Teoria de Perturbação: o ket "perturbado"

A partir de $\boxed{|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle,}$ obteremos agora o ket "perturbado". Para isso insira:

$$\begin{cases} |n\rangle \equiv |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots \\ \\ \Delta_n \equiv \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \dots \end{cases}$$

e resultados da aula anterior:

$$\begin{cases} \mathcal{O}(\lambda^1) \Rightarrow \Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \\ \mathcal{O}(\lambda^2) \Rightarrow \Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle \\ \mathcal{O}(\lambda^3) \Rightarrow \Delta_n^{(3)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(2)}\rangle \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\ \mathcal{O}(\lambda^N) \Rightarrow \Delta_n^{(N)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(N-1)}\rangle \end{cases}$$

na equação do retângulo e iguale coeficientes de mesma ordem em λ. Isto é:

$$|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}(\lambda V - \lambda\Delta_n^{(1)} - \lambda^2\Delta_n^{(2)} +$$
$$- \dots)(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots)$$

Teoria de Perturbação: o ket "perturbado"

- Em $\mathcal{O}(\lambda^0) \Rightarrow |n^{(0)}\rangle = |n^{(0)}\rangle$
- Em $\mathcal{O}(\lambda^1) \Rightarrow |n^{(1)}\rangle = \dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V|n^{(0)}\rangle + \underbrace{\dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \Delta_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle}_{0,\ \text{pois}\ \phi_n|n^{(0)}\rangle = 0}$

$\therefore$ em $\lambda^1 \Rightarrow |n^{(1)}\rangle = \dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V|n^{(0)}\rangle$. Esse resultado pode ser usado para obter: $\Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle = \langle n^{(0)}|V \dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V|n^{(0)}\rangle$

- Em $\mathcal{O}(\lambda^2) \Rightarrow |n^{(2)}\rangle = \dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} (V - \Delta_n^{(1)})|n^{(1)}\rangle - \underbrace{\dfrac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \Delta_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle}_{0,\ \text{pois}\ \phi_n|n^{(0)}\rangle = 0}$

Assim, temos
$$|n^{(2)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V|n^{(0)}\rangle + \\ - \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \underbrace{\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}_{\Delta_n^{(1)}} \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V|n^{(0)}\rangle$$

Teoria de Perturbação: Caso não-Degenerado (resumindo)

Usando os resultados anteriores em
$$\begin{cases} \Delta_n = \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots \end{cases}$$

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

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

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

Note que para o sistema de dois níveis, obtivemos a expressão aproximada $E_1 = E_1^{(0)} + \lambda^2 \frac{|V_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$, em acordo com a expressão acima, obtida por teoria de perturbação. Não esqueça que para comparar com dados experimentais ou valores exatos é preciso fazer $\lambda = 1$.

Teoria de Perturbação: Caso não-Degenerado (resumindo)

O ket $|n\rangle$, autoket aproximado de $(H_0 + \lambda V)|n\rangle = E_n|n\rangle$, fica:

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

$$+ \lambda^2 \Big(\sum_{\substack{k\neq n \\ \ell\neq n}} \frac{|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} V \frac{|\ell^{(0)}\rangle\langle \ell^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}} V|n^{(0)}\rangle - \big(\frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}\big)^2 V_{nn} V|n^{(0)}\rangle \Big) =$$

e assim, temos, hierarquicamente em λ :

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

$$+ \lambda^2 \Big(\sum_{\substack{k\neq n \\ \ell\neq n}} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k\ell} V_{\ell n}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)})} - \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \Big) + \ldots$$

onde usamos que $\phi_n^2 = \phi_n$.

Note que a partir do termo de primeira ordem o ket $|n\rangle$ deixa de ser igual à $|n^{(0)}\rangle$ e passa a incluir uma combinação dos outros autokets $|k^{(0)}\rangle$de H_0, com $k \neq n$. O potencial V controla a mistura dos kets.

