1ª aula

Métodos de Aproximação

- Poucos problemas podem ser resolvidos exatamente
  ↓
  - A Arte de Aproximar (controlar erros é fundamental)
  - Os computadores estão aí p/ ajudá-lo

Teoria de Perturbação independente do tempo: caso não-degenerado

$$H = H_0 + V$$

$V=0 \rightarrow$ problema resolvido, isto é

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

conhecemos $\{|n^0\rangle\}$ e $\{E_n^{(0)}\}$

Objetivo: Achar uma solução aproximada para

$$(H_0 + V)|n\rangle = E_n |n\rangle$$

onde V é definido por perturbação
↓
De um modo geral não é o potencial completo e sim um pedaço dele.

Ex: Átomo de Hidrogênio em campo elétrico (ou magnético) externo

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

$V \to$ potencial devido à interação com E (ou B)

Ao invés de resolver

$$(H_0 + V)\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$$

costuma-se resolver

$$(H_0 + \lambda V)\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$$

onde λ é um parâmetro real contínuo

- este parâmetro é introduzido para controlar o "número" de vezes que a perturbação entra na conta
- no final tomamos $\lambda = 1$
- pense no λ como um parâmetro variando entre 0 e 1. Caso $\lambda = 0 \to$ corresponde à Hamiltoniana sem perturbação; caso $\lambda = 1 \to$ corresponde ao problema que queremos resolver

• Em situações físicas onde vale teoria de perturbação esperamos ver uma transição suave de $|n^{(0)}\rangle$ p/ $|n\rangle$ e $E_n^{(0)}$ p/ E_n qdo λ é ligado de 0 p/ 1

O método consiste na expansão dos autovalores de energia e dos autokets de energia em potências de λ. Se o método for de interesse prático, boas aproximações podem se obter com 1 ou 2 termos na expansão

<u>O problema de 2 estados</u>

Sabemos resolver exatamente. Depois faremos uma expansão em λ e depois compararemos com a teoria de perturbação.

Suponha $H = \| H \| = \| H_0 \| + \lambda \| V \|$

$$= \sum_{nn'} |n^{(0)}\rangle \underbrace{\langle n^{(0)}| H_0 | n'^{(0)}\rangle}_{E_n^{(0)}\delta_{nn'}} \langle n'^{(0)}| + \lambda \sum_{nn'} |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| V | n'^{(0)}\rangle \langle n'^{(0)}|$$

pois $H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$

suponha $V_{11} = V_{22} = 0$

$$= E_1^{(0)} |1^0\rangle\langle 1^0| + E_2^{(0)} |2^0\rangle\langle 2^0| + \lambda V_{12} |1^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{21} |2^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}|$$

na representação matricial

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)} \end{pmatrix}$$

Suponha V_{12} e V_{21} reais. Como V é Hermiteano, isto é $V_{12} = V_{21}^*$

então $V_{12} = V_{21}^* = V_{21}$

Este caso é geral: basta ajustar a fase de $|2^{(0)}\rangle$ relativa a de $|1^{(0)}\rangle$

Exercício: diagonalize esta matriz e obtenha

$$\begin{Bmatrix} E_1 \\ E_2 \end{Bmatrix} = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}{4} + \lambda^2 |V_{12}|^2\right]}$$

suponha $\lambda |V_{12}| << |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|$

podemos então usar

$$\sqrt{1+\epsilon} = 1 + \frac{1}{2}\epsilon - \frac{\epsilon^2}{8} + \dots$$ e obter

$$E_1 = E_1^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})} + \dots$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})} + \dots$$

converge só se $|V_{12}| < \frac{|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|}{2}$

Obteremos estas fórmulas por teoria de perturbação daqui a pouco

Vocês poderiam ficar com a impressão que teoria de perturbação sempre existe para uma perturbação suficientemente fraca. Infelizmente isto não é sempre o caso. Para ilustrar isto, considere uma partícula em um potencial de caixa fraco de profundidade V_0 ($V = -V_0$ p/ $-a < x < a$, $V = 0$ p/ $|x| > a$). Este problema admite um estado ligado de energia

$$E = -\left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}\right) |\lambda V|^2 \quad , \quad \lambda > 0 \text{ p/ atração}$$

tentados a interpretar isto como um resultado de teoria de perturbação de 2ª ordem onde H_0 é partícula livre e V é a caixa rasa. Bobagem qdo trocamos o sinal de λ o resultado continua negativo (no caso real não há estado ligado p/ barreira rasa)

Desenvolvimento formal da Expansão da Perturbação

Suponha conhecida

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

$$\sum_n |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = 1 \quad \text{ou seja} \quad \{|n^{(0)}\rangle\} \text{ completo}$$

Espectro não-degenerado (p/ começar)

