Teoria de perturbações dependentes do tempo

Vamos considerar um sistema cuja evolução temporal é dada por

Nota: com $[\hat{H}_0, H_1(t)] \neq 0$, $\hat{H}_1(t)$ vai induzir transições entre auto-estados de $\hat{H}_0$, ←

$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)$, onde $\hat{H}_0$ é independente do tempo. Como sabemos se $|\psi_0\rangle$ é uma dada função de onda e $|\psi_t\rangle$ é uma solução da equação de Schrödinger dependente do tempo em que o Hamiltoniano é $\hat{H}_0$, i.e

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_t\rangle}{\partial t} = \hat{H}_0 |\psi_t\rangle$$

com $|\psi_{t=t_0}\rangle = |\psi_0\rangle$ então podemos escrever

$$|\psi_0\rangle = \sum_\ell a_\ell^0 |\ell\rangle$$ em que $|\ell\rangle$ são os auto-estados de $\hat{H}_0$, dado que $\{|\ell\rangle\}$ é uma base completa

Pela mesma razão, podemos escrever

$$|\psi_t\rangle = \sum_\ell a_\ell(t) |\ell\rangle$$ em que os $a_\ell(t)$ são agora funções do tempo

Como $|\psi_{t=t_0}\rangle = |\psi_0\rangle$, temos

$a_\ell(t_0) = a_\ell^0$. Substituindo agora esta rep. na eq. de Schrödinger, obtemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_\ell a_\ell(t)|\ell\rangle\right) = \sum_\ell a_\ell(t) \underbrace{\hat{H}_0 |\ell\rangle}_{= E_\ell|\ell\rangle}$$

$$\Leftrightarrow \sum_\ell \left(i\hbar \frac{da_\ell}{dt} - E_\ell a_\ell\right)|\ell\rangle = 0$$

Aplique-se $\langle j|$, obtemos $i\hbar \frac{da_j}{dt} = E_j a_j \Leftrightarrow$

$$a_j(t) = a_j(t_0)\, e^{-i/\hbar E_j(t-t_0)}$$
$$= a_j^0\, e^{-i/\hbar E_j(t-t_0)}$$

Ou seja, a expressão de $|\psi_t\rangle$ pode ser escrita como

$$|\psi_t\rangle = \sum_\ell a_\ell^0\, e^{-i/\hbar E_\ell(t-t_0)}|\ell\rangle$$

Vejamos agora como é que isto pode ser generalizado quando a perturbação está presente.

Escrevemos de novo

$$|\psi_t\rangle = \sum_{\ell} \gamma_\ell(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}|\ell\rangle$$

↳ Mudamos de notação para colocar $e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}$ exp. em evidência

mas em que $\gamma_j(t)$ é agora uma função do tempo, com

$$\gamma_\ell(t_0) = a_\ell^0.$$

Temos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_\ell \gamma_\ell(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}|\ell\rangle\right)$$

$$= \sum_\ell \gamma_\ell(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1(t))|\ell\rangle$$

$$\Leftrightarrow \sum_\ell \left(i\hbar\frac{d\gamma_\ell}{dt} + \cancel{E_\ell\gamma_\ell}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}|\ell\rangle$$

$$= \sum_\ell \gamma_\ell(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}(\cancel{E_\ell} + \lambda\hat{H}_1(t))|\ell\rangle$$

ou seja $\displaystyle\sum_\ell i\hbar\frac{d\gamma_\ell}{dt}e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}|\ell\rangle$

$$= \lambda\sum_\ell \gamma_\ell(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}\hat{H}_1(t)|\ell\rangle$$

Tome-se agora o produto escalar desta equação com $\langle j|$, como antes.