Teoria de Perturbação: Caso não-Degenerado (observações)

- A teoria de perturbação deve ser aplicada sobre um determinado autoestado $|n^{(0)}\rangle$ e correspondente autoenergia da Hamiltoniana não perturbada. Ou seja, a teoria permite estudar o efeito de V adicionado à H_0 sobre um autoestado (e autoenergia) de H_0.
- Para obter a mudança da energia em primeira ordem, é suficiente calcular o valor médio do potencial $\langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle$, com respeito ao ket não-perturbado, $|n^{(0)}\rangle$, autoket de H_0.
- O efeito de segunda ordem em energia sobre estados próximos é de repelí-los.

Isto porque $\Delta_{n_1}^{(2)} = -\Delta_{n_2},^{(2)}$ pois $\Delta_{n_1} = \lambda V_{n_1 n_1} + \lambda^2 \dfrac{|V_{n_1 n_2}|^2}{E_{n_1} - E_{n_2}}$ Para ver isso, suponha que só existam os dois - isso vale, pois se são próximos o denominador diminui, a fração aumenta e as outras contribuições ficam desprezíveis.

- O efeito de segunda ordem em energia sobre o estado fundamental é sempre de diminuir ainda mais a energia. Para ver isso, lembre que $E_n - E_k < 0,$ se $E_n < E_k, \ \forall k$ (esta é a definição de estado fundamental) e avalie seu efeito na contribuição de segunda ordem $\lambda^2 \dfrac{|V_{nk}|^2}{E_n - E_k}$.

Teoria de Perturbação: Renormalização dos kets

Lembre que tomamos $\langle n^{(0)}|n\rangle = 1$. Agora queremos $|n\rangle_N$, respeitando as condições $\begin{cases} |n\rangle_N \propto |n\rangle \\ \\ {}_N\langle n|n\rangle_N = 1 \end{cases}$ $\Rightarrow$ Para tanto, defina Z_n tal que $|n\rangle_N = Z_n^{1/2}|n\rangle$.

Exija que ${}_N\langle n|n\rangle_N = 1$. Considerando que $\langle n^{(0)}|n\rangle = 1$, obtemos que $Z_n^{1/2} = \langle n^{(0)}|n\rangle_N$. Se $|n\rangle_N$ está normalizado, qual o significado físico de Z_n? Que tal: a probabilidade do estado perturbado ser encontrado no autoestado de energia não-perturbado correspondente.

Cálculo de $\mathbf{Z_n}$

${}_N\langle n|n\rangle_N = Z_n\langle n|n\rangle = 1 \therefore Z_n^{-1} = \langle n|n\rangle$. Use que $|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle$ e obtenha $Z_n^{-1} = \left(\langle n^{(0)}| + \lambda\langle n^{(1)}| + \lambda^2\langle n^{(2)}|\right)\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle\right)$

Use que $\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle = 0$ (lembre que ϕ_n aparece em ambos os kets, $|n^{(1)}\rangle$ e $|n^{(2)}\rangle$), para obter

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

Teoria de Perturbação: Renormalização dos kets

Como $|n^{(1)}\rangle = \dfrac{\phi_n}{E_n - H_0} V|n^{(0)}\rangle$, temos até segunda ordem:

$$Z_n^{-1} = \underbrace{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{1} + \lambda^2 \underbrace{\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle}_{\langle n^{(0)}|V\frac{\phi_n^2}{(E_n-H_0)^2}V|n^{(0)}\rangle} + \mathcal{O}(\lambda^3) = 1 + \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

Se $\dfrac{1}{1+x} \approx 1 - x \Rightarrow$ podemos escrever $Z_n = 1 - \underbrace{\lambda^2 \sum_{k\neq n} \dfrac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}}_{\text{Probabilidade de haver vazamento do estado } |n^{(0)}\rangle \text{ para } \forall \text{ outro}}$

Note também que como

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

é possível escrever $\dfrac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}} = 1 - \lambda^2 \sum_{k\neq n} \dfrac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} = Z_n$

Este resultado também vale para ordens superiores de teoria de perturbação.