Queremos $(H_0 + \lambda V)\, |n\rangle_\lambda = E_n^{(\lambda)} |n\rangle_\lambda$

lembrete

qdo λ cresce a partir de zero, esperamos

$$E_n^{(0)} \to E_n$$

É uma boa idéia definir $\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)}$

$$\therefore\; E_n = \Delta_n + E_n^{(0)}$$

que substituindo na eq. S. acima

$$(H_0 + \lambda V)\, |n\rangle = (\Delta_n + E_n^{(0)})\, |n\rangle .$$

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n\rangle = (\lambda V - \Delta_n)\, |n\rangle$$

Tentados a inverter $(E_n^{(0)} - H_0)$ p/ $(E^{(0)} - H_0)^{-1}$

cuidado e se encontrar $|n^{(0)}\rangle \to (E^{(0)} - H_0)^{-1} |n^{(0)}\rangle \to \infty$

a menos que $(\lambda V - \Delta_n)\, |n\rangle$ não tenha componente em $|n^{(0)}\rangle$

será que tem? Como verificar?

tome $\langle n^{(0)} | \lambda V - \Delta_n | n \rangle$

$$= \langle n^{(0)} | H - H_0 - \Delta_n | n \rangle = \langle n^{(0)} | \Delta_n - \Delta_n | n \rangle = 0$$

Se definissemos $\phi_n \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|$

o operador inverso $\frac{1}{E - H_0}$ é bem definido qdo

multiplicado pela direita por ϕ_n, isto é

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n = \sum_{k \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|$$

note que $(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \mathbb{1}(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$

$$= \left(|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| + \phi_n \right)(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

$$= \phi_n (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

assim a inversão direta de nossa equação levaria a

$$|n\rangle \overset{?}{=} \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

será que está certo? tome $\lambda = 0$, neste caso esperaríamos $\Delta_n = 0$
e $|n\rangle \to |n^{(0)}\rangle$!

se colocarmos $\lambda = 0$ e $\Delta_n = 0$ na eq. acima $|n\rangle = 0$ ∴ errado está faltando alguma coisa. Que tal antes de inverter tomarmos

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n\rangle = (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

$$(E_n^{(0)} - H_0)\left(|n\rangle - c_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle\right) = \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

$$|n\rangle - c_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

i.e. $|n\rangle = c_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$

se tomarmos agora $\lim_{\lambda \to 0} c_n(\lambda) = 1$ teremos

a condição desejada, isto é

qdo $\lambda \to 0$ $|n\rangle \to |n^{(0)}\rangle$

note que $\langle n^{(0)}|n\rangle = c_n(\lambda)\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \underbrace{\langle n^{(0)}|k\rangle}_{0} \ldots$

$$\therefore \boxed{c_n(\lambda) = \langle n^{(0)}|n\rangle}$$

Tomaremos por conveniência $\langle n^{(0)}|n\rangle = C_n(\lambda) = 1$

e não $\langle n|n\rangle = 1$ p/ $\forall \lambda$

É comum escrevermos

$$\frac{1}{E_n^{(0)}-H_0}\phi_n \rightarrow \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}$$

$$\frac{1}{E_n^{(0)}-H_0}\phi_n = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)}-H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)}-H_0}\phi_n$$

assim
$$\boxed{|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle}$$

Note tb que se $\langle n^{(0)}|n\rangle = 1$

e $\langle n^{(0)}|\lambda V - \Delta_n|n\rangle = 0$

então $\boxed{\Delta_n = \lambda\langle n^{(0)}|V|n\rangle}$

As duas equações dos retângulos representam a chave da questão. Nossa estratégia será expandir $|n\rangle$ e Δ_n em potências de λ e então empatar coeficientes.

Isto é justificável pois as duas equações tem que valer p/ $\forall \lambda$ ($0 \le \lambda \le 1$)

Convece por escrever

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots$$

$$\Delta_n = \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \dots$$

Substituindo isto em $\Delta_n = \lambda \langle n^{(0)}|V|n\rangle$

temos:

$$\lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \lambda^3 \Delta_n^{(3)} + \dots = \lambda \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

$$+ \lambda^2 \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle$$

$$+ \lambda^3 \langle n^{(0)}|V|n^{(2)}\rangle \quad \dots$$

$$\therefore \quad \Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \qquad \mathcal{O}(\lambda^1)$$

$$\Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle \qquad \mathcal{O}(\lambda^2)$$

$$\Delta_n^{(3)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(2)}\rangle \qquad \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$\Delta_n^{(N)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(N-1)}\rangle \qquad \mathcal{O}(\lambda^N)$$

$\therefore$ p/ calcular $\Delta_n^{(N)}$ (o deslocamento de ordem N)

é preciso conhecer $|n\rangle$ de ordem $(N-1)$