15ª aula

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Até aqui, resolvemos o problema a partir de

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle$$

No formalismo dependente do tempo

$$|\phi\rangle \underset{V}{\overset{t}{\rightsquigarrow}} |\psi\rangle$$

o que comanda esta mudança é

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\psi,t\rangle = V|\psi,t\rangle$$

ket dependente do tempo na presença de V

Condição de contorno? $t \to -\infty$ a partícula era livre

que tal o artifício (já usado antes)

$$V \to \lim_{\eta \to 0} V e^{+\eta t}$$

Se soubermos a solução do seguinte problema

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = \delta(t-t')$$

A equação diferencial completa tem uma equivalente integral dada por:

$$|\psi^{(+)};t\rangle = |\phi;t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t,t')\, V |\psi^{(+)};t'\rangle dt'$$

para verificar isto

tome (aplique) $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)$ dos dois lados

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\psi^{(+)};t\rangle = \underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\phi;t\rangle}_{0}$$

$$+ \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t')}_{\delta(t-t')} V|\psi^{(+)};t'\rangle\, dt'}_{V|\psi^{(+)};t\rangle}$$

cqd

p/ obter a solução de

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = \delta(t-t')$$

exigimos primeiro que

$G_+(t,t')$ só é diferente de zero se $t > t'$

Impomos a condição de contorno retardada

$$G_+(t,t') = 0 \quad \text{se } t < t'$$

A solução será então, p/ $t > t'$, a solução da equação

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = 0 \quad \text{e} \therefore \quad G_+(t,t') = A(t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$$

em $t=t'$ $\quad \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+ = \delta(t-t')$

lembrando que

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t') = \delta(t-t')$$

Sugerimos um G_+ dado por:

$$G_+(t,t') = \frac{-i}{\hbar}\theta(t-t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}$$

↳ note que 
0 se $t<t'$
1 se $t \geq t'$

Note tb que

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = i\hbar \times \frac{-i}{\hbar}\left[\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t')\right] e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} +$$

$$\underbrace{i\hbar \times \frac{-i}{\hbar}}_{1}\,\theta(t-t')\cdot\frac{-i}{\hbar}H_0\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} - H_0\cdot\frac{-i}{\hbar}\,\theta(t-t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}$$

$$= \delta(t-t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} + \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar}H_0 + \frac{i}{\hbar}H_0\right)}_{=\,0}\theta(t-t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}$$

$= \delta(t-t')$ → confirmando nossa escolha

↓

usamos $f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0)$

$$|\Psi^{(+)};t\rangle = |\phi,t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t,t')\, V\, |\Psi^{(+)};t'\rangle\, dt'$$

$$G_+(t,t') = \frac{-i}{\hbar}\,\theta(t-t')\, e^{-\frac{iH_0(t-t')}{\hbar}}$$

note que o $+\infty$ pode ser trocado por $t_{//}$; operador evolução temporal

será que a condição de contorno esta correta?

Qto vale $|\Psi^{(+)},t\rangle$ qdo $t \to -\infty$

$$|\Psi^{(+)};t\rangle = |\phi;t\rangle$$ pois $G_+(t,t')$ será zero p/ $\forall$ valor finito de t' qdo $t \to -\infty$

Suponha agora que $|\Psi,t\rangle$ é solução estacionária de H

e $|\phi,t\rangle$ é solução estacionaria de H_0

Isto é o mesmo que dizer

$$|\Psi,t\rangle = |\Psi\rangle e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$|\phi;t\rangle = |\phi\rangle e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

note o mesmo $\underline{\underline{E}}$

(independente se o potencial esta ligado ou não)

Colocando isto na equação de $|\Psi^{(+)},t\rangle$ temos

$$e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|\Psi\rangle = |\phi\rangle e^{-\frac{iEt}{\hbar}} + \int_{-\infty}^{t} \frac{-i}{\hbar}\,\theta(t-t')\, e^{-\frac{iH_0(t-t')}{\hbar}}\, V\, e^{-\frac{iEt'}{\hbar}}|\Psi\rangle$$

que em $t=0$, temos

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \int_{-\infty}^{0} \frac{-i}{\hbar} \underbrace{\theta(-t')}_{1} e^{+\frac{i(H_0-E)}{\hbar}t'} V(t')|\psi\rangle \, dt'$$

pois $-t'$ é sempre positivo

lembrando que $V(t)$, de fato é $e^{\eta t} V$

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \quad -\frac{i}{\hbar} \lim_{t''\to-\infty} \int_{t''}^{0} dt' \, e^{\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t'} V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= |\phi\rangle \quad -\frac{i}{\hbar} \lim_{t''\to-\infty} \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)} e^{\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t'}\Big|_{t''}^{0} V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\eta\hbar} \Big(1 - \underbrace{\lim_{t''\to-\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t''}}_{\substack{\text{mas} \\ \lim_{t''\to-\infty} e^{\eta\hbar t''} = 0}} \Big) V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$\therefore \boxed{|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\eta\hbar} V|\psi^{(+)}\rangle}$$ Eq. Lip. Sch.

