Trabalho IV

Questão 01: Desenvolva a teoria de perturbação dependente do tempo para resolver a equação de Schrödinger $i\hbar\partial_t |\psi_t\rangle = H_t |\psi_t\rangle$ com $H_t = H_0 + H_1$ para espectros degenerados, i.e., para $H_0 |\psi_{n,k}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{n,k}^{(0)}\rangle$ com $k = 1, 2, \cdots, d_n$.

Questão 02: Considere o OHQ bidimensional (OHQ2D) preparado inicialmente no estado fundamental $|00\rangle$ e sujeito a uma força constante $\vec{F} = -g(\hat{i} + \hat{j})$. Obtenha o hamiltoniano de perturbação (energia potencial) correspondente a esta força. Use teoria de perturbação dependente do tempo degenerada para calcular a probabilidade do OHQ2D transitar para o estado $|01\rangle$ no instante de tempo t.

Questão 03: Prove o teorema adiabático considerando hamiltonianos com espectro discreto não generado e com $[H_t, H_{t'}] \neq 0$.

Dica: Use:

$$|\psi_t\rangle = \sum_m c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |E_m(t)\rangle$$

Solução: Vamos aplicar o estado fornecido na equação de Schrödinger:

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

Temos também a equação de autovalores e autovetores:

$$H(t) |E_m(t)\rangle = E_m(t) |E_m(t)\rangle$$

com $E_m \neq E_k$ para $m \neq k$ e $[H_t, H_{t'}] \neq 0$.

Derivando o estado fornecido:

$$\partial_t |\psi(t)\rangle = \sum_m \left[\frac{dc_m}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |E_m\rangle + c_m \left(-\frac{i}{\hbar} E_m \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |E_m\rangle + c_m e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} \frac{d}{dt} |E_m\rangle \right]$$

$$\Rightarrow i\hbar \sum_m \left[\frac{dc_m}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |E_m\rangle + c_m \left(-\frac{i}{\hbar} E_m \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |E_m\rangle + c_m e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} \frac{d}{dt} |E_m\rangle \right] = \sum_m c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} H(t) |E_m(t)\rangle = \sum_m$$

$$\Rightarrow i\hbar \sum_m \left[\dot{c}_m e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |E_m\rangle + c_m e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} |\dot{E}_m\rangle \right] = 0$$

$$\Rightarrow \sum_m \left[\dot{c}_m |E_m\rangle + c_m |\dot{E}_m\rangle \right] e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt'} = 0$$

Tomando o produto interno com $|E_m\rangle$, temos:

$$\dot{c}_n(t) = -\sum_m c_m(t) \langle E_n(t)|\dot{E}_m(t)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t (E_m(t') - E_n(t'))dt'}$$

Usando a expressão (das notas de aula):

$$\langle E_n(t)|\dot{E}_m(t)\rangle = \frac{\langle E_n(t)| \dot{H}_t |E_m(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)}, m \neq n$$

Temos:

$$\dot{c}_n(t) = -c_n(t) \langle E_n(t)|\dot{E}_n(t)\rangle - \sum_{m \neq n} c_m(t) \frac{\langle E_n(t)| \dot{H}_t |E_m(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}$$

Agora usamos a aproximação adiabática, de modo que

$$|\langle E_m(t)| \dot{H}_t |E_n(t)\rangle| \ll |E_n(t) - E_m(t)|$$

Assim:

$$\dot{c}_n(t) \approx -c_n(t) \langle E_n(t)|\dot{E}_n(t)\rangle$$

Podemos resolver essa equação, aplicando uma integração entre 0 a t:

$$\int_{c_n(0)}^{c_n(t)} \frac{dc_n}{c_n} = -\int_0^t \langle E_n(t')|\dot{E}_n(t')\rangle\, dt'$$
$$\ln\left(\frac{c_n(t)}{c_n(0)}\right) = -\int_0^t \langle E_n(t')|\dot{E}_n(t')\rangle\, dt'$$
$$\therefore \boxed{c_n(t) = c_n(0)\exp\left(-\int_0^t \langle E_n(t')|\dot{E}_n(t')\rangle\, dt'\right) = c_n(0)e^{i\gamma_n(t)}}$$

onde

$$\gamma_m(t) = i\int_0^t \langle E_m(t')|\dot{E}_m(t')\rangle dt'$$

é a fase geométrica.

