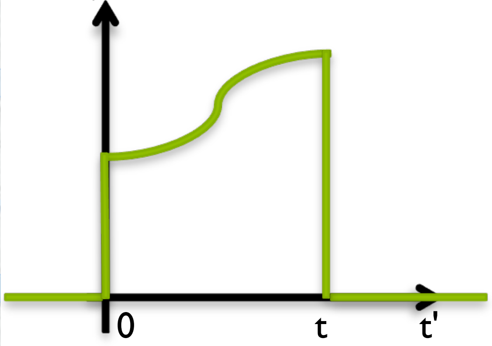
Teoria de Perturbação para problemas dependentes do tempo.

- $\tilde{W}_{fi}(t')$



$$\tilde{W}(t') = \begin{cases} 0 \text{ para } t' < 0 \\ W(t') \text{ para } 0 \leq t' \leq t \\ 0 \text{ para } t' > t \end{cases}$$

Probabilidade de achar o sistema em $|\varphi_f\rangle$ no instante t, sabendo que ele estava em $|\varphi_i\rangle$ no instante $t = 0$.

- ○ Em primeira ordem, $\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t')dt'\right|^2$, é proporcional ao quadrado da transformada de Fourier de $W_{fi}(t) = \langle\varphi_f|W(t)|\varphi_i\rangle$, um elemento de matriz da perturbação entre os estados inicial e final.
- ○ Note que a transformada de Fourier de uma função do tempo é uma função de freqüência e no caso ela é calculada na freqüência $\omega = \omega_{fi} = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$.
- Obtivemos esse resultado com ajuda de $\begin{cases} |\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|\varphi_n\rangle \\ C_n(t) = b_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \end{cases}$ na equação de Schrödinger dependente do tempo. Isso levou à (sem aproximações):

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t}\hat{W}_{nk}(t)b_k(t)$$

Métodos Aproximativos para problemas dependentes do tempo.

- A teoria de perturbação foi obtida, substituindo a série hierárquica de potências $(\lambda << 1): \quad b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + ... + \lambda^r b_n^{(r)}(t)$ na equação do slide anterior e tomando os coeficientes de λ^r em ambos os lados.

  Isso resultou em: $$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(r)}(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t).$$

- Aprendemos que $\begin{cases} b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \\ b_n^{(r)}(0) = 0, r \geq 1 \end{cases}$ garante à condição inicial $|\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$.

- Para $r = 1$, obtemos a teoria em primeira ordem

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_f^{(1)}(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{fk}t} \hat{W}_{fk}(t) b_k^{(0)}(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{fk}t} \hat{W}_{fk}(t) \delta_{ki} = e^{i\omega_{fi}t} W_{fi}(t)$$

$$b_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \hat{W}_{fi}(t') dt',$$

- Note também que ao comparar a equação acima (primeira ordem) com a do slide anterior, verifica-se que o efeito prático foi trocar $b_k(t)$ por $b_k(0) = b_k^{(0)}(t)$.
- Assim, a solução em primeira ordem vai ser boa, se $b_k(t)$ não diferir muito de $b_k(0)$. Quando t cresce, nada impede que as outras ordens fiquem importantes.

Caso especial: uma perturbação senoidal ou constante.

- Definição do problema $\hat{W}(t) = \begin{cases} \hat{W}\sin\omega t \\ \hat{W}\cos\omega t \end{cases} \Rightarrow \hat{W} = \hat{W}(\mathbf{R},\mathbf{P})$ é geral, mas não depende do tempo.
- Exemplos de utilidade desta perturbação estão nos complementos A_{XIII} e B_{XIII}. O mais notório é o cálculo de $\mathcal{P}_{if}(t)$, a probabilidade induzida por uma onda eletromagnética para uma transição entre os estados $|\varphi_i\rangle$ e $|\varphi_f\rangle$.
- Os elementos de matriz $\hat{W}_{fi}(t)$ (caso seno).

$\hat{W}_{fi}(t) = \hat{W}_{fi}\sin\omega t = \dfrac{\hat{W}_{fi}}{2i}\left(e^{+i\omega t} - e^{-i\omega t}\right)$ em $b_f^{(1)}(t) = \dfrac{1}{i\hbar}\displaystyle\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'}\hat{W}_{fi}(t')dt'$,

leva à $-\dfrac{\hat{W}_{fi}}{2\hbar}\displaystyle\int_0^t \left[e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'}\right]dt' = -\dfrac{\hat{W}_{fi}}{2\hbar}\left[\dfrac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{i(\omega_{fi}+\omega)} - \dfrac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{i(\omega_{fi}-\omega)}\right]$

Isto é, $b_f^{(1)}(t) = \dfrac{\hat{W}_{fi}}{2i\hbar}\left[\dfrac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} - \dfrac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right]$.

