ACOPLAMENTO COM ESTADOS DO CONTÍNUO

ATÉ AGORA, OS ESTADOS FINAIS CONSIDERADOS $|\varphi_f\rangle$ FORAM ESTADOS DA PARTE DISCRETA DO ESPECTRO. NO ENTANTO, EXISTEM SITUAÇÕES DE INTERESSE EM QUE OS ESTADOS FINAIS ESTÃO NA PARTE CONTÍNUA DO ESPECTRO DE H_0. EXEMPLOS:

1) EFEITO FOTOELÉTRICO OU FOTOIONIZAÇÃO

INCIDE-SE ONDA ELETROMAGNÉTICA NUM ÁTOMO, MOLÉCULA OU SÓLIDO E ARRANCA-SE UM ELÉTRON DE UM ESTADO LIGADO, QUE É EJETADO NO CONTÍNUO DE ESTADOS CORRESPONDENTES AO ELÉTRON SE AFASTANDO COMO ELÉTRON (QUASE) LIVRE ("QUASE", PORQUE ELE AINDA "SENTE" O POTENCIAL COULOMBIANO QUE ELE DEIXA PARA TRÁS).

2) EFEITO AUGER OU AUTOIONIZAÇÃO

SE EXCITARMOS UM ÁTOMO PARA UM NÍVEL ALTAMENTE EXCITADO, HÁ TRANSIÇÕES SEM EMISSÃO DE FÓTONS, ONDE UM ELÉTRON DECAI PARA UM NÍVEL MAIS BAIXO E OUTRO

ELÉTRON É EJETADO PARA LONGE DO ÁTOMO NUM ESTADO (QUASE) LIVRE. POR EXEMPLO, NUM ÁTOMO DE HÉLIO PREPARADO NO ESTADO INICIAL $2s^2$, PODE HAVER UMA TRANSIÇÃO PARA UM ESTADO $1s \oplus k$, ESTADO FINAL COM UM ELÉTRON NO NÍVEL $1s$ E OUTRO ELÉTRON NUM ESTADO LIVRE COM VETOR DE ONDA DE MÓDULO $\underline{k}$.

SUPONHAMOS, COMO NOS CASOS ACIMA, QUE OS ESTADOS FINAIS SÃO ESTADOS LIVRES, DE ONDAS PLANAS $|\vec{p}\rangle$, CUJAS FUNÇÕES DE ONDA SÃO:

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

COMO SE TRATA DE ESTADOS DO CONTÍNUO, OS POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA NOS DIZEM QUE OBTEMOS NÃO PROBABILIDADES MAS DENSIDADES DE PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO:

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

USUALMENTE, NA DETECÇÃO, HÁ UMA CERTA FAIXA DE VALORES DE $\vec{p}$ PARA OS QUAIS O APARATO É CAPAZ DE REGISTRAR A PARTÍCULA. POR EXEMPLO, PARTÍCULAS SÃO DETECTADAS SE TÊM ENERGIA $E_f = \dfrac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}$ NUM CERTO INTERVALO $[E_f, E_f + \delta E_f]$ E DIREÇÃO DE MOMENTO LINEAR $\vec{p}_f$ NUM CERTO INTERVALO DE ÂNGULO SÓLIDO:

$$\delta\Omega_f = \sin\theta_f \, d\theta_f \, d\phi_f$$

SE CHAMARMOS ESSA REGIÃO DE DETECÇÃO DE D_f, A PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO PROCURADA É:

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{\vec{p} \in D_f} d^3p \, |\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle|^2$$

MAS:

$$d^3p = p^2 \, dp \, d\Omega = 2mE \frac{dp}{dE} \, dE \, d\Omega$$

$$\frac{dp}{dE} = \left(\frac{dE}{dp}\right)^{-1} = \frac{m}{p} = \frac{m}{\sqrt{2mE}} \Rightarrow d^3p = m\sqrt{2mE} \, dE \, d\Omega$$

DEFINE-SE A DENSIDADE DE ESTADOS NO CONTÍNUO:

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = m\sqrt{2mE}$$

ASSIM:

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{\substack{\Omega \in \delta\Omega_f \\ E \in \delta E_f}} d\Omega \, dE \, \rho(E) \, |\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle|^2$$

PODEMOS GENERALIZAR A EXPRESSÃO ACIMA PARA OUTROS CASOS DE ESTADOS NO CONTÍNUO. SE ESCREVERMOS, DE MANEIRA GERAL, $|\alpha\rangle$,

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha \, |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2$$

UTILANDO AGORA PARA α, A ENERGIA E E OUTROS PARÂMETROS CONTÍNUOS β:

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{\substack{E \in \delta E_f \\ \beta \in \delta\beta_f}} d\beta \, dE \, \rho(\beta, E) \, |\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2$$

ONDE $d\alpha = \rho(\beta, E) \, d\beta \, dE$

APLICANDO AGORA PARA O CASO DE UMA PERTURBAÇÃO CONSTANTE

$$W(t) = W$$

NUM SISTEMA QUE INICIA NUM AUTO-ESTADO DISCRETO DE H_0, $|\varphi_i\rangle$, TEMOS:

$$|\langle\beta, E|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{|\langle\beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2}{(E-E_i)^2}\left|1 - e^{i(E-E_i)t/\hbar}\right|^2$$

$$= \frac{|\langle\beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2}{(E-E_i)^2/4}\sin\left[\frac{(E-E_i)t}{2\hbar}\right]^2$$

$$= \frac{|\langle\beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2}{\hbar^2} F\left(t, \frac{E-E_i}{\hbar}\right)$$

