

# TEORIA DE PERTURBAÇÕES DEPENDENTE DO TEMPO

(1)

- MESMO TIPO DE FORMALISMO ~~FORMALISMO~~ QUE NO CASO DE UMA PERTURBAÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO

$$H = H(t) = H_0 + W(t)$$

ONDE  $H_0 |\phi_m\rangle = E_m^{(0)} |\phi_m\rangle$

- TIPO DE PERGUNTA QUE