- Para finalmente, obtermos:

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \lambda^2|b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} - \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2}$$

Solução aproximada da Equação de Schrödinger

- O que mudaria se fosse o $\hat{W}\cos\omega t$? Só o sinal relativo das frações

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

- Para obter uma perturbação independente do tempo, basta fazer $\omega = 0$, no caso cosseno. Isso leva uma probabilidade de transição igual à:

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i\omega_{fi}t}}{\omega_{fi}} + \frac{1-e^{i\omega_{fi}t}}{\omega_{fi}}\right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{2(1-e^{i\omega_{fi}t})}{\omega_{fi}}\right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\frac{\left|1-e^{i\omega_{fi}t}\right|^2}{\omega_{fi}^2}$$

ou ainda $\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\frac{\omega_{fi}}{2}t}(e^{-i\frac{\omega_{fi}}{2}t} - e^{+i\frac{\omega_{fi}}{2}t})}{\omega_{fi}}\right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{2ie^{i\frac{\omega_{fi}}{2}t}\sin\frac{\omega_{fi}}{2}t}{\omega_{fi}}\right|^2$

Para finalmente, termos $\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\left[\frac{\sin\frac{\omega_{fi}}{2}t}{\frac{\omega_{fi}}{2}}\right]^2}$

- Para entender fisicamente o que está acontecendo, estudaremos transições entre estados discretos e entre discreto e um conjunto do contínuo.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante

$$W(t) = \begin{cases} 0 \text{ se } t < 0 \\ \\ W \text{ se } t \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} W \text{ é independente de } t, \text{ mas pode depender} \\ \text{de } \mathbf{x} \text{ e } \mathbf{p}. \end{cases}$$

Se em $t = 0$ o sistema estiver em $|i\rangle$, podemos escrever:

$$c_n^{(0)} = c_n^{(0)}(0) = \delta_{in}$$

$$c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} W_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt' = -\frac{i}{\hbar} W_{ni} \frac{1}{i\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}t'} \Big|_0^t = \frac{W_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

$$= \frac{W_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} e^{\frac{i\omega_{ni}t}{2}} . (-2i) \left(\frac{e^{\frac{i\omega_{ni}t}{2}} - e^{\frac{-i\omega_{ni}t}{2}}}{2i} \right) = -\frac{2ie^{\frac{i\omega_{ni}t}{2}} W_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} \sin\frac{\omega_{ni}t}{2}$$

$$\text{e } \therefore \quad P(i \to n) = |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|W_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2\frac{\omega_{ni}t}{2}$$

