Teoria de Perturbação dependente do tempo.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- Se E_f pertence ao espectro contínuo de H_0, isto é, se o estado final é caracterizado por um índice que varia continuamente, nós não podemos medir a probabilidade de encontrar o sistema em um estado bem definido $|\varphi_f\rangle$, no instante t.
- No Capítulo III (os postulados - revisão nas primeiras aulas desta disciplina) aprendemos que $\left|\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle\right|^2$ é, neste caso, uma densidade de probabilidade. O resultado de uma medida envolve uma integração desta densidade de probabilidade sobre um certo grupo de estados finais.
- Na aula de hoje, adaptaremos a teoria de perturbação dependente do tempo, desenvolvida na aula passada, para que possa ser aplicada em casos como esse.
- Veremos que esse caso permitirá resolver e entender o problema de uma probabilidade de transição infinita (fisicamente inaceitável) para o caso discreto, resultado obtido com a perturbação oscilante, quando $\omega \to \omega_{fi}$.
- Começaremos por lembrar como integrar um contínuo de estados finais a partir de densidades de estados. Para tanto, usaremos um exemplo de espalhamento de uma partícula, sem spin, por um potencial $W(\mathbf{r})$.

Teoria de Perturbação dependente do tempo.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- O estado $|\psi(t)\rangle$ da partícula no instante t pode ser expandido como uma combinação de estados $|\mathbf{p}\rangle$ com momentos lineares bem definidos e energias $E = \dfrac{\mathbf{p}^2}{2m}$. Tanto energia (H_0) como momento linear $\mathbf{P}$ são observáveis com espectro contínuo no caso de uma partícula livre e seus auto-estados formam um C.C.O.C.
- As auto-funções de $H_0 = \dfrac{\mathbf{P}^2}{2m}$ são as ondas planas $\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}$.
- Estando o sistema no estado $|\psi(t)\rangle$, quanto vale a densidade de probabilidade associada com a medida do momento linear? Vimos que é $\left|\langle \mathbf{p}|\psi(t)\rangle\right|^2$.
- E a probabilidade de encontrar a partícula com momento linear $\mathbf{p}_f$? Vimos que por força de ser um contínuo de possibilidades, essa probabilidade é dada por $\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \displaystyle\int_{\mathbf{p}_f \in D_f} d^3p \left|\langle \mathbf{p}|\psi(t)\rangle\right|^2$ onde D_f é uma região centrada em $\mathbf{p}_f$, que respeita $\begin{cases} \text{As direções de } p_f \text{ estão dentro de um ângulo sólido } d\Omega_f; \\ \text{Seu módulo associado à energias entre } E_f - \frac{\delta E_f}{2} \text{ e } E_f + \frac{\delta E_f}{2} \end{cases}$
- Nestas condições $\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t)$ é probabilidade de obter um sinal no detector.
- Se estado final é caracterizado pela energia $\Rightarrow$ mudança de variável.

Teoria de Perturbação dependente do tempo.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- Mudança de variável: Lembre que $d^3p = p^2 dp d\Omega$, é o elemento de volume que aparece em $\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \int_{\mathbf{p}_f \in D_f} d^3p \left|\langle \mathbf{p}|\psi(t)\rangle\right|^2$. Nada impede de trocá-lo por $d^3p = \rho(E) dE d\Omega$, uma vez que E e p estão relacionados por $E = \dfrac{p^2}{2m}$.

  Basta exigir que $\rho(E) dE d\Omega = p^2 dp d\Omega \Rightarrow \rho(E) = p^2 \dfrac{dp}{dE} = \dfrac{p^2}{\frac{dE}{dp}} = \dfrac{p^2}{\frac{p}{m}} = mp$,

  ou seja $\rho(E) = m\sqrt{2mE}$.
- E assim, podemos escrever que $\boxed{\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \int_{E \in \delta E_f; \Omega \in \delta\Omega_f} d\Omega\, \rho(E) dE \left|\langle \mathbf{p}|\psi(t)\rangle\right|^2,}$ é a probabilidade de uma partícula, ao colidir com W, sair com momento $\mathbf{p}_f$, dentro de uma faixa de energia (δE_f) e uma faixa de ângulo sólido $d\Omega_f$.
- Isso que fizemos é generalizável.
  - Suponha que $H_0|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, onde α representa a parte contínua do espectro de H_0.
  - Queremos, sabendo que no instante t, o sistema se encontra no estado $|\psi(t)\rangle$, calcular a probabilidade $\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t)$ de encontrar o sistema, em uma medida, em um dado grupo de estados finais.