Teoria de Perturbação: Alguns exemplos

Oscilador harmônico Simples

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \text{ perturbado por } V = \epsilon\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$\epsilon << 1, \text{adimensional}$$

H tem solução exata. Basta redefinir ${\omega'}^2 = \omega^2(1+\epsilon) \Rightarrow \omega' = \omega\sqrt{1+\epsilon}$.

O exemplo é legal, pois permite comparar a solução exata com a solução aproximada. Um bom começo é obter o novo estado fundamental $|0\rangle$ e o deslocamento de energia Δ_0.

Por teoria de perturbação, temos:
$$\begin{cases} |0\rangle = |0^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq 0} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \ldots \\ \\ \Delta_0 = V_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \ldots \end{cases}$$

Os termos relevantes são
$$\begin{cases} V_{00} = \epsilon\frac{m\omega^2}{2}\langle 0^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle \\ \\ V_{20} = \epsilon\frac{m\omega^2}{2}\langle 2^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle \end{cases}$$

Lembre que
$$\begin{cases} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \\ x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + {a^\dagger}^2 + a^\dagger a + a a^\dagger) \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{cases}$$

Conclua que: $V_{00} = \epsilon\frac{\hbar\omega}{4}$; $V_{20} = \epsilon\frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}}$; *e que* $V_{k0} = 0$ p/ $k \neq 0$ e 2.

Teoria de Perturbação: Oscilador Harmônico Simples

Oscilador não-perturbado $\begin{cases} \bullet \text{ espectro: } E_n^{(0)} = (n+1/2)\hbar\omega \\ \therefore \;\; E_0^{(0)} = 1/2\hbar\omega \text{ e } E_2^{(0)} = (2+1/2)\hbar\omega \\ \bullet \text{ quantidade útil: } E_0^{(0)} - E_2^{(0)} = -2\hbar\omega \end{cases}$

Do slide anterior, obtemos:

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + |2^{(0)}\rangle \frac{\epsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}} . \frac{1}{-2\hbar\omega} + \mathcal{O}(\epsilon^2) = |0^{(0)}\rangle - \frac{\epsilon}{4\sqrt{2}}|2^{(0)}\rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

$$\text{e } \Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = \frac{\epsilon\hbar\omega}{4} + \left(\frac{\epsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}}\right)^2 . \frac{1}{-2\hbar\omega} = \frac{\epsilon\hbar\omega}{4} - \frac{\epsilon^2}{16}\hbar\omega$$

Ou seja $\boxed{\Delta_0 = \hbar\omega\left(\frac{\epsilon}{4} - \frac{\epsilon^2}{16} + \mathcal{O}(\epsilon^3)\right).}$ Compare com a solução exata no limite de $\epsilon << 1$, isto é $\frac{\hbar\omega}{2}\sqrt{1+\epsilon} \approx \frac{\hbar\omega}{2}\left(1 + \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon^2}{8} + \ldots\right)$.

Observe a ausência de $|1^0\rangle$ no novo $|0\rangle$. Porque? A nova Hamiltoniana comuta com o operador paridade e exige soluções com paridade bem definida. Na representação das coordenadas $\langle x|1^0\rangle$ é ímpar, e $\langle x|0\rangle$ é par.

Teoria de Perturbação: Oscilador Harmônico Simples

As funções de onda do Oscilador não-perturbado que compõe $\langle x|0\rangle$ são

dadas por $\begin{cases} \langle x|0^{(0)}\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2} \\ \\ \langle x|2^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}[-2+4\left(\frac{x}{x_0}\right)^2] \end{cases}$ onde, $\boxed{x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$

Para obter a solução exata do estado fundamental da Hamiltoniana pertubada,

basta trocar x_0 por $\dfrac{x_0}{(1+\epsilon)^{1/4}}$ em $\langle x|0^{(0)}\rangle$, $\langle x|0\rangle = \dfrac{1}{\pi^{1/4}}\dfrac{(1+\epsilon)^{1/8}}{\sqrt{x_0}}e^{[-\frac{x^2}{2x_0^2}(1+\epsilon)^{1/2}]}$