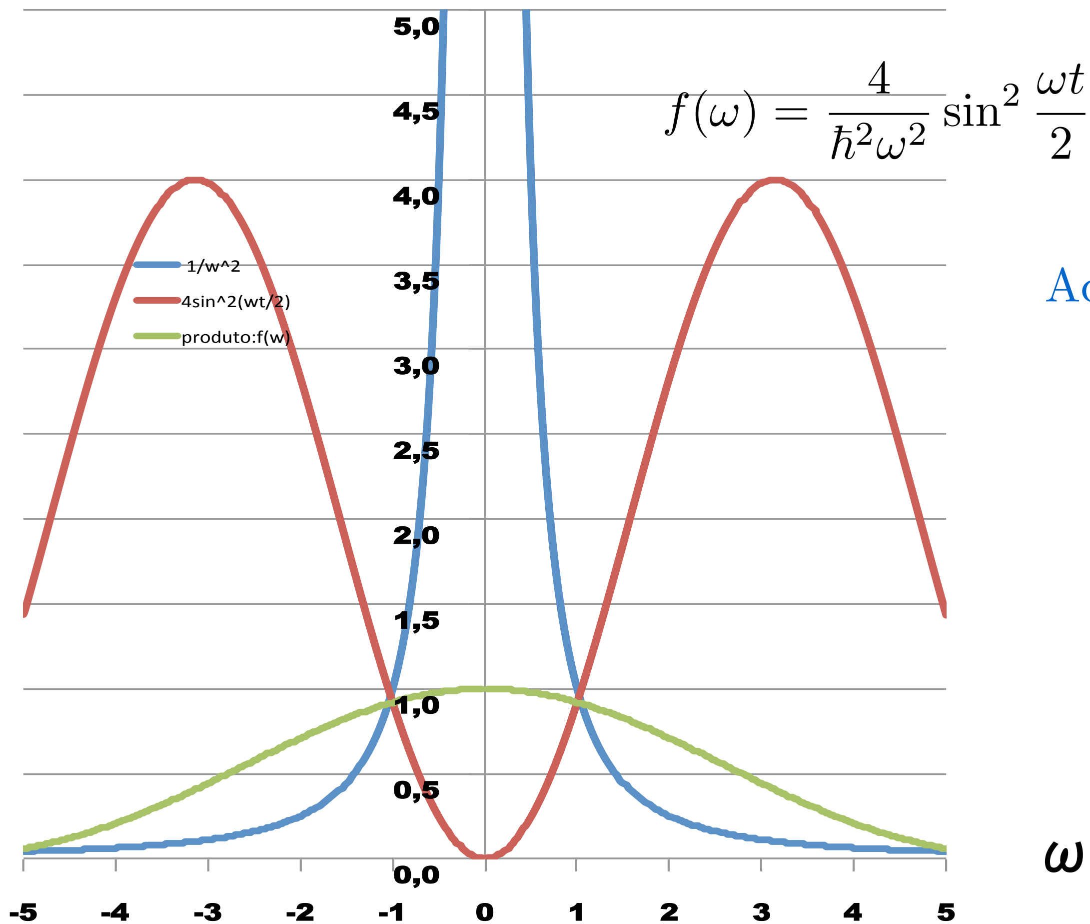
Conforme slide anterior

Suponha que existam muitos estados finais $\to$ praticamente um contínuo de energias $\omega \equiv \dfrac{E_n - E_i}{\hbar}$ com ω variando continuamente. Vamos plotar $\dfrac{|c_n^{(1)}(t)|^2}{|W_{ni}|^2}$ como função de ω para um dado t. Isto é, no slide seguinte apresentamos uma figura de $f(\omega) = \dfrac{|c_n^{(1)}(t)|^2}{|W_{ni}|^2} = \dfrac{4}{\hbar^2\omega^2} \sin^2\dfrac{\omega t}{2}$. Note: $\displaystyle\lim_{\omega\to 0} f(\omega) = \frac{4}{\hbar^2\omega^2}\left(\frac{\omega t}{2}\right)^2 = \frac{t^2}{\hbar^2}$

A amplitude cresce quadraticamente no tempo se $\omega \approx 0$.

Estranho! Porque?

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



$$f(\omega) = \frac{4}{\hbar^2\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2}$$

$$\begin{cases} \hbar = 1;\ t = 1; \\ \Delta\omega = \frac{2\pi}{t} = 6,3 \end{cases}$$

Aqui, $\omega = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$

Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

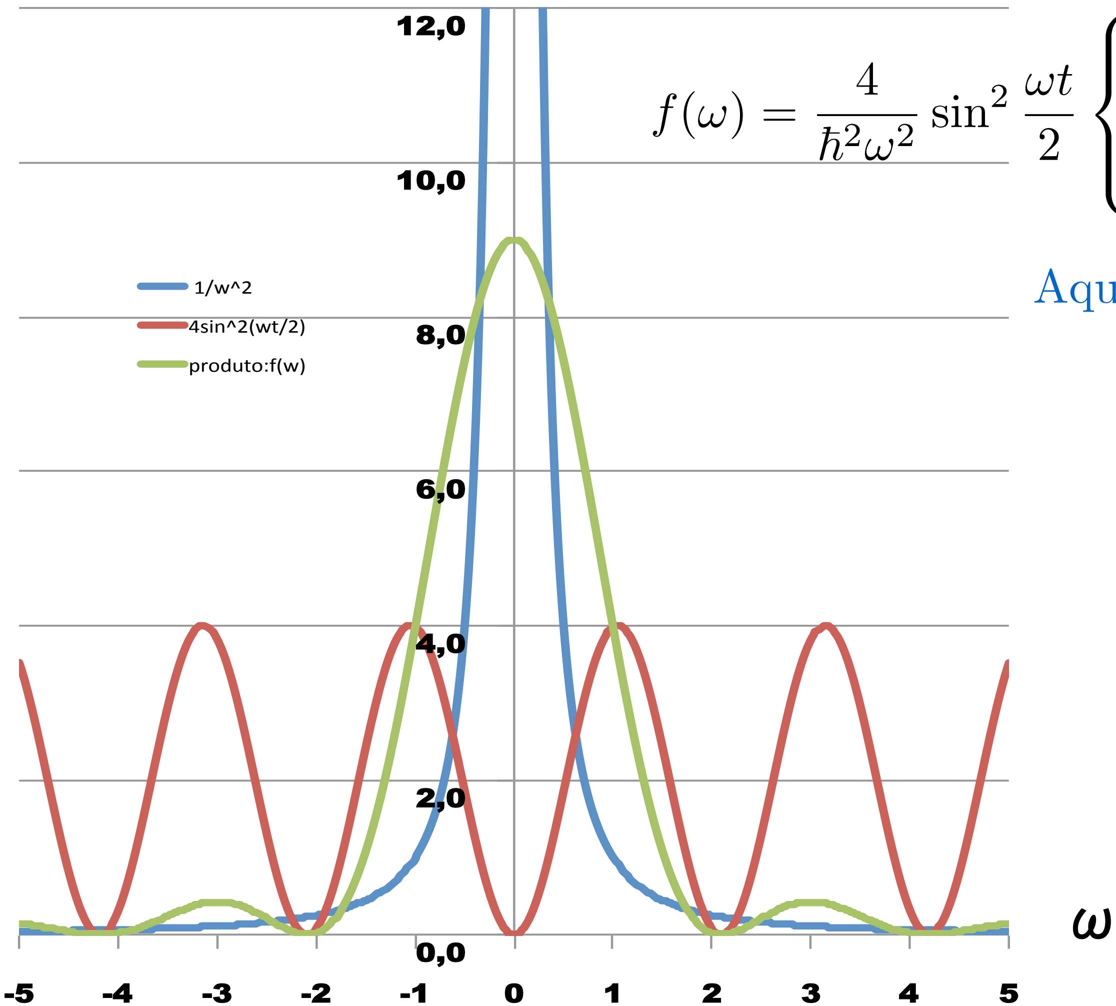
Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2\dfrac{\omega t}{2}$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante

$$f(\omega) = \frac{4}{\hbar^2\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2}$$

$$\begin{cases} \hbar = 1;\ t = 3; \\ \Delta\omega = \frac{2\pi}{t} = 2,1 \end{cases}$$

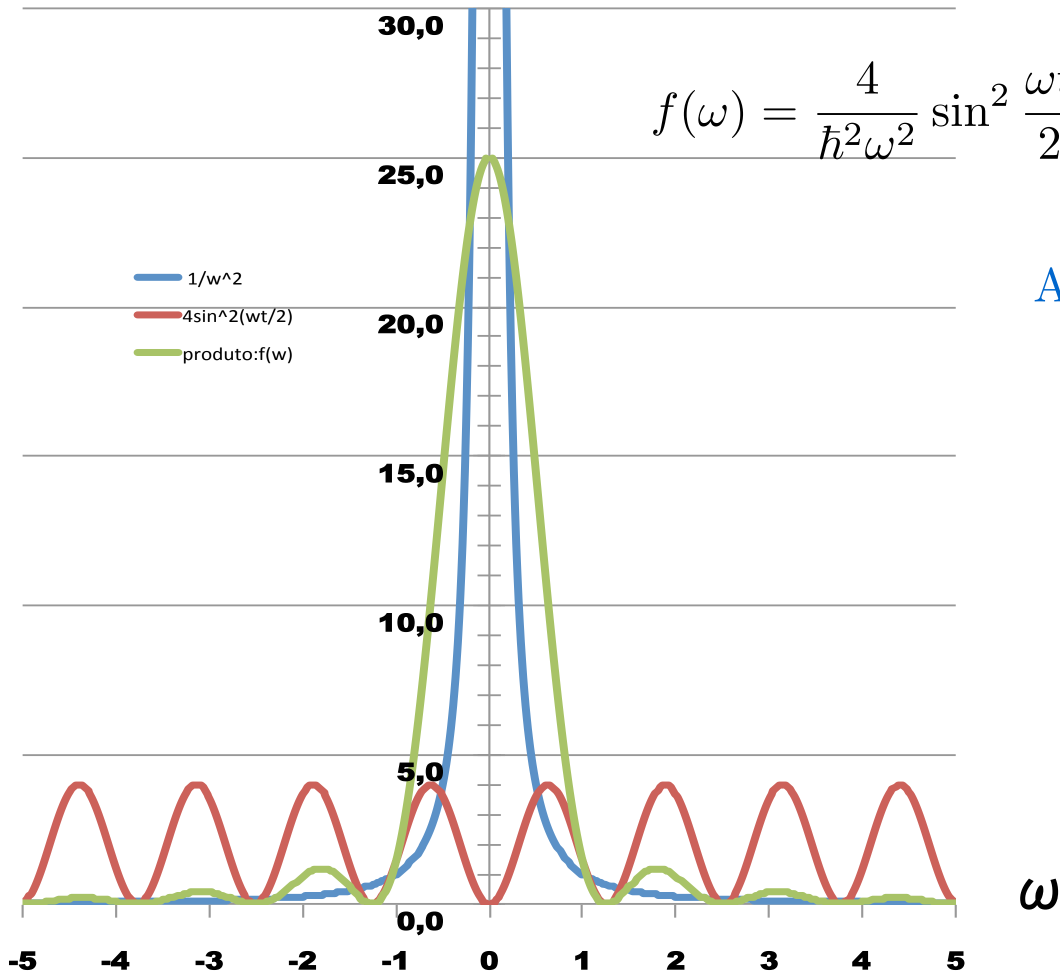
Aqui, $\omega = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$



Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2\dfrac{\omega t}{2}$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



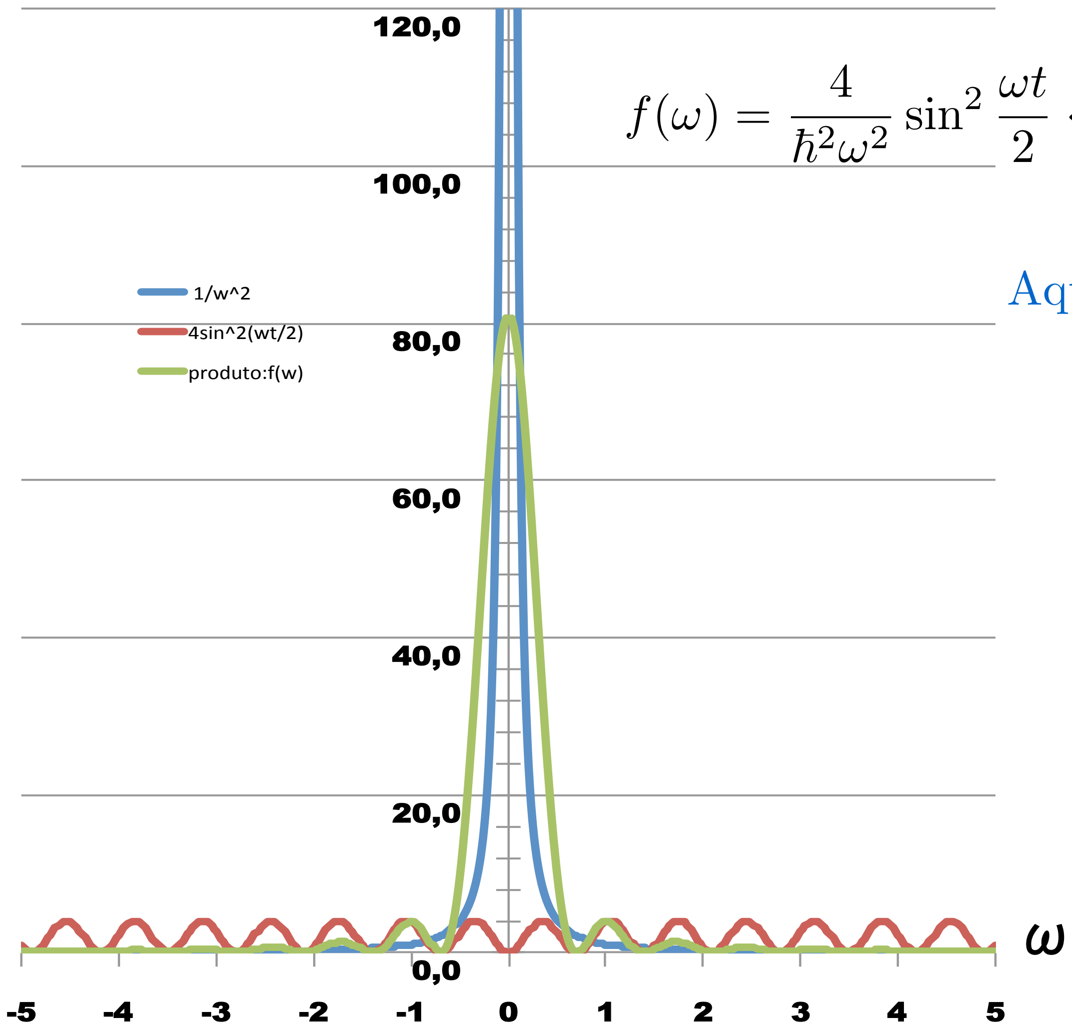
$$f(\omega) = \frac{4}{\hbar^2\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2} \quad \begin{cases} \hbar = 1;\ t = 5; \\ \Delta\omega = \frac{2\pi}{t} = 1,3 \end{cases}$$

Aqui, $\omega = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$

Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2\dfrac{\omega t}{2}$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



$$f(\omega) = \frac{4}{\hbar^2\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2} \quad \begin{cases} \hbar = 1;\ t = 9; \\ \Delta\omega = \frac{2\pi}{t} = 0,7 \end{cases}$$

$$\text{Aqui, } \omega = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

Quase toda a ação está entre $-\frac{2\pi}{t} \leq \omega \leq \frac{2\pi}{t}$.