ONDE:

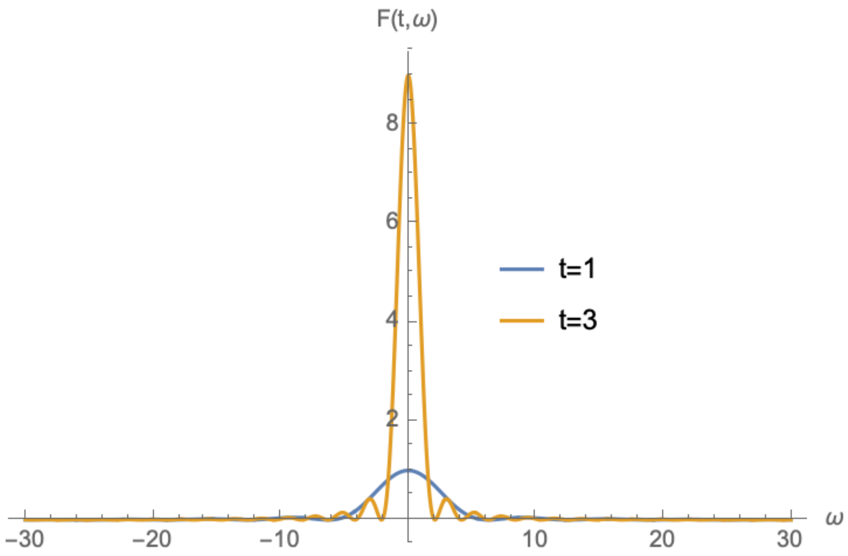
$$F(t,\omega) = \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\omega/2}\right]^2$$

FINALMENTE:

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = \frac{1}{\hbar^2}\int_{\substack{\beta\in\delta\beta_f \\ E\in\delta E_f}} d\beta\, dE\, \rho(\beta, E)|\langle\beta, E|W|\varphi_i\rangle|^2 F\left(t, \frac{E-E_i}{\hbar}\right)$$

COMO VIMOS, A FUNÇÃO $F(t,\omega)$ É FORTEMENTE CONCENTRADA NA REGIÃO $\omega \simeq 0$ E DECAI A ZERO RAPIDAMENTE SE:

$$|\omega| >> \frac{4\pi}{t}$$



ASSIM, SE A FUNÇÃO $\rho(\beta,E)|\langle\beta,E|W|\varphi_i\rangle|^2$ VARIA POUCO SE:

$$\left|\frac{E-E_i}{\hbar}\right| \lesssim \frac{4\pi}{t} \Rightarrow |E-E_i| \lesssim \frac{4\pi\hbar}{t}$$

O QUE É VÁLIDO SE t É SUFICIENTEMENTE GRANDE, ENTÃO PODEMOS TIRÁ-LA PRA FORA DA INTEGRAL E FICAMOS COM:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F\left(t, \frac{E-E_i}{\hbar}\right) dE = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, F(t,\omega) = 4\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\omega^2}\, d\omega$$

O INTEGRANDO ACIMA É UMA DAS REPRESENTAÇÕES DA FUNÇÃO DELTA DE DIRAC (VER EQ. (11) DO APÊNDICE II, COM $\varepsilon = \frac{2}{t}$)

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

LOGO:

$$4\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\omega^2} d\omega = 4\hbar \left(\frac{\pi t}{2}\right) = 2\pi\hbar t$$

FINALMENTE, SE $E_i \in \delta E_f$:

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

ONDE CALCULAMOS A INTEGRAL SOBRE β ASSUMINDO QUE $\delta\beta_f$ É MUITO PEQUENO.
SE $E_i \notin \delta E_f$ A INTEGRAÇÃO DÁ ZERO.
SÓ HÁ TRANSIÇÃO SE HOUVER CONSERVAÇÃO DE ENERGIA (COM PRECISÃO $\frac{2\pi\hbar}{t}$).

NOTE QUE, PARA $t \to \infty$:

$$F(t, \omega) \longrightarrow 2\pi t \, \delta(\omega)$$

COMO A TRANSIÇÃO É LINEAR NO TEMPO, A TAXA DE TRANSIÇÃO POR UNIDADE DE TEMPO É:

$$\delta W(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{d}{dt} \delta P(\varphi_i, \alpha_f, t)$$

FINALMENTE, A TAXA DE TRANSIÇÃO POR UNIDADE DA VARIÁVEL β_f:

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\delta W(\varphi_i, \alpha_f)}{\delta \beta_f}$$

$$\boxed{w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i)}$$

"REGRA DE OURO DE FERMI"

PARA O CASO DE UMA PERTURBAÇÃO SENOIDAL O MESMO RACIOCÍNIO NOS LEVA A:

$$\boxed{w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i + \hbar\omega | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i + \hbar\omega)}$$

O FATOR $\frac{1}{4}$ DE DIFERENÇA VEM DO FATO DE QUE:

$$W(t) = W \begin{Bmatrix} \sin \omega t \\ \cos \omega t \end{Bmatrix} = \frac{W}{2} \begin{Bmatrix} -i \\ 1 \end{Bmatrix} \left(e^{i\omega t} \mp e^{-i\omega t} \right)$$

E, PARA $E_f = E_i + \hbar\omega > E_i$, APENAS O TERMO $e^{-i\omega t}$ É RESSONANTE ($\hbar\omega = E_f - E_i$) E DEVEMOS FAZER $W \to \frac{W}{2}$ NO ELEMENTO DE MATRIZ.