Para obter o resultado da teoria de Perturbação para $\langle x|0\rangle$ basta expandir a fórmula acima na série de Taylor, isto é: $f(\epsilon) = f(0) + f'(0)\epsilon$. Ou seja:

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2} + \epsilon\{\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{8}\frac{(1+\epsilon)^{-7/8}}{\sqrt{x_0}}e^{[-\frac{x^2}{2x_0^2}(1+\epsilon)^{1/2}]} + \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{(1+\epsilon)^{1/8}}{\sqrt{x_0}}\times$$

$$\times\, e^{[-\frac{x^2}{2x_0^2}(1+\epsilon)^{1/2}]}.-\frac{x^2}{2x_0^2}\frac{(1+\epsilon)^{-1/2}}{2}\}|_{\epsilon=0} \underset{\underbrace{\qquad\qquad}_{\text{detalhes para casa}}}{=} \langle x|0^{0)}\rangle - \frac{\epsilon}{4\sqrt{2}}\langle x|2^{(0)}\rangle$$

Teoria de Perturbação: Alguns exemplos

Efeito Stark Quadrático

Átomo de hidrogênio sujeito à campo elétrico uniforme na direção $\mathbf{z}$,

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \text{ perturbado por } V = -e|\mathbf{E}|z \begin{cases} \mathbf{E} = |\mathbf{E}|\hat{\mathbf{z}} \\ \mathbf{F} = e\mathbf{E} \\ \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V \end{cases}$$

Conhecemos a solução de $H_0|n,\ell,m\rangle = E_n|n,\ell,m\rangle \begin{cases} E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \\ 0 \le \ell \le n-1 \\ -\ell \le m \le \ell \end{cases}$

Spin é irrelevante neste problema: ignore-o, pois assim alguns estados ficam não-degenerados (até agora desenvolvemos a teoria de perturbação apenas para estados não-degenerados), ex.: $\begin{cases} n = 1 \rightarrow 1s \text{ não-degenerado} \\ n = 2 \rightarrow 2s \text{ e } 2p \text{ degenerado (+tarde)} \\ \text{etc.} \end{cases}$

Consideraremos $n = 1$ para calcular o deslocamento de energia em 2a. ordem

Para isso suponha $\begin{cases} k = (n=1, \ell=0, m=0) \\ \text{e} \\ j = (n, \ell, m) \end{cases} \Rightarrow \Delta_k = V_{kk} + \sum_{j\neq k} \frac{|V_{jk}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}}$

Teoria de Perturbação: Efeito Stark Quadrático

Δ_k pode ser re-escrito por: $\Delta_k = -e|\mathbf{E}|Z_{kk} + e^2|\mathbf{E}|^2 \sum_{j\neq k} \frac{|Z_{jk}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}}$ onde

$Z_{jk} = \langle n, \ell, m|z|1,0,0\rangle$. Releia o capítulo 4 (sobre simetrias) para melhor compreender as seguintes propriedades de Z_{jk}. Lembre que z é um tensor esférico $T^{(1)}_{q=0}$. Aplique o teorema de Wigner-Eckart e considerações de paridade para obter

voluntário?

Ver aula 25 de FI001

$$\begin{cases} Z_{kk} = \langle 1s|z|1s\rangle = \langle 1,0,0|z|1,0,0\rangle = 0 \\ \langle n', \ell' m'|z|n, \ell m\rangle = 0 \text{ a menos que } \begin{cases} \ell' = \ell + 1 \\ m' = m \end{cases} \end{cases}$$

Uma outra maneira de entender a propriedade $m' = m$ é perceber que $[V, L_z] = 0$ (simetria cilíndrica). Ou seja, a adição de V em H_0 quebra a simetria esférica original, mas mantém a cilíndrica. Com isso, autoket de H precisa ser autoket de L_z. Z_{kk} igual à zero sai direto por considerações de paridade (integrando ímpar). Assim, o primeiro termo a contribuir é o de segunda ordem (daí o termo quadrático do efeito Stark) e como k tem $m = 0$, só $j's$ com $m = 0$ contribuem na soma acima.