Questão 4: Obtenha o potencial vetor magnético gerado por um solenóide de comprimento infinito e de raio a, com n voltas por unidade de comprimento, pelo qual passa uma corrente elétrica I. Use a condição de calibre $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$.

Solução: Sabemos que o campo magnético gerado por um solenoide infinitamente longo é dado por (aplicando a Lei de Ampère):

$$\begin{cases} \vec{B} = \mu_0 nI\hat{a}_z, & \rho < a \text{ (dentro do solenoide)} \\ \vec{B} = 0, & \rho > a \text{ (fora do solenoide)} \end{cases}$$

com ρ sendo a distância radial a partir do centro do solenoide (em coordenadas cilíndricas (ρ, ϕ, z)) e a é o raio do solenoide.

Da relação $\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$, e da relação do fluxo magnético, temos:

$$\Phi = \int_S \vec{B}\cdot d\vec{S} = \int_S (\vec{\nabla}\times\vec{A})\cdot d\vec{S}$$

Do Teorema de Stokes:

$$\oint_C \vec{A}\cdot d\vec{l} = \int_S (\vec{\nabla}\times\vec{A})\cdot d\vec{S}$$

Vamos tomar $\vec{A} = A_\phi(\rho)\hat{a}_\phi$, dado que a corrente flui na direção $\hat{a}_\phi$ e espera-se que depende da distância radial ρ. Para esse vetor potencial, temos o Calibre de Coulomb (em coordenadas cilíndricas):

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial A_\phi}{\partial\phi} = 0$$

dado que A_ϕ depende de ρ e $A_\rho = A_z = 0$.

Assim, calculando o potencial vetor dentro do solenoide $(\rho < a)$, com $\vec{A} = A_\phi\hat{a}_\phi$:

$$\oint_C \vec{A}\cdot d\vec{l} = \int_0^{2\pi} (A_\phi\hat{a}_\phi)\cdot\rho d\phi\hat{a}_\phi = A_\phi\cdot 2\pi\rho$$

$$\Phi = \int_S \vec{B}\cdot d\vec{S} = \mu_0 nI\cdot\pi\rho^2$$

Igualando:

$$A_\phi\cdot 2\pi\rho = \mu_0 nI\pi\rho^2 \Rightarrow A_\phi = \frac{\mu_0 nI\rho}{2}$$

$$\therefore \vec{A} = \frac{\mu_0 nI\rho}{2}\hat{a}_\phi, \qquad \rho < a$$

Para $\rho > a$, a integral de linha segue de maneira idêntica:

$$\oint_C \vec{A}\cdot d\vec{l} = A_\phi\cdot 2\pi\rho$$

Para o fluxo (o fluxo será constante para $\rho > a$):

$$\Phi = \mu_0 nI\cdot\pi a^2$$

Igualando os resultados:

$$A_\phi\cdot 2\pi\rho = \mu_0 nI\pi a^2 \Rightarrow A_\phi = \frac{\mu_0 nIa^2}{2\rho}$$

$$\therefore \vec{A} = \frac{\mu_0 nIa^2}{2\rho}\hat{a}_\phi, \qquad \rho > a$$

Questão 05: Resolva a equação de Klein-Gordon para o átomo de Hidrogênio,

$$\left(-\hbar^2c^2\nabla^2 + m_0^2c^4\right)\psi = \left(E + \frac{ke^2}{r}\right)^2\psi$$

para obter as auto-energias

$$E_{n,l} = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 + \dfrac{\alpha^2}{(n-(l+1/2)+\sqrt{(l+1/2)^2-\alpha^2})^2}}}$$

Solução: Para resolvermos a equação, vamos aplicar separação de variáveis, fazendo:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \Omega(r)\Upsilon_{l,m}(\theta,\phi)$$

Também, vamos usar o laplaciano em coordenadas esféricas sobre ψ já assumindo a separação de variáveis (segundo as notas de aula sobre o Átomo de Hidrogênio):

$$\nabla^2\psi(r,\theta,\phi) = \Upsilon(\theta,\phi)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Omega(r)}{\partial r}\right) + \frac{\Omega(r)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right) + \frac{\Omega(r)}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}$$

Substituindo na Eq.KG:

$$-\hbar^2c^2\left[\Upsilon\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right) + \frac{\Omega}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}\right) + \frac{\Omega}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2}\right] + m_0^2c^4\Omega\Upsilon = \left(E + \frac{ke^2}{r}\right)^2\Omega\Upsilon$$