Isso ocorre entre os primeiros zeros do $\sin^2\frac{\omega t}{2}$.

Potencial constante, conclusões:

- O máximo de probabilidade ocorre em $\omega = 0$, com $E_n = E_i$.
- Quando t cresce, $f(\omega)$ fica apreciável no intervalo $0 \leq |\omega| \leq \dfrac{2\pi}{t}$. Isso permite escrever a largura em energia dos estados finais possíveis (estados que podem ser excitados por terem amplitudes de probabilidade relevantes). Para isso, tome $|\omega|_{max} = \dfrac{E_n^{\max} - E_i}{\hbar} = \dfrac{\Delta E}{\hbar} \sim \dfrac{2\pi}{t} = \dfrac{2\pi}{\Delta t}$, onde $\Delta t = t$ é o tempo de potencial ligado. Pode-se expressar isso de uma forma conhecida: $\underbrace{\Delta E}_{\text{largura em energia envolvida no processo}} \Delta t \sim \hbar$.

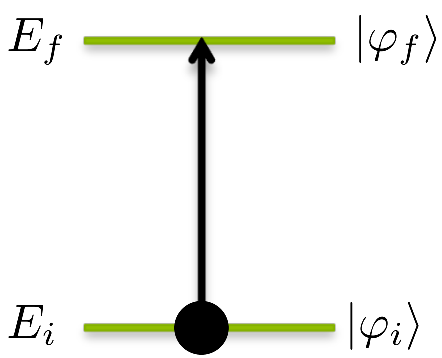
$$\therefore \begin{cases} \text{Se } \Delta t \text{ pequeno: a largura em energia é grande} \begin{cases} \text{transições podem violar} \\ \text{a conservação de energia} \end{cases} \\ \\ \text{Se } \Delta t \text{ grande: a largura em energia é pequena} \begin{cases} \text{transições respeitam} \\ \text{a conservação de energia} \end{cases} \end{cases}$$

- Para transições "finas", com $E_n = E_i$, temos $|c_n(t)|^2 = \dfrac{|W_{ni}|^2 t^2}{\hbar^2}$, ou seja, a probabilidade de haver mudança é quadrática em t. Precisamos discutir o o significado disso. Antes dessa discussão, na próxima aula, apresentaremos dois exemplos de transições sem perda de energia (para $\Delta E = 0$.)

Perturbação senoidal entre dois estados discretos.

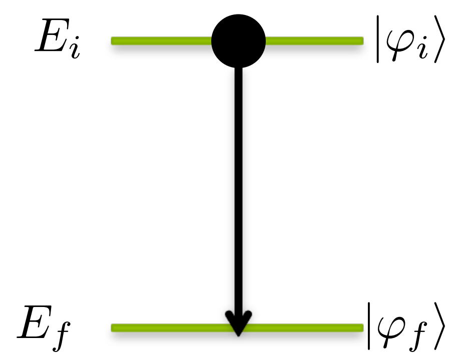
Um fenômeno de ressonância

- Caso cosseno: quando t está fixo, $\mathcal{P}_{if}(t)$ é uma função de ω (freqüência imposta). Veremos que está função tem um máximo quando $\omega \approx \omega_{fi}$ ou $\omega \approx -\omega_{fi}$.
- Tomando ω positivo (definição de nossa escolha), os dois casos tratam situações onde $\omega_{fi} > 0$ ou $\omega_{fi} < 0$.



absorve energia $(\hbar\omega)$

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} > 0$$



emite energia $(\hbar\omega)$

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} < 0$$

- Consideraremos o caso $\omega_{fi} > 0$ (situação da esquerda). As expressões do topo do slide 4 (cosseno) ou a do slide 3 (seno) mostram que trata-se da soma ou diferença de dois números complexos, A_+ e A_- com:

$$\boxed{A_\pm = \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} \pm \omega)t}}{\omega_{fi} \pm \omega} = -ie^{i\frac{(\omega_{fi} \pm \omega)}{2}t} \frac{\sin[\frac{(\omega_{fi} \pm \omega)}{2}t}{\frac{(\omega_{fi} \pm \omega)}{2}}}$$

Perturbação senoidal entre dois estados discretos.

