Teoria de Perturbação Estacionária (aula passada).

- Definimos $H(\lambda) = H_0 + \lambda\hat{W}$ onde, se $W = \lambda\hat{W} = 0$, o problema tem solução conhecida, isto é: $\begin{cases} H_0|\varphi_p^i\rangle = E_p^{(0)}|\varphi_p^i\rangle \rightarrow i \text{ é a degenerescência.} \\ \{|\varphi_p^i\rangle\} \text{ e } \{E_p^{(0)}\} \rightarrow \text{solução desta equação.} \end{cases}$
- Buscamos uma solução aproximada para $(H_0 + \lambda\hat{W})|\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$ com a estratégia de expansão: $\begin{cases} E(\lambda) = \epsilon_0 + \lambda\epsilon_1 + \lambda^2\epsilon_2 + ... + \lambda^q\epsilon_q + ... \\ |\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + ... + \lambda^q|q\rangle + ... \end{cases}$
- Substituição direta forneceu (igualando potências de mesma ordem em λ)

$$(H_0 + \lambda\hat{W})\Big[\sum_{q=0}^{\infty}\lambda^q|q\rangle\Big] = \Big[\sum_{q'=0}^{\infty}\lambda^{q'}\epsilon_{q'}\Big]\Big[\sum_{q=0}^{\infty}\lambda^q|q\rangle\Big],$$

ou ainda: $\big[H_0|0\rangle - \epsilon_0|0\rangle\big]\lambda^0 + \big[H_0|1\rangle + \hat{W}|0\rangle - \epsilon_0|1\rangle - \epsilon_1|0\rangle\big]\lambda^1 ... \mathcal{O}(\lambda)^2 = 0$

- *ordem zero:* $\lambda^0 \Rightarrow H|0\rangle = \epsilon_0|0\rangle$ (soluções conhecidas);
- *primeira ordem:* $\lambda^1 \Rightarrow \big[H_0|1\rangle + \hat{W}|0\rangle - \epsilon_0|1\rangle - \epsilon_1|0\rangle\big] = 0,$ que pode ser reescrita por: $(H_0 - \epsilon_0)|1\rangle + (\hat{W} - \epsilon_1)|0\rangle = 0 \rightarrow$ fizemos na aula passada.
- *segunda ordem:* $\lambda^2 \Rightarrow (H_0 - \epsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \epsilon_1)|1\rangle - \epsilon_2|0\rangle = 0;$
- *q-ésima ordem:* $\lambda^q \Rightarrow (H_0 - \epsilon_0)|q\rangle + (\hat{W} - \epsilon_1)|q-1\rangle - \epsilon_2|q-2\rangle - ... - \epsilon_q|0\rangle = 0.$
- Escolhemos normalizar $|\psi(\lambda)\rangle$ mantendo o produto $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ real.

Teoria de Perturbação Estacionária (aula passada).

- Fizemos o estudo para o caso não-degenerado $\begin{cases} |0\rangle = |\varphi_n^i\rangle = |\varphi_n\rangle \\ \lim_{\lambda\to 0} E(\lambda) = E_n^{(0)} = \epsilon_0 \end{cases}$

- Achamos as correções de primeira ordem em $E_n^{(0)}$ e em $|\varphi_n\rangle$:

$$E(\lambda) = E_n^{(0)} + \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2), \text{ com } \boxed{\epsilon_1 = \langle\varphi_n|\hat{W}|0\rangle}$$

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

- Hoje, correções de segunda ordem. Comece projetando $\langle\varphi_n|$ em:

$(H_0 - \epsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \epsilon_1)|1\rangle - \epsilon_2|0\rangle = 0$ do slide anterior, e obtenha

$$\langle\varphi_n|H_0 - \epsilon_0|2\rangle + \langle\varphi_n|\hat{W} - \epsilon_1|1\rangle - \langle\varphi_n|\epsilon_2|0\rangle = 0$$