Isolando os termos em r e em (θ,ϕ) e dividindo por $\Omega\Upsilon$:

$$-\hbar^2c^2\frac{1}{\Omega r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right) - \hbar^2c^2\frac{1}{\Upsilon r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2}\right] + m_0^2c^4 = \left(E + \frac{ke^2}{r}\right)^2$$

$$\Rightarrow -\hbar^2c^2\frac{1}{\Omega r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right) + m_0^2c^4 - \left(E + \frac{ke^2}{r}\right)^2 = \hbar^2c^2\frac{1}{\Upsilon r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2}\right]$$

$$\Rightarrow -\hbar^2c^2\frac{1}{\Omega}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right) + m_0^2c^4r^2 - r^2\left(E + \frac{ke^2}{r}\right)^2 = \hbar^2c^2\frac{1}{\Upsilon}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2}\right]$$

Aqui o lado esquerdo da equação depende apenas de r e o lado direito de (θ,ϕ). Usando a constante de separação $\hbar^2c^2l(l+1)$, temos as equações:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2} = l(l+1)\Upsilon$$

e

$$-\hbar^2c^2\frac{1}{\Omega}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Omega}{dr}\right) + m_0^2c^4r^2 - r^2\left(E + \frac{ke^2}{r}\right)^2 = \hbar^2c^2l(l+1)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Omega}{dr}\right) + \left[\frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2} + \frac{2Eke^2}{\hbar^2c^2r} - \frac{l(l+1)-(ke^2/\hbar c)^2}{r^2}\right]\Omega = 0$$

Usando a constante de estrutura fina $\alpha = ke^2/\hbar c$, temos:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Omega}{dr}\right) + \Omega\left[\frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2} + \frac{2E\alpha}{\hbar cr} - \frac{l(l+1)-\alpha^2}{r^2}\right] = 0$$

$$r^2\frac{d^2\Omega}{dr^2} + 2r\frac{d\Omega}{dr} + \Omega\left[\left(\frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2}\right)r^2 + \left(\frac{2E\alpha}{\hbar c}\right)r - (l(l+1)-\alpha^2)\right] = 0$$

Fazendo as mudanças de variáveis:

$$k^2 = \frac{m_0^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2}$$

$$\beta = \frac{2E\alpha}{\hbar cr}$$

$$\gamma = l(l+1) - \alpha^2$$

temos

$$\Rightarrow r^2\Omega'' + 2r\Omega' + (-k^2r^2 + \beta r - \gamma)\Omega = 0$$

Fazendo uma análise assintótica, temos, para $r \to \infty$, a equação se reduz a

$$\Omega'' - k^2\Omega = 0$$

com soluções $\Omega \sim e^{-kr}$, para uma solução bem comportada. Para $r \to 0$, a equação se reduz a

$$\Omega'' + 2\Omega/r - \gamma/r^2 = 0$$

com soluções $\Omega \sim r^s$, onde $s(s-1) + 2s - \gamma = 0$ é a equação indicial. A solução da equação indicial, substituindo γ, fica:

$$s^2 + s - \gamma = 0 \Rightarrow s = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4(l(l+1) - \alpha^2)}}{2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}$$

Nesse caso, tomamos uma solução na forma

$$\Omega(r) = r^s e^{-kr} F(r) = r^s e^{-kr} \sum_{j=0}^{\infty} c_j r^j$$

análogo ao que foi realizado na solução radial para o átomo de Hidrogênio.

Assim:

$$\Omega'(r) = (sr^{s-1}e^{-kr} - kr^s e^{-kr})F + r^s e^{-kr} F' = e^{-kr}[(sr^{s-1} - kr^s)F + r^s F']$$

$$\Omega''(r) = -ke^{-kr}\left[(sr^{s-1} - kr^s)F + r^s F'\right] + e^{-kr}\left[(s(s-1)r^{s-2} - ksr^{s-1})F + (sr^{s-1} - kr^s)F' + sr^{s-1}F' + r^s F''\right]$$
$$\Rightarrow \Omega''(r) = e^{-kr}\left[(s(s-1)r^{s-2} - 2ksr^{s-1} + k^2 r^s)F + (2sr^{s-1} - 2kr^s)F' + r^s F''\right]$$

Para o termo $r^2\Omega''$, temos:

$$r^2\Omega'' = (s(s-1)r^s - 2ksr^{s+1} + k^2 r^{s+2})F + (2sr^{s+1} - 2kr^{s+2})F' + r^{s+2}F''$$

