2ª aula

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

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

onde
$$\begin{cases} \Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)} \\ \phi_n \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}| \\ H \equiv H_0 + \lambda V \end{cases}$$

lembre ainda que $H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ e

que estamos tentando resolver

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

<u>Teoria</u> de <u>perturbação</u>

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

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

obtivemos diretamente de $\Delta_n = \lambda\langle n^{(0)}|V|n\rangle$

que
$$\Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

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

$$\vdots$$

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

Calculemos $|n^{(1)}\rangle$, $|n^{(2)}\rangle$, etc

$$|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E-H_0}\left(\lambda V + \right.$$

$$\left. - \lambda\Delta_n^{(1)} - \lambda^2\Delta_n^{(2)}\dots\right)\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle\dots\right)$$

- em $\lambda^0 \rightarrow |n^{(0)}\rangle = |n^{(0)}\rangle$

- em $\lambda^1 \rightarrow |n^{(1)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0} V|n^{(0)}\rangle + \underbrace{\frac{\phi_n}{E-H_0}\Delta_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle}_{=\,0 \text{ pois } \phi_n|n^{(0)}\rangle=0}$

$\therefore$ em $\lambda^1 \rightarrow \boxed{|n^{(1)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0} V|n^{(0)}\rangle}$

A partir de $|n^{(1)}\rangle$ podemos calcular $\Delta_n^{(2)}$, pois

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

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

- em λ^2 $\quad |n^{(2)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}(V-\Delta_n^{(1)})|n^{(1)}\rangle - \underbrace{\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}\Delta_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle}_{=\,0 \text{ pois } \phi_n|n^{(0)}\rangle=0}$

$$|n^{(2)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0} V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0} V|n^{(0)}\rangle$$

$$- \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}\underbrace{\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}_{\Delta_n^{(1)}}\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0} V|n^{(0)}\rangle$$

isto pode ser continuado para maiores problemas.

Na prática precisamos usar explicitamente ϕ_n

$$\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)} = \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \dots$$

$$= \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \langle n^{(0)} | V \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle$$

$$= \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots$$

$$= \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

note que p/ o caso de 2 estados tínhamos obtido

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

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | V | n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$+ \lambda^2 \left(\sum_{\substack{k \neq n \\ l \neq n}} \frac{|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} V \frac{|l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} V |n^{(0)}\rangle \right.$$

lembre $\phi_n^2 = \phi_n$

$$\left. - \left(\frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \right)^2 V_{nn} V |n^{(0)}\rangle \right) =$$

$$|n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle + \lambda^2 \left(\sum_{\substack{k \neq n \\ l \neq n}} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kl} V_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \right.$$

$$\left. - \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right) + \dots$$

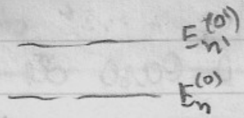
Observações

- O ket $|n\rangle$ não é mais $|n^{(0)}\rangle$, o potencial V mistura ele c/ os outros $|k^{(0)}\rangle$

- teoria de perturbação de 1ª ordem em energia é apenas o valor médio de V, i.e.

$$\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$$

- Suponha que quiséssemos olhar o efeito do termo de 2ª ordem sobre dois estados vizinhos



note que, se só os dois importam,

$$\Delta_n^{(2)} = -\Delta_{n'}^{(2)}$$

pois $\Delta_n = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$ repelidos

- O deslocamento na energia para o estado fundamental é sempre negativo se considerarmos apenas o termo de 2ª ordem.

• Renormalização da função de onda

lembre que tomamos $\langle n^{(0)}|n\rangle = 1$

agora queremos $|n\rangle_N$, tal que

$$|n\rangle_N \propto |n\rangle \quad \text{e} \quad {}_N\langle n|n\rangle_N = 1$$

p/ tanto defina Z_n tal que

$$|n\rangle_N = Z_n^{1/2}|n\rangle \quad \text{e seja} \quad {}_N\langle n|n\rangle_N = 1$$

note que
como $\langle n^{(0)}|n\rangle = 1 \rightarrow \boxed{Z_n^{1/2} = \langle n^{(0)}|n\rangle_N}$

Se $|n\rangle_N$ estiver normalizado, qual é significado físico de Z_n? Que tal: a probabilidade do estado perturbado ser encontrado no autoestado de energia não perturbado correspondente.