Teoria de Perturbação dependente do tempo.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- Esse grupo é caracterizado pelo domínio D_f de valores do parâmetro α, centrado em α_f (considere que seus valores formam um contínuo).

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

- Novamente, nada impede de trocarmos as váriáveis para $E, \beta,$ onde β aparece, caso H_0 não forme um C.C.O.C..
- Exigimos que $d\alpha = \rho(\beta, E)\, d\beta\, dE$ para escrever:

$$\boxed{\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t) = \int_{\beta\in\delta\beta_f; E\in\delta E_f} \rho(\beta, E) d\beta\, dE\, \Big|\underbrace{\langle\alpha|}\, \psi(t)\rangle\Big|^2.}$$

podíamos trocar $\langle\alpha|$ por: $\langle\beta, E|$

- **Regra de ouro de Fermi.**
  Considere $|\psi(t)\rangle,$ um estado normalizado do sistema no instante t. Suponha que esse sistema estivesse inicialmente no estado $|\varphi_i\rangle,$ um estado pertencente ao espectro discreto de H_0. Poderíamos trocar a notação $\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t)$ por $\delta\mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t)$ para lembrar desta condição inicial.
- O que foi feito para o caso discreto, será extendido agora para o caso do contínuo. Começaremos por W constante.

Regra de ouro de Fermi.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- Para $W(t) = \hat{W}\cos\omega t$ com $\omega = 0$ (caso de uma perturbação constante no tempo), obtivemos $\delta\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}F(t,\omega_{fi}) = \left|\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle\right|^2$, com

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

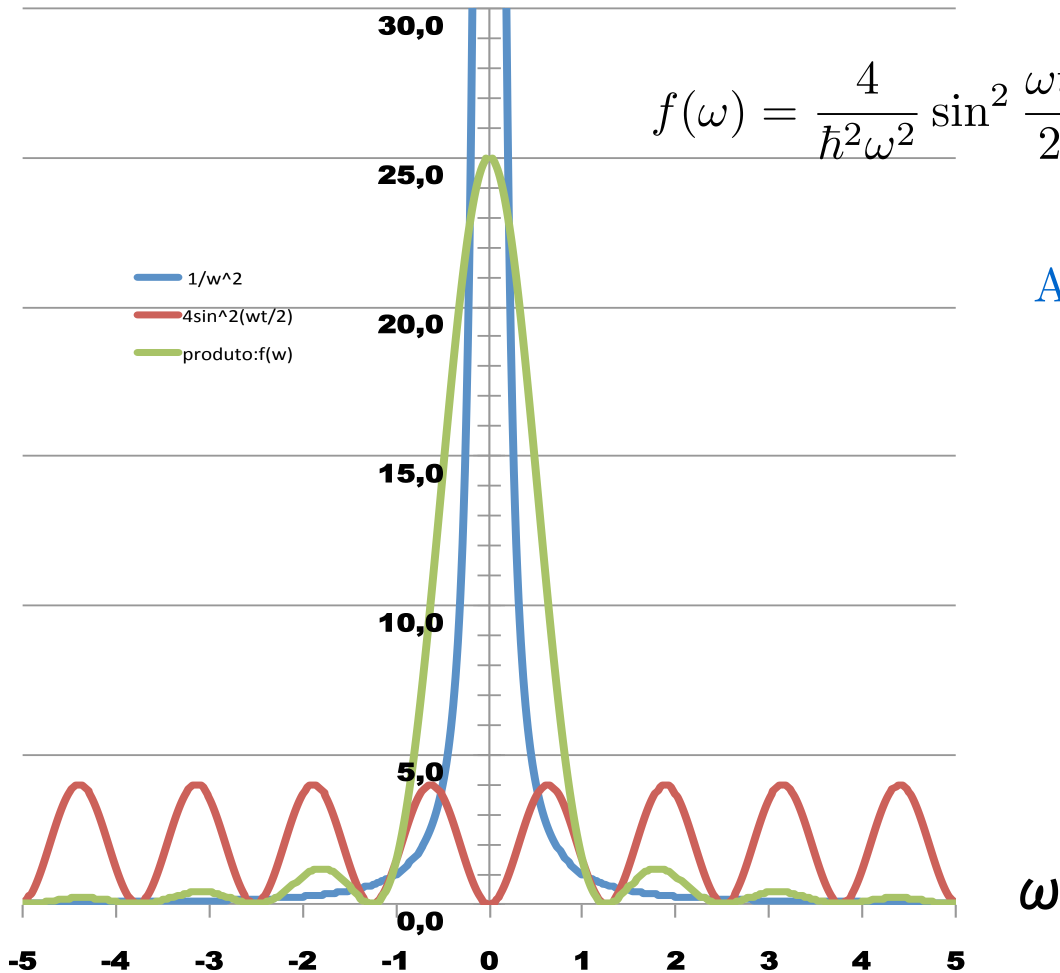
- ○ $\left|\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle\right|^2$ pode ser trocado por $\left|\langle\beta,E|\psi(t)\rangle\right|^2$ e por analogia: $\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}F(t,\omega_{fi})$ por $\frac{|\langle\beta,E|W|\varphi_i\rangle|^2}{\hbar^2}F(t,\omega_{fi})$, para escrevermos