Para o termo $2r\Omega'$:

$$2r\Omega' = (2sr^s - 2kr^{s+1})F + 2r^{s+1}F'$$

Para o último termo:

$$(-k^2 r^2 + \beta r - \gamma)\Omega = (-k^2 r^{s+2} + \beta r^{s+1} - \gamma r^s)F$$

Agrupando os coeficientes em comum, temos:

- F'':

$$r^{s+2}F''$$

- F':

$$(2sr^{s+1} - 2kr^{s+2})F' + (2r^{s+1})F' = (2s+2)r^{s+1}F' - 2kr^{s+2}F'$$

- F:

$$(s(s-1)r^s - 2ksr^{s+1} + k^2 r^{s+2})F + (2sr^s - 2kr^{s+1})F + (-k^2 r^{s+2} + \beta r^{s+1} - \gamma r^s)F = r^{s+1}(\beta - 2k(s+1))F$$

Nessa última expressão foi usado a equação indicial $s^2 + s - \gamma = 0$.

Assim, a equação final fica:

$$r^{s+2}F'' + [(2s+2)r^{s+1} - 2kr^{s+2}]F' + r^{s+1}(\beta - 2k(s+1))F = 0$$

$$\Rightarrow rF'' + [2(s+1) - 2kr]F' + [\beta - 2k(s+1)]F = 0$$

$$\Rightarrow r\sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)c_j r^{j-2} + 2(s+1)\sum_{j=1}^{\infty} jc_j r^{j-1} - 2k\sum_{j=1}^{\infty} jc_j r^j + [\beta - 2k(s+1)]\sum_{j=0}^{\infty} c_j r^j = 0$$

Ajustando os índices das potências de r:

$$\sum_{p=1}^{\infty}(p+1)pc_{p+1}r^p + \sum_{p=0}^{\infty} 2(s+1)(p+1)c_{p+1}r^p - \sum_{p=1}^{\infty} 2kpc_p r^p + \sum_{p=0}^{\infty}[\beta - 2k(s+1)]c_p r^p = 0$$

Disso, temos as equações:

$$2(s+1)c_1 + [\beta - 2k(s+1)]c_0 = 0 \qquad (\star)$$

$$(p+1)pc_{p+1} + 2(s+1)(p+1)c_{p+1} - 2kpc_p + [\beta - 2k(s+1)]c_p = 0 \qquad (\star\star)$$

A primeira equação fornece os coeficientes iniciais e a segunda a relação de recorrência:

$$c_{p+1}[(p+1)p + 2(s+1)(p+1)] = c_p[2kp - \beta + 2k(s+1)]$$

$$c_{p+1}[(p+1)(p+2s+2)] = c_p[2k(p+s+1) - \beta]$$

$$\Rightarrow c_{p+1} = \frac{2k(p+s+1) - \beta}{(p+1)(p+2s+2)}c_p$$

A partir dessa relação de recorrência, fazemos o truncamento da série, para um termo $p = n_0$, de modo que o coeficiente c_{n_0+1} seja nulo. Para a nulidade, temos assim:

$$2k(n_0 + s + 1) - \beta = 0$$

Substituindo as constantes:

$$\Rightarrow 2\frac{\sqrt{m_0^2c^4 - E^2}}{\hbar c}(n_0 + s + 1) = \frac{2E\alpha}{\hbar c}$$

Usando o valor de s (da equação indicial):

$$\sqrt{m_0^2c^4 - E^2}\left(n_0 + \left(-\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right) + 1\right) = E\alpha$$

Fazendo $n = n_0 + l + 1 \Rightarrow n_0 = n - l - 1$ (conforme realizado na solução do átomo de Hidrogênio para γ para solução radial), temos:

$$\sqrt{m_0^2c^4 - E^2}\left(n - \left(l + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right) = E\alpha$$

Para isolar a energia, seja

$$\eta = \left(n - \left(l + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)$$

Assim:

$$\begin{gathered}(m_0^2c^4 - E^2)\eta^2 = E^2\alpha^2 \\ m_0^2c^4\eta^2 = E^2(\alpha^2 + \eta^2) \\ \Rightarrow E^2 = \frac{m_0^2c^4}{\alpha^2 + \eta^2} = \frac{m_0^2c^4}{1 + \frac{\alpha^2}{\eta^2}}\end{gathered}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_{n,l} = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\eta^2}}}}$$

que é exatamente a expressão que desejavamos obter.