Um fenômeno de ressonância

- Note que para $A_{\pm} = -ie^{i\frac{(\omega_{fi}\pm\omega)}{2}t}\frac{\sin[\frac{(\omega_{fi}\pm\omega)}{2}t]}{\frac{(\omega_{fi}\pm\omega)}{2}}$, os denominadores, respeitam

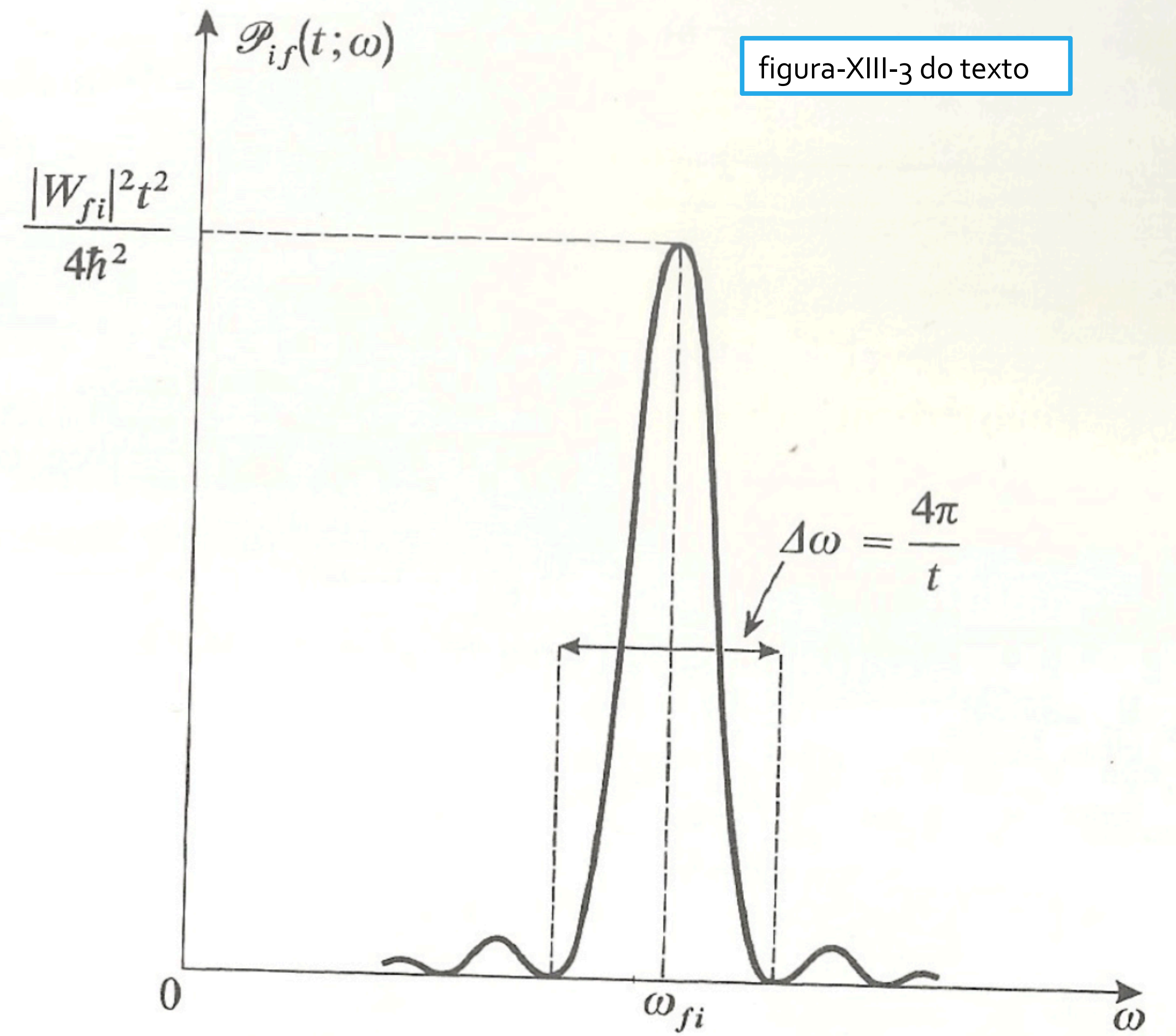
$$\text{as relações}\begin{cases}\lim_{\omega\to-\omega_{fi}}\text{ denominador de } A_{+}=0\therefore A_{+}\text{ cresce fortemente;}\\ \\ \lim_{\omega\to+\omega_{fi}}\text{ denominador de } A_{-}=0\therefore A_{-}\text{ cresce fortemente.}\end{cases}$$