$$\boxed{\delta\mathcal{P}(\varphi_i,\alpha_f,t) = \frac{1}{\hbar^2}\int_{\beta\in\delta\beta_f;E\in\delta E_f} d\beta\ dE\ \rho(\beta,E)\ \left|\langle\beta,E|W|\psi(t)\rangle\right|^2 F(t,\omega_{fi}).}$$

- ○ A função $F(t,\omega_{fi})$, varia rapidamente quando $E = E_i$ (ver detalhes na aula passada). Para facilitar, os próximos 2 slides trazem o comportamento típico.
- ○ No limite, quando t vai para infinito, é possível mostrar que

$$\lim_{t\to\infty} F(t,\omega_{fi}) = \pi t\delta\left(\frac{E-E_i}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t\delta(E-E_i).$$

Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante



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

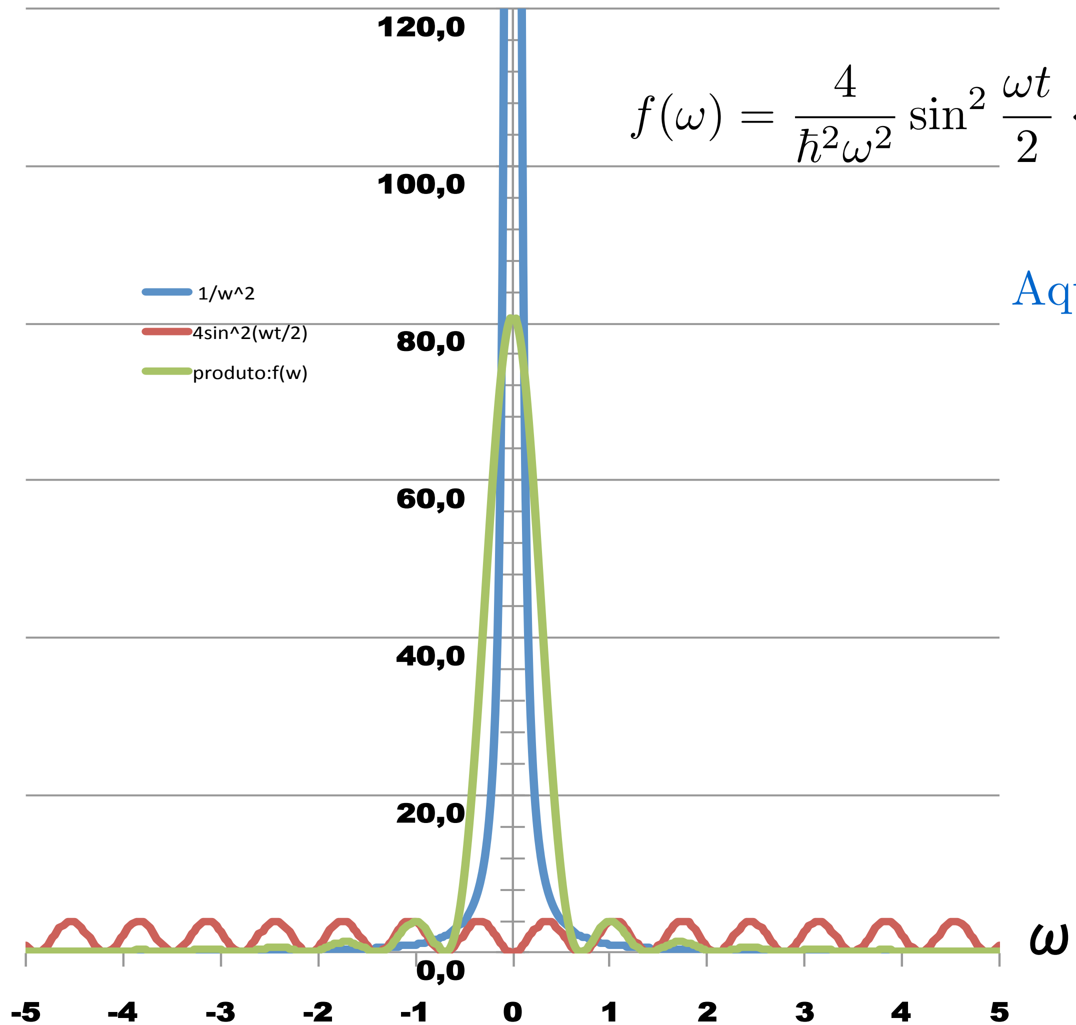
$$\begin{cases} \hbar = 1;\ t = 5; \\ \Delta\omega = \frac{2\pi}{t} = 1,3 \end{cases}$$