Podemos agora estimar a polarizabilidade, α, de um átomo: $\Delta = -\frac{1}{2}\alpha|\mathbf{E}|^2$

Teoria de Perturbação: Polarizabilidade do Hidrogênio

Assim, do slide anterior, temos $\alpha = -2e^2 \sum_{j \neq k} \frac{|Z_{jk}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}}$, onde j deve ser somado sobre o espectro discreto e contínuo do átomo de Hidrogênio e $Z_{jk} = \langle j^{(0)}|z|\underbrace{1,0,0}_{k}\rangle$ e $E_k^{(0)}$ é a energia do estado fundamental $1s$. Como realizar a soma? Podemos estimá-la. Suponha $\frac{1}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} = constante \; \forall j$

Se fizermos a $constante = \frac{1}{E_k^{(0)} - E_{j_0}^{(0)}} \Rightarrow \alpha = -2e^2 \frac{1}{E_k^{(0)} - E_{j_0}^{(0)}} \sum_{j \neq k} |Z_{jk}|^2 =$

Assim $\alpha = -2e^2 \frac{1}{E_k^{(0)} - E_{j_0}^{(0)}} \sum_{j \neq k} |\langle j^{(0)}|z|1,0,0\rangle|^2$ que pode ser reescrito por

$\alpha = -2e^2 \frac{1}{E_k^{(0)} - E_{j_0}^{(0)}} \sum_{j \neq k} \langle 1,0,0|z|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|z|1,0,0\rangle \Rightarrow$ use $Z_{kk} = 0$ e

complete a soma em j para obter $\alpha = -2e^2 \frac{1}{E_k^{(0)} - E_{j_0}^{(0)}} \langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle$

Teoria de Perturbação: Efeito Stark Quadrático

A expressão de α pode ser re-escrita da seguinte forma:

$$\alpha = 2e^2 \frac{1}{E_{j_0}^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle \text{ onde } E_{j_0}^{(0)} - E_k^{(0)} > 0 \text{ (energia de excitação)}$$

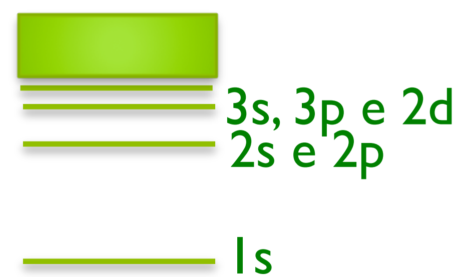
Como exercício, mostre que

mesmo voluntário

$$\langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle = \langle 1,0,0|x^2|1,0,0\rangle = \langle 1,0,0|y^2|1,0,0\rangle = \frac{1}{3}\langle 1,0,0|r^2|1,0,0\rangle = a_0^2$$

Assim, se fizermos $k=1$ para o estado fundamental $1s(n=1)$, e $j_0 = 2$ um dos primeiros estados excitados $2s$ ou $2p_0$(degenerados com $n=2$), temos que, para

$$\forall j \equiv (n \neq 1, \ell, m=0) \begin{cases} E_2^{(0)} - E_1^{(0)} \leq E_j^{(0)} - E_1^{(0)} \\ \\ \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \geq \frac{1}{E_j^{(0)} - E_1^{(0)}} \end{cases}$$



Isso permite estimar um limite superior para α,

$$\alpha = -2e^2 \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} a_0^2 = -2e^2 \frac{1}{-\frac{e^2}{2a_0}(1-1/4)} a_0^2 = \frac{16}{3}\ a_0^3 \approx 5.3\ a_0^3 \text{ que pode ser}$$

comparado com o valor exato, somando em j corretamente, $\alpha = 4.5\ a_0^3$.

Instituto de Física Gleb Wataghin

MAPLima