace{\langle\varphi_n|(H_0-E_n^0)|2\rangle}_{(E_n^0-E_n^0)\langle\varphi_n|2\rangle=0}+\underbrace{\langle\varphi_n|(\hat{W}-\varepsilon_1)|1\rangle}_{\langle\varphi_n|\hat{W}|1\rangle}-\varepsilon_2\underbrace{\langle\varphi_n|0\rangle}_{1}=0$$

ONDE USAMOS QUE $\langle\varphi_n|1\rangle=0$. ASSIM:

$$\varepsilon_2=\langle\varphi_n|\hat{W}|1\rangle=\sum_{p\neq n}\sum_{i=1}^{g_p}\frac{\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle}{E_n^0-E_p^0}\langle\varphi_n|\varphi_p^i\rangle$$

QUE PODE SER SIMPLIFICADO PARA:

$$\varepsilon_2=\sum_{p\neq n}\sum_{i=1}^{g_p}\frac{|\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle|^2}{E_n^0-E_p^0}$$

FINALMENTE:

$$E_n(\lambda)=E_n^0+\langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle+\sum_{p\neq n}\sum_{i=1}^{g_p}\frac{|\langle\varphi_p^i|W|\varphi_n\rangle|^2}{E_n^0-E_p^0}+O(\lambda^3)$$

EXEMPLO: OSCILADOR HARMÔNICO + TERMO LINEAR:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \lambda(\hbar\omega)\left(\frac{x}{b}\right) \qquad \lambda \ll 1$$

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \text{ESCALA DE COMPRIMENTO}$$

LEMBRAMOS QUE: $\frac{X}{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$

$$\Rightarrow W = \frac{\lambda(\hbar\omega)}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \qquad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$H_0 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

PRIMEIRAMENTE, ESSE PROBLEMA TEM SOLUÇÃO EXATA: $\alpha = \frac{\lambda(\hbar\omega)}{b}$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 + \alpha X = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(X + \frac{\alpha}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2}$$

DEFINDO $X' = X + \frac{\alpha}{m\omega^2}$, $[X', P] = i\hbar$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\lambda^2}{2}\hbar\omega$$

VAMOS CALCULAR AS ENERGIAS USANDO TEORIA DE PERTURBAÇÃO. TODOS OS ESTADOS DE H_0 SÃO NÃO DEGENERADOS.

EM 1ª ORDEM

$$E_n^1 = \lambda \varepsilon_1 = \langle n | W | n \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (\hbar\omega) \langle n | (a + a^\dagger) | n \rangle = 0$$

EM 2ª ORDEM, PRECISAMOS DE:

$$\langle m | W | n \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (\hbar\omega) \langle m | (a + a^\dagger) | n \rangle$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (\hbar\omega) \left[\sqrt{n}\, \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\, \delta_{m,n+1} \right]$$

ASSIM:

$$E_n^2 = \sum_m \frac{|\langle m | W | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = \frac{\lambda^2}{2} (\hbar\omega)^2 \times$$

$$\times \left\{ \frac{n}{[n-(n-1)]\hbar\omega} + \frac{n+1}{[n-(n+1)]\hbar\omega} \right\}$$

$$= \frac{\lambda^2}{2} (\hbar\omega) \left\{ n - (n+1) \right\} = -\frac{\lambda^2}{2} (\hbar\omega)$$

QUE COINCIDE COM O RESULTADO EXATO.

A MODIFICAÇÃO DOS AUTO-ESTADOS, EM 1ª ORDEM É:

$$\delta^{(1)} |n\rangle = \sum_m \frac{\langle m | W | n\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m\rangle$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (\hbar\omega) \left[\frac{\sqrt{n}}{\hbar\omega} |n-1\rangle + \frac{\sqrt{n+1}}{-\hbar\omega} |n+1\rangle \right]$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{n} |n-1\rangle - \sqrt{n+1} |n+1\rangle \right]$$

NOTE QUE O AUTO-ESTADO EM 1ª ORDEM NÃO É EXATO.