Obtemos

$$i\hbar \frac{d\gamma_j}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}E_j(t-t_0)} = \lambda \sum_{\ell} \langle j|\hat{H}_1(t)|\ell\rangle \gamma_\ell(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_\ell(t-t_0)}$$

ou

$$\frac{d\gamma_j}{dt} = -\frac{i\lambda}{\hbar} \sum_{\ell} \langle j|\hat{H}_1(t)|\ell\rangle \gamma_\ell(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_\ell - E_j)(t-t_0)}$$

Até aqui, esta equação é exata. A sol. em teoria de perturbações escreve-se

$$\gamma_j(t) = \gamma_{0j}(t) + \lambda \gamma_{1j}(t) + \lambda^2 \gamma_{2j}(t) \ldots$$

sendo que $\gamma_{0j}(t) = a_j^0$

Temos então (até a 1ª ordem em λ):

$$\frac{d\gamma_{0j}}{dt} = 0 \Rightarrow \gamma_{0j} = a_j^0$$

$$\frac{d\gamma_{1j}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\ell} \langle j|\hat{H}_1(t)|\ell\rangle \gamma_{0\ell}\, e^{-i\omega_{\ell j}(t-t_0)}$$

em que $\omega_{\ell j} = \frac{1}{\hbar}(E_\ell - E_j)$

(frequências de transição)

Com soluçã:

$$\gamma_{1j}(t) = \gamma_{1j}(0) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\ell}\int_{t_0}^{t} du \langle j|\hat{H}_1(u)|\ell\rangle e^{-i\omega_{\ell j}(u-t)} \cdot a_\ell^0$$

Suponhamos agora que apenas um estado $\ell = i$ está ocupado a $t=0$, ou seja $a_\ell^0 = \delta_{\ell,i}$. Assim:

$$\gamma_{1j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du \langle j|\hat{H}_1(u)|i\rangle e^{-i\omega_{\ell j}(u-t_0)}$$

Donde temos (até ordem λ):

$$\gamma_i(t) = 1 - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t du \langle i|\hat{H}_1(u)|i\rangle$$

$$\gamma_j(t) = -\frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t du \langle j|\hat{H}_1(u)|i\rangle e^{-i\omega_{ij}(u-t_0)} \quad (j \neq i)$$

A probabilidade de transição é dada por:

$$P_{i\to f}(t) = |\gamma_{1f}(t)|^2$$

$$= \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t} du \langle f|\hat{H}_1(u)|i\rangle e^{-i\omega_{if}(u-t_0)}\right|^2$$

Note que

$$\sum_{l} |\gamma_l(t)|^2 = 1$$ em ordem λ, dado que:

$$|\gamma_i(t)|^2 \simeq 1 - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du \langle i|\hat{H}_1(u)|i\rangle + \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du\, \underbrace{\overline{\langle i|\hat{H}_1(u)|i\rangle}}_{=\langle i|\hat{H}_1(u)|i\rangle} + O(\lambda^2)$$

$$= 1$$

e $|\gamma_j(t)|^2 \simeq 0$ para $j \neq i$ em ordem λ.

Suponhamos agora que a perturbação é independente do tempo $\hat{H}_1(u) = \hat{H}_1$ no intervalo $[t_0, t]$ (é 'ligada' a t_0).
Nesse caso, o integral torna-se

$$\int_{t_0}^{t} du\, e^{-i\omega_{if}u}$$

$$= \frac{1}{-i\omega_{if}}\left(e^{-i\omega_{if}\overbrace{(t-t_0)}^{T}} - 1\right)$$

$$= \frac{2\sin(\omega_{if}T/2)}{\omega_{if}} e^{-\frac{i\omega_{if}T}{2}}$$

e a probabilidade de transição torna-se

$$P_{i\to f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|\hat{H}_1|i\rangle|^2 \quad \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{if}T}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{if}T}{2}\right)^2} \cdot T^2$$

↳ integramos o λ em $\hat{H}_1$...

quando $T \to \infty$, a probabilidade de transição por unidade de tempo

$$\Gamma_{i\to f} = \lim_{T\to\infty} \frac{P_{i\to f}(t)}{T}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|\hat{H}_1|i\rangle|^2 \cdot \lim_{T\to\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{if}T}{2}\right)^2}{\left(\frac{\omega_{if}T}{2}\right)^2} \cdot T$$

A função $y(\omega, T) = \dfrac{\sin^2\left(\frac{\omega T}{2}\right)}{\left(\frac{\omega T}{2}\right)^2} \cdot T$

se for integrada em ω, dá

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \frac{\sin^2\left(\frac{\omega T}{2}\right)}{\left(\frac{\omega T}{2}\right)^2} T$$