Note que $\begin{cases} \langle\varphi_n|H_0 = \langle\varphi_n|E_n^{(0)} = \langle\varphi_n|\epsilon_0 \\ \langle\varphi_n|\epsilon_1|1\rangle = \epsilon_1\langle\varphi_n|1\rangle = \epsilon_1\langle 0|1\rangle = 0 \\ \langle\varphi_n|\epsilon_2|0\rangle = \epsilon_2\langle\varphi_n|0\rangle = \epsilon_2\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \epsilon_2 \end{cases}$ e obtenha: $\boxed{\epsilon_2 = \langle\varphi_n|\hat{W}|1\rangle}$

Lembre que obtivemos $|1\rangle$, na aula passada:

$$|1\rangle = \mathbb{1}|1\rangle = \sum_p\sum_i |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i|1\rangle = \sum_{p\neq n}\sum_i |\varphi_p^i\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} \langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle.$$

Para finalmente, obter $\epsilon_2 = \sum_{p\neq n}\sum_i \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_p^i\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} \langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle$

Teoria de Perturbação Estacionária. Correção de 2ª ordem.

- Isso permite escrever $E(\lambda) = \epsilon_0 + \lambda^1\epsilon_1 + \lambda^2\epsilon_2 + \mathcal{O}(\lambda^3)$ até segunda ordem, isto é:

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

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

- Qual é o sinal do termo de segunda ordem? É o sinal de $E_n^{(0)} - E_p^{(0)}$. Isso tem

$$\text{uma consequência importante} \begin{cases} \text{em } E_n^{(0)}, \text{ muda esse valor no sentido } E_n^{(0)} - E_p^{(0)} \\ \\ \text{em } E_p^{(0)}, \text{ muda esse valor no sentido } E_p^{(0)} - E_n^{(0)} \end{cases}$$

O termo de segunda ordem causa uma "repulsão" entre os níveis $E_n^{(0)}$ e $E_p^{(0)}$.

- Correção de 2a ordem no autovetor $|\varphi_n\rangle \rightarrow$ (precisamos calcular $|2\rangle$ do slide 1). Agora, como feito anteriormente no termo de primeira ordem, projetamos a equação $(H_0 - \epsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \epsilon_1)|1\rangle - \epsilon_2|0\rangle = 0$ em $\langle\varphi_p^i|$, para obter:

$$\boxed{\langle\varphi_p^i|H_0 - \epsilon_0|2\rangle + \langle\varphi_p^i|\hat{W} - \epsilon_1|1\rangle - \langle\varphi_p^i|\epsilon_2|0\rangle = 0}$$

Teoria de Perturbação Estacionária. Correção de 2ª ordem.

- Para calcular $|2\rangle$ do slide 1, usaremos o operador unidade para obter $|2\rangle = \mathbb{1}|2\rangle = \sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i|2\rangle$, onde a soma em p, inclui n. Desta forma, podemos escrever $\boxed{|2\rangle = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|2\rangle + \sum_{p\neq n} \sum_i |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i|2\rangle}$ Vimos na aula passada que $\langle\varphi_n|2\rangle = \langle 2|\varphi_n\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle$, onde o ket $|1\rangle$ foi escrito por $\boxed{|1\rangle = \sum_{p\neq n}\sum_i |\varphi_p^i\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}}\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle.}$ Assim para obter $|2\rangle$, precisamos apenas calcular $\langle\varphi_p^i|2\rangle$, com $p \neq n$. Esse elemento está no primeiro termo da equação projetada do slide anterior, que pode ser reorganizada da seguinte forma:

$$\langle\varphi_p^i|H_0 - \epsilon_0|2\rangle = -\langle\varphi_p^i|\hat{W} - \epsilon_1|1\rangle + \langle\varphi_p^i|\epsilon_2|0\rangle, \text{ ou ainda}$$

$$\underbrace{\langle\varphi_p^i|H_0 - E_n^{(0)}|2\rangle} = -\langle\varphi_p^i|\hat{W} - \epsilon_1|1\rangle + \underbrace{\langle\varphi_p^i|\epsilon_2|\varphi_n\rangle}$$

$$\langle\varphi_p^i|E_p^{(0)} - E_n^{(0)}|2\rangle = -\langle\varphi_p^i|\hat{W} - \epsilon_1|1\rangle + \epsilon_2\delta_{p,n}$$