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



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

$$\begin{cases} \hbar = 1;\ t = 9; \\ \Delta\omega = \frac{2\pi}{t} = 0,7 \end{cases}$$

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

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

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

Regra de ouro de Fermi.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- Para facilitar, suponha que o intervalo $\delta\beta_f$ é muito pequeno e o integrando não muda com β. Use isso para escrever

$$\begin{cases} \delta\mathcal{P}(\varphi_i,\alpha_f,t) = \delta\beta_f \dfrac{2\pi}{\hbar} t \left|\langle\beta_f, E_f = E_i|W|\varphi_i\rangle\right|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i), \text{ se } E_i \in \delta E_f, \\ \delta\mathcal{P}(\varphi_i,\alpha_f,t) = 0 \text{ se } E_i \notin \delta E_f. \end{cases}$$

  - Esse resultado é familiar para o caso de uma perturbação constante no tempo: a perturbação constante induz apenas transições entre estados degenerados.
- A probabilidade cresce linearmente com o tempo. Consequentemente a probabilidade de transição por unidade de tempo (a taxa de transição) é dada por: $\delta\mathcal{W}(\varphi_i,\alpha_f) \equiv \dfrac{d}{dt}\delta\mathcal{P}(\varphi_i,\alpha_f,t)$. Note que é independente do tempo.

Se definirmos $\mathbb{W}(\varphi_i,\alpha_f) = \dfrac{\delta\mathcal{W}(\varphi_i,\alpha_f)}{\delta\beta_f}$ $\Bigg\{$ densidade de probabilidade de transição por unidade de tempo e por unidade de intervalo da variável β_f

Com isso, podemos escrever a **Regra de Ouro de Fermi**:

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

Comentários sobre a Regra de ouro de Fermi.

Acoplamento com estados do espectro contínuo

- E se $W(t)$ for senoidal, $\hat{W}\sin\omega t$? O que muda?

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

- Aplicação para o problema de espalhamento.
  - Onde a perturbação W é local, isto é $\langle\mathbf{r}|W|\mathbf{r}'\rangle = W(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$.
  - E o estado inicial do sistema é de uma partícula livre: $|\psi(t=0)\rangle = |\mathbf{p}_i\rangle$.
  - Após a colisão com o potencial, queremos a taxa de transição para o estado final $|\mathbf{p}_f\rangle$. O que pode ser escrito como:

$$\mathbb{W}(\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_f) = \frac{2\pi}{\hbar}\,\left|\langle\mathbf{p}_f|W|\mathbf{p}_i\rangle\right|^2\rho(\beta_f, E_f = E_i)$$

  - Considerando $\begin{cases}\rho(E) = m\sqrt{2mE} \\ \langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}}{\hbar}}\end{cases}$ $\Rightarrow$ podemos escrever:

$$\mathbb{W}(\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_f) = \frac{2\pi}{\hbar}\,m\sqrt{2mE_i}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^6\left|\int d^3r\; e^{i\frac{(\mathbf{p_i}-\mathbf{p_f})\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}W(\mathbf{r})\right|^2$$

Se dividirmos pela corrente de probabilidade inicial $J_i = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{\hbar k_i}{m}$

temos: $$\frac{\mathbb{W}(\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_f)}{J_i} = \sigma(\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_f) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int d^3r\; e^{i\frac{(\mathbf{p_i}-\mathbf{p_f})\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}W(\mathbf{r})\right|^2$$

1º Termo de Born