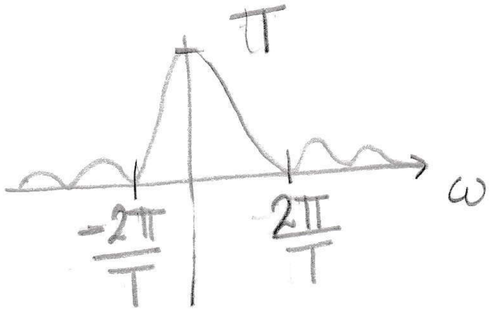
$$= 2\int_{-\infty}^{+\infty} du \, \frac{\sin^2(u)}{u^2}$$

$$= 4\int_0^{\infty} du \, \underbrace{\frac{\sin^2(u)}{u^2}}_{=\frac{\pi}{2}}$$

$\frac{\pi}{2}$, ver à frente

$$= 2\pi$$

e torna-se muito picada para $T \to \infty$



logo $\lim_{T\to\infty} y(\omega, T) = 2\pi\,\delta(\omega)$,

assim:

$$\Gamma_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,|\langle f|\hat{H}_1|i\rangle|^2\,\delta(\omega_{if})$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle f|\hat{H}_1|i\rangle|^2\,\delta(E_i - E_f)$$

↓

Regra de ouro de Fermi.

Somando sobre os estados finais temos

$$\sum_f \Gamma_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\underbrace{|\langle f|\hat{H}_1|i\rangle|^2}_{\text{assumindo que ñ varia para os estados finais com } E_f = E_i}\,\underbrace{\sum_f \delta(E_i - E_f)}_{= \rho(E = E_i)}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle f|\hat{H}_1|i\rangle|^2\,\underbrace{\rho(E = E_i)}_{\text{densidade de estados à energia } E_f = E_i}$$

para uma energia $E = E_i$.

Caixa:

$$\int_0^\infty du \frac{\sin^2 u}{u^2} = \int_0^\infty du \sin^2 u \int_0^\infty dy\, y\, e^{-yu}$$

$$= \int_0^\infty dy\, y \int_0^\infty du \sin^2 u\, e^{-yu}$$

$$\sin^2 u = \frac{1}{2}\Big[1 - \frac{1}{2}\underbrace{(e^{2iu} + e^{-2iu})}_{= \cos(2u)}\Big],$$

logo:

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y \int_0^\infty du \left(1 - \frac{1}{2}(e^{2iu} + e^{-2iu})\right) e^{-yu}$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y \int_0^\infty du \left(e^{-yu} - \frac{1}{2}\left(e^{-u(y-2i)} + e^{-u(y+2i)}\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y \left(\frac{1}{y} - \frac{1}{2}\underbrace{\left(\frac{1}{y-2i} + \frac{1}{y+2i}\right)}_{= \frac{y}{y^2+4}}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy \left(1 - \frac{y^2}{y^2+4}\right)$$

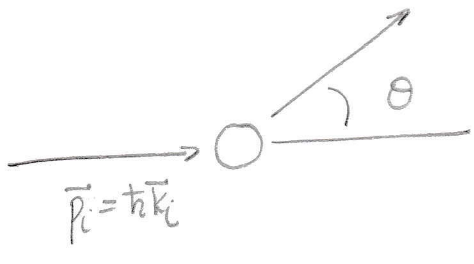
$$= 2\int_0^\infty dy\, \frac{1}{y^2+4} = \int_0^\infty \frac{dy}{y^2+1}$$

Fazendo agora a substituição de variável $y = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)$

$$dy = \frac{d\theta}{2\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\pi \frac{d\theta}{\cos^2(\theta/2)} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \pi/2$$

Apl: Espalhamento de partículas



Neste caso ñ há qualquer dependência temporal, pois o potencial é apenas uma função da distância à partícula. No entanto podemos admitir que o potencial é ligado de forma lenta

$$\hat{H}_1(t) = e^{-\eta|t|}\, V(\hat{\vec{r}})$$

em que $\eta = 1/T \to 0 \quad (T \to \infty)$