Conexão com a teoria de perturbação dependente do tempo

Se o potencial fosse fraco conseguiríamos calcular taxas de transição (Regra de ouro). Espalhamento deve estar ligado à transições entre "dois" contínuos ($\vec{k}$ e $\vec{k}''$)

inicialmente $|\vec{k}\rangle$ depois $\exists$ chance de ser $|\vec{k}''\rangle$

lembra que

$$c_n(t) = \langle n | U_I(t,t_0) | i \rangle \quad e \quad |c_n(t)|^2 \rightarrow \text{probabilidade de transição}$$

onde $|i, t_0; t_0\rangle_I = |i\rangle$

$$|i, t_0; t\rangle_I = U_I(t,t_0)|i\rangle = \sum c_n(t)|n\rangle$$

Assim, em primeira ordem $U_I^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\,dt'$

$$\langle \vec{k}'' | U_I^{(1)}(t,-\infty) | \vec{k} \rangle =$$

$$= \underbrace{\langle \vec{k}'' | \vec{k} \rangle}_{=0} - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \langle \vec{k}'' | V_I(t') | \vec{k} \rangle\, dt'$$

A probabilidade de transição é

$$|\langle \vec{k}'' | U_I^{(1)}(t,-\infty) | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \vec{k}'' | e^{\frac{iH_0 t'}{\hbar}} V e^{-\frac{iH_0 t'}{\hbar}} | \vec{k} \rangle \right|^2$$

mas $H_0|\vec{k}''\rangle = \frac{\hbar^2 k''^2}{2m}|\vec{k}''\rangle = E'|\vec{k}''\rangle$

$$H_0|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}|\vec{k}\rangle = E|\vec{k}\rangle$$

assim $\left|\langle \vec{k}'| U_I^{(1)}(t,-\infty)|\vec{k}\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle \int_{-\infty}^{t} e^{i\frac{E'-E}{\hbar}t'} e^{\eta t'}\right|^2$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle\right|^2 \left| \frac{e^{i\frac{(E'-E-i\eta\hbar)}{\hbar}t'}}{E'-E-i\eta\hbar} \right|_{-\infty}^{t}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle\right|^2 \left| \frac{e^{i\frac{(E'-E)}{\hbar}t}}{\frac{E'-E-i\eta\hbar}{\hbar}}\cdot e^{\eta t}\right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle\right|^2 \frac{e^{2\eta t}}{\left(\frac{E'-E}{\hbar}\right)^2+\eta^2}$$

assim $\frac{d}{dt}\left|\langle\vec{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\vec{k}\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle\right|^2 \lim_{\eta\to 0} e^{2\eta t}\frac{2\eta}{\left(\frac{E'-E}{\hbar}\right)^2+\eta^2}$

mas $\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{\eta^2+\omega_{ni}^2} = \pi\,\delta(\omega_{ni}) = \pi\hbar\,\delta(E_n-E_i)$

$\therefore\ \frac{d}{dt}\left|\langle\vec{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\vec{k}\rangle\right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle\right|^2\delta(E'-E)$

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle\right|^2 \delta(E'-E)$$

$$\downarrow$$

$$\int g(E')\, dE'\, \delta(E'-E)$$

Queremos

$$\swarrow$$

$w\, k'^2 dk' d\Omega \rightarrow$ # partículas com energia E, que saem pelo ângulo sólido $d\Omega$ por unidade de tempo.

mas $\therefore E' = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$ $\quad dE' = \frac{\hbar^2 k' dk'}{m}$

$$k'^2 dk' d\Omega = k' k' dk' d\Omega = \underbrace{\frac{k' m}{\hbar^2}}_{g(E)} dE' d\Omega$$

taxa de transição p/ um grupo de estados ao redor de $\vec{k}'$ (ângulo sólido $d\Omega$)

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle\right|^2_{k'=k} \frac{k m}{\hbar^2}\, d\Omega$$

$$= \Phi_{\text{incidente}}\, d\Omega\, \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

$$\therefore \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle\right|^2 \frac{km}{\hbar^2} \div \frac{\hbar k}{m(2\pi)^3}$$

$$= (2\pi)^4 \frac{m^2}{\hbar^4} \left|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle\right|^2 = \left|f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k})\right|^2$$