Calculemos Z_n

$${}_N\langle n|n\rangle_N = Z_n\langle n|n\rangle = 1$$

$$\therefore \quad Z^{-1} = \langle n|n\rangle = \left(\langle n^{(0)}| + \lambda\langle n^{(1)}| + \lambda^2\langle n^{(2)}|\right)$$

$$\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle\right)$$

$$= \langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \lambda^2\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$|n^{(1)}\rangle = \frac{\phi_n}{E-H_0}V|n^{(0)}\rangle$ $\quad n^{(2)} = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V\frac{\phi_n}{E_n-H_0}V|n^{(0)}\rangle$

onde usamos $\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle = 0$

$$\therefore \quad Z_n^{-1} = 1 + \lambda^2\langle n^{(0)}|V\frac{\phi_n^2}{(E-H_0)^2}V|n^{(0)}\rangle$$

$$= 1 + \lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

se $\frac{1}{1+x} \sim 1 - x$

$$Z_n = 1 - \lambda^2 \underbrace{\sum_{k\neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}}$$

probabilidade de haver vazamento do estado $|n^{(0)}\rangle$ p/ $\forall$ outro

note tb que

$$E_n - E_n^{(0)} = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

e que

$$\frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}} = 1 - \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} = Z_n$$

Exemplos elementares

(1) Oscilador Harmônico Simples

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$V = \frac{1}{2} \varepsilon m \omega^2 x^2$$

ε ↓ adimensional e $\ll 1$

H tem solução exata. Basta redefinir

$$\omega'^2 = \omega^2 (1+\varepsilon) \therefore \omega' = \omega\sqrt{1+\varepsilon}$$

assim o exemplo é legal pois permite comparar solução exata com solução aproximada. Vamos obter o novo estado fundamental $|0\rangle$ e o deslocamento de energia Δ_0

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq 0} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots$$

$$\Delta_0 = V_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Os termos relevantes são

$$V_{00} = \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} \langle 0^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle$$

$$V_{20} = \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} \langle 2^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle$$

lembre que $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a + a^{+})$

$$\text{e} \therefore \; x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\,(a^2 + a^{+2} + a^{+}a + aa^{+})$$

isto justifica porque $V_{k,0} = 0$ p/ $k \neq 0$ e 2

se precisar $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$
$a^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

não é difícil obter $V_{00} = \frac{\varepsilon \hbar\omega}{4}$ $\quad V_{20} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}}$

notando que $E_n^{(0)} = (n+1/2)\hbar\omega$

$$\therefore \; E_2^{(0)} = (2+1/2)\hbar\omega \quad e$$

$$\therefore \; E_0^{(0)} - E_2^{(0)} = -2\hbar\omega$$

obtemos:

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + |2^{(0)}\rangle \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{-2\hbar\omega}$$

$$= |0^{(0)}\rangle + \frac{-\varepsilon}{4\sqrt{2}} |2^{(0)}\rangle + O(\varepsilon^2)$$

e

$$\Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} + \left(\frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}}\right)^2 \cdot \frac{1}{-2\hbar\omega}$$

$$= \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} - \frac{\varepsilon^2}{16}\hbar\omega$$

$$= \hbar\omega\left(\frac{\varepsilon}{4} - \frac{\varepsilon^2}{16} + O(\varepsilon^3)\right)$$

por que a ausência de $|1^{(0)}\rangle$ no novo $|0\rangle$?

$|1^{(0)}\rangle$ é ímpar na representação das coordenadas e $|0\rangle$ é par.

Comparando com a solução exata

$$\frac{\hbar\omega}{2} \to \frac{\hbar\omega}{2}\sqrt{1+\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(1+\frac{\varepsilon}{2}-\frac{\varepsilon^2}{8}+\ldots\right)$$

$$\langle x|0^{(0)}\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}\, e^{-x^2/2x_0^2}$$

onde $x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$x_0 \to \frac{x_0}{(1+\varepsilon)^{1/4}}$ assim

$$\langle x|0^{(0)}\rangle \to \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}(1+\varepsilon)^{1/8}\exp\left[-\left(\frac{x^2}{2x_0^2}\right)(1+\varepsilon)^{1/2}\right]$$

$$\simeq \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}\exp\left(-\left(\frac{x^2}{2x_0^2}\right)\right) + \varepsilon\left\{\frac{1\times(1+\varepsilon)^{-7/8}}{8\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left[\left(\frac{-x^2}{2x_0^2}\right)(1+\varepsilon)^{1/2}\right]\right.$$

$$\left. + \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}(1+\varepsilon)^{1/2}\exp\left[\left(\frac{-x^2}{2x_0^2}\right)(1+\varepsilon)^{1/2}\right] \cdot -\left(\frac{x^2}{2x_0^2}\right)\frac{(1+\varepsilon)^{-1/2}}{2}\right\}\Bigg|_{\varepsilon=0}$$

$$= \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) + \frac{\varepsilon}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left(\frac{-x^2}{2x_0^2}\right)\left[\frac{1}{8}-\frac{1}{4}\frac{x^2}{x_0^2}\right]$$

$$= \langle x|0^{(0)}\rangle - \frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}}\langle x|2^{(0)}\rangle$$