- Note que $A_{\pm}$ só não explodem, porque os numeradores também vão à zero.
- Quando $\omega\to+\omega_{fi}(-\omega_{fi})\Rightarrow A_{-}(A_{+})$ é dito termo ressonante.
- Consideraremos o caso $|\omega-\omega_{fi}| << |\omega_{fi}|$. Nesta situação, podemos negligenciar o termo A_{+}, e escrever: $\mathcal{P}_{if}(t)=\frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\Big[A_{+}\pm A_{-}\Big]^2=\frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left[\frac{\sin\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}}\right]^2$
- Compare com o caso estudado, potencial constante, do slide 4 e verifique que diferem apenas pela troca ω_{fi} por $\omega_{fi}-\omega$. Note também que $A_{\pm}(-\omega)=A_{\mp}(\omega)$.
- Note que $\lim_{\omega\to\omega_{fi}}=\mathcal{P}_{if}(t)=\frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}t^2$. Isso acontecia no caso ω_{fi} indo à zero, para o potencial constante. Agora basta fazer a frequência imposta igual à frequência de Bohr que assistimos uma ressonância.
- Todas as figuras que fizemos, ficam agora centradas em ω_{fi}.

Perturbação senoidal entre dois estados discretos.

Um fenômeno de ressonância

figura-XIII-3 do texto



Perturbação senoidal entre dois estados discretos.

Um fenômeno de ressonância

- Um novo olhar para a largura da ressonância e a relação de incerteza tempo-energia. Novamente, $\Delta\omega$ pode ser definido como a distância entre os 2 zeros de $\mathcal{P}_{if}(t)$ ao redor de ω_{fi}. Tais zeros são obtidos quando o argumento do seno em $\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left[A_+ \pm A_-\right]^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left[\frac{\sin\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}}\right]^2$ são iguais à $\pm\,\pi$. Isto é $\frac{\omega_{fi}-\omega_{\mp}}{2}t = \pm\pi \Rightarrow (\omega_+ - \omega_-)\frac{t}{2} = 2\pi \Rightarrow \Delta\omega = \frac{4\pi}{t}$.
- Para o potencial constante no tempo, a largura foi associada a distribuição de estados finais. Agora, é a largura da freqüência imposta ao redor de dois níveis. A mensagem é: as transições ocorrem se a freqüência da perturbação estiver no intervalo $\omega_{fi} - \frac{2\pi}{t} < \omega < \omega_{fi} + \frac{2\pi}{t}$. Quanto maior for o tempo de exposição, menor pode ser a largura de frequências.
- Como $\mathcal{P}_{if}^{\max(1)}(t) = \lim_{\omega\to\omega_{fi}} \mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}t^2$, quanto vale a altura do segundo máximo à sua direita? Ocorre com o "argumento do seno" $= \frac{3\pi}{2}$.

$5\%\ \mathcal{P}_{if}^{\max(1)}(t)$

$$\therefore \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \frac{\omega_{fi}-\omega}{2} = \frac{3\pi}{2t} \Rightarrow \mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left[\frac{1}{\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}}\right]^2 = \frac{|W_{fi}|^2 t^2}{9\pi^2\hbar^2}.$$

Perturbação senoidal entre dois estados discretos.

Um fenômeno de ressonância

- Validade do tratamento por perturbação.
  Na nossa discussão, fizemos a hipótese que $\omega \approx \omega_{fi}$ e desprezamos A_+ com respeito à A_-. Seria bom comparar melhor A_+ com A_-. A figura do slide 13 diz respeito à A_-. Como seria A_+?
- Primeiro note (ver slide 12) que $\left|A_+(\omega)\right| = \left|A_-(-\omega)\right|$, simétrico com respeito à $\omega = 0$.
- Isso permite concluir que se a largura da ressonância for muito menor que a distância entre os picos de A_+ e A_-, A_+ pode ser negligenciado na região da ressonância. Ou seja, se $\Delta\omega << 2\omega_{fi}$ nossa análise está correta. Mas lembre que $\Delta\omega = \dfrac{4\pi}{t}$ e essa exigência implica em $\dfrac{4\pi}{t} << 2\omega_{fi}$. Isso é o mesmo que pedir que $t >> \dfrac{2\pi}{|\omega_{fi}|} \approx \dfrac{2\pi}{\omega} = T$ (período de 1 de ciclo). Em outras palavras, a aproximação é boa se no intervalo $[0, t]$ a perturbação realiza diversas oscilações (um convite ao sistema entrar em ressonância).
- A Perturbação constante $T = \infty$ nunca satisfaz a condição $t >> \dfrac{2\pi}{\omega} = T$.