Assim, $\langle\varphi_p^i|2\rangle = \frac{1}{E_p^{(0)} - E_n^{(0)}}\left[-\langle\varphi_p^i|\hat{W} - \epsilon_1|1\rangle\right]$, com $\epsilon_1 = \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle$

e $|1\rangle$ dado acima. Inclusão de ϵ_1 e $|1\rangle$ na expressão fornece:

Teoria de Perturbação Estacionária. Correção de 2ª ordem.

- $$\langle\varphi_p^i|2\rangle = \frac{1}{E_p^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big[-\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\big(\sum_{p'\neq n}\sum_{i'}|\varphi_{p'}^{i'}\rangle\frac{1}{E_n^{(0)}-E_{p'}^{(0)}}\langle\varphi_{p'}^{i'}|\hat{W}|\varphi_n\rangle\big)+\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle\times$$
$$\underbrace{\langle\varphi_p^i|\big(\sum_{p'\neq n}\sum_{i'}|\varphi_{p'}^{i'}\rangle\frac{1}{E_n^{(0)}-E_{p'}^{(0)}}\langle\varphi_{p'}^{i'}|\hat{W}|\varphi_n\rangle\big)}_{\sum_{p'\neq n}\sum_{i'}\delta_{pp'}\delta_{ii'}\frac{1}{E_n^{(0)}-E_{p'}^{(0)}}\langle\varphi_{p'}^{i'}|\hat{W}|\varphi_n\rangle}\Big],$$
$$\langle\varphi_p^i|2\rangle = \frac{1}{E_p^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big[-\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}|\hat{W}|\varphi_n\rangle+\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle\frac{1}{E_n^{(0)}-E_p^{(0)}}\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle\Big]$$
- Na expressão acima, note $\phi_n \equiv \sum_{p'\neq n}\sum_{i'}|\varphi_{p'}^{i'}\rangle\langle\varphi_{p'}^{i'}|$ e H_0 no denominador.
- Mostre que nesta linguagem $|1\rangle = \dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}\hat{W}|\varphi_n\rangle$. Consequentemente,
$$\langle\varphi_n|2\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle = -\frac{1}{2}\langle\varphi_n|\hat{W}\frac{\phi_n}{(E_n^{(0)}-H_0)^2}\hat{W}|\varphi_n\rangle,$$ uma vez que $\phi_n^2 = \phi_n$.
- Junte tudo em $|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + ... + \lambda^q|q\rangle + ...$ para obter o estado até segunda ordem. Tudo que precisamos está no slide 2 (definição de $|0\rangle$), slide 4 (definições de $|1\rangle$ e $|2\rangle$) e acima (pedaços do $|2\rangle$).

Teoria de Perturbação Estacionária. Correção de 2ª ordem.

- No slide 2 vimos que $\begin{cases} \epsilon_1 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 0 \rangle \to \text{1a ordem em energia} \quad \text{usa } |0\rangle \\ \\ \epsilon_2 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle \to \text{2a ordem em energia} \quad \text{usa } |1\rangle \end{cases}$

  A q-ésima ordem em energia ϵ_q pode ser obtida via equação do slide 1. Basta projetá-la em $\langle \varphi_n|$, pela esquerda:

  $\langle \varphi_n | H_0 - \epsilon_0 | q \rangle + \langle \varphi_n | \hat{W} - \epsilon_1 | q-1 \rangle - \epsilon_2 \langle \varphi_n | q-2 \rangle - \ldots - \epsilon_q \langle \varphi_n | 0 \rangle = 0$ e

  obter $\epsilon_q = \dfrac{1}{\langle \varphi_n | 0 \rangle} \Big[\langle \varphi_n | \hat{W} | q-1 \rangle - \epsilon_1 \langle \varphi_n | q-1 \rangle - \epsilon_2 \langle \varphi_n | q-2 \rangle - \ldots - \epsilon_{q-1} \langle \varphi_n | 1 \rangle \Big]$,

  ou ainda, $\epsilon_q = \Big[\langle \varphi_n | \hat{W} | q-1 \rangle - \epsilon_1 \langle \varphi_n | q-1 \rangle - \epsilon_2 \langle \varphi_n | q-2 \rangle - \ldots - \epsilon_{q-1} \langle \varphi_n | 1 \rangle \Big]$.

  Note que ϵ_q é escrito em termos dos kets de ordem inferior (de $|1\rangle$ até $|q-1\rangle$). Por essa razão, quando obtemos o ket em uma dada ordem, é relativamente simples obter a energia em uma ordem superior.

- Limite superior de ϵ_2. É possível estimá-lo? Lembre que (slide 2)

  $\epsilon_2 = \displaystyle\sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}}$. Tome $\Delta E \equiv |E_n^{(0)} - E_{\text{p+proximo}}^{(0)}| \Rightarrow$ e note que

  por definição $|E_n^{(0)} - E_p^{(0)}| \geq \Delta E$. É fácil se convencer que se trocarmos $E_n^{(0)} - E_p^{(0)}$ por ΔE em ϵ_2, encontramos o limite superior.

Teoria de Perturbação Estacionária. Correção de 2ª ordem.

- Ao analisar, consideramos que $E_n^{(0)} - E_p^{(0)}$ pode mudar de sinal (dependendo de p), o que gera cancelamentos na soma, enquanto que ΔE é sempre positivo. Além disso, como para $\forall p, \Delta E \leq |E_n^{(0)} - E_p^{(0)}|$, sua presença em todas as parcelas garante que $\dfrac{|\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle|^2}{|E_n^{(0)} - E_p^{(0)}|} \leq \dfrac{|\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle|^2}{\Delta E}$.
- Isso permite escrever $\epsilon_2 = \displaystyle\sum_{p\neq n}\sum_i \frac{|\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} \leq \frac{1}{\Delta E}\sum_{p\neq n}\sum_i |\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle|^2$

  Chamando esse limite superior de $\epsilon_2^{\max}$, temos:

  $$\epsilon_2^{\max} = \frac{1}{\Delta E}\sum_{p\neq n}\sum_i \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\Delta E}\langle\varphi_n|\hat{W}|\Big[\sum_{p\neq n}\sum_i |\varphi_p^i\rangle\langle\varphi_p^i|\Big]|\hat{W}|\varphi_n\rangle$$

  Entre colchetes temos quase a unidade. Falta o $|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$. Somando e subtraindo essa quantidade, obtemos $\epsilon_2^{\max} = \dfrac{1}{\Delta E}\langle\varphi_n|\hat{W}|\Big[\mathbb{1} - |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\Big]|\hat{W}|\varphi_n\rangle$. Assim, temos $\epsilon_2^{\max} = \dfrac{1}{\Delta E}\Big[\langle\varphi_n|\hat{W}^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle\Big] = \dfrac{(\Delta\hat{W})^2}{\Delta E}$

  onde, $\Delta\hat{W}$ é o desvio quadrático da média de $\hat{W}$ para $|\varphi_n\rangle$.
- $\epsilon_2^{\max}$ é a ordem de magnitude do erro, se calculamos só a 1a. ordem.

Teoria de Perturbação independente do tempo: caso degenerado

Primeiro é importante perceber que se usássemos os resultados do caso não-degenerado, teríamos problemas: singularidades, vistas em

$$E(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda \hat{W}_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{\hat{W}_{nk}\hat{W}_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\hat{W}_{kn}}{E_n - E_k^{(0)}} |\varphi_k\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2),$$

caso incluíssemos na soma em k os estados do sub-espaço degenerado, com o mesmo autovalor $E_n^{(0)}$, mas com $\hat{W}_{kn} \neq 0$. Para resolver isso, escolheremos uma base de kets do sub-espaço de degenerescência de ordem g_n (chamaremos este sub-espaço de $\mathcal{E}_n^{(0)}$), tal que $\hat{W}_{nk} = 0$ p/ $k \neq n$ com $|\varphi_k\rangle \in \mathcal{E}_n^{(0)}$.

O novo formalismo

Degenerescência g_n significa que existem g_n autokets de H_0 com a mesma energia $E_n^{(0)}$, não-perturbada. Suponha que com auxílio de A possamos definir um sub-conjunto de kets de forma única, pelo par $(E_n^{(0)}, a_i)$. Chamaremos estes kets de $\{|m^{(0)}\rangle\}$. Quando ligamos W, suponha que a degenerescência é removida (cada autovalor corresponde à um único autoket). Chamaremos estes kets de $|\varphi_n^i\rangle$.

Note que quando $\lambda \to 0 \Rightarrow |\psi(\lambda)\rangle \to |\varphi_n^i\rangle$ *podem ser diferentes de* $|m^{(0)}\rangle$.

Teoria de Perturbação independente do tempo: caso degenerado

De qualquer maneira $\{|\varphi_n^i\rangle\}$ e $\{|m^{(0)}\rangle\}$ estão ligados (descrevem o mesmo sub-espaço $\mathcal{E}_n^{(0)}$), por $|\varphi_n^i\rangle = \sum_{m\in\mathcal{E}_n^{(0)}} |m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|\varphi_n^i\rangle$.

A proposta é:

(1) tome nossa equação: $(H_0 + \lambda\hat{W})|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$

(2) faça a expansão usual: $\begin{cases} |\psi(\lambda)\rangle = |\varphi_n^i\rangle + \lambda|1\rangle + \ldots \\ E(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda\epsilon_1 + \lambda^2\epsilon_2 + \ldots \end{cases}$

e obtenha

(3) ordem $\lambda^{(1)}$: $(E_n^{(0)} - H_0)|1\rangle = (\hat{W} - \epsilon_1)|\varphi_n^i\rangle =$
$= (\hat{W} - \epsilon_1)\sum_{m\in\mathcal{E}_n^{(0)}} |m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|\varphi_n^i\rangle$

(4) multiplique esta última equação por $\langle m'^{(0)}|$(bra que $\in {\mathcal{E}_n^{(0)}}^\dagger$)
e obtenha $\sum_m \hat{W}_{m'm}\langle m^{(0)}|\varphi_n^i\rangle = \epsilon_1\langle m'^{(0)}|\varphi_n^i\rangle$

- Este resultado na forma matricial fica:

$$\begin{pmatrix} \hat{W}_{11} & \hat{W}_{12} & \ldots \\ \hat{W}_{21} & \hat{W}_{22} & \ldots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|\varphi_n^i\rangle \\ \langle 2^{(0)}|\varphi_n^i\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \epsilon_1 \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|\varphi_n^i\rangle \\ \langle 2^{(0)}|\varphi_n^i\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\textit{Uma equação de autovalor de } \hat{W} \textit{ em } \mathcal{E}_n^{(0)} \rightarrow \begin{cases} \epsilon_1^i \\ |\varphi_n^i\rangle \end{cases}$$

Teoria de Perturbação independente do tempo: caso degenerado

Algumas considerações:

- Para resolver a equação matricial, tome $Det(\hat{W} - \epsilon_1 \mathbb{1}) = 0$; ache os autovalores, substitua-os de volta e ache $\langle m^{(0)}|\varphi_n^i\rangle$ para cada i.
- Feito isso, teremos a correção de primeira ordem nas energias, ϵ_1^i, e de ordem zero nos autokets, os $|\varphi_n^i\rangle$.
- No limite de $\lambda \to 0$, $|\psi(\lambda)\rangle$ vai para $|\varphi_n^i\rangle$ (uma combinação dos $|m^{(0)}\rangle$ de $\mathcal{E}_n^{(0)}$).
- Se o sub-espaço $\mathcal{E}_n^{(0)}$ fosse o espaço inteiro, teríamos resolvido o problema exatamente ao diagonalizar $\hat{W}$ (estaríamos diagonalizando H no espaço todo).
- A presença de kets fora de $\mathcal{E}_n^{(0)}$ só aparece em termos de $2^{\underline{a}}$ ordem em energia e $1^{\underline{a}}$ ordem nos vetores.
- A expressão $\epsilon_1^i = \langle\varphi_n^i|\hat{W}|\varphi_n^i\rangle$, quando $\hat{W}$ é diagonal em $\mathcal{E}_n^{(0)}$, é igual a do caso não-degenerado $\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle$.
- Escolha um autovalor ϵ_1^i. Se ele for não degenerado, o autovetor $|\varphi_n^i\rangle$ é determinado de forma única, assim como $E(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda\epsilon_1^i$.
- Se a degenerescência não for quebrada, use ordem superior para ver se ela é removida.

Efeitos da Perturbação (o que pode acontecer?)

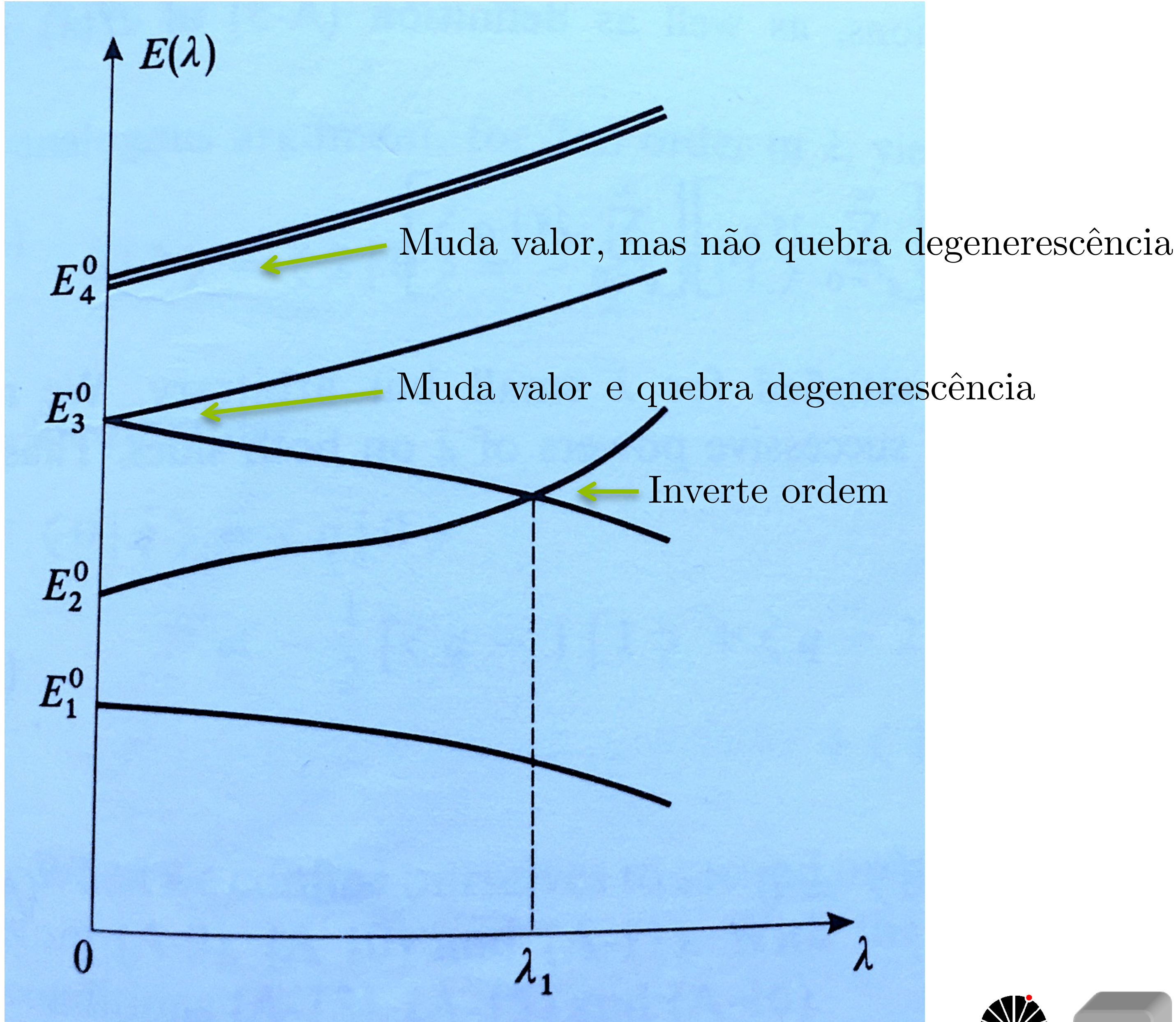

Figura 1 do capítulo XI do livro texto

Nas próximas aulas faremos aplicações. Entre elas:

Efeito Stark Linear

Obtemos este efeito com um campo elétrico homogêneo sobre o nível 2 do átomo de hidrogênio. Desconsiderando spin, o nível 2 é quadridegenerado, isto é

$$n=2:\begin{cases}2s\rightarrow \ell=0, m=0\\ 2p\rightarrow \ell=1, m=-1,0,1\end{cases}\qquad \text{ambos com energia } E_2=-\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{2^2}=-\frac{1}{8}\frac{e^2}{a_0}$$

Se o autovalor é quadri-degenerado, W será 4×4, isto é:

$$\begin{array}{c c} & \begin{array}{cccc} 2s & 2p_0 & 2p_1 & 2p_{-1}\end{array} \\ \begin{array}{c} 2s \\ 2p_0 \\ 2p_1 \\ 2p_{-1}\end{array} & \begin{pmatrix} 0^* & W_{12} & 0^{**} & 0^{**} \\ W_{21} & 0^* & 0^{**} & 0^{**} \\ 0^{**} & 0^{**} & 0^* & 0^{**} \\ 0^{**} & 0^{**} & 0^{**} & 0^* \end{pmatrix}\end{array}$$

$^*\langle\varphi|z|\varphi\rangle=0$, pois, $\langle\mathbf{r}|\varphi\rangle$ tem paridade bem definida.

$^{**}\langle n;\ell m|z|n';\ell' m'\rangle=0$ se $m\neq m'$. Lembre também que $W_{21}=W_{12}^*$.

Assim, sobrou só: $W_{12}=\langle 2s|z|2p_0\rangle=\langle 2p_0|z|2s\rangle^*=W_{21}^*$.

Fazendo as contas, obtemos $\langle 2s|z|2p_0\rangle=\langle 2p_0|z|2s\rangle=3ea_0|\mathbf{E}|$. A teoria de perturbação, fornece:

$$\begin{cases}\text{ordem 1 em energia } \Delta_\pm^{(1)}=\pm 3ea_0|\mathbf{E}|\\ \\ \text{ordem 0 em ket } |\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle\pm|2p_0\rangle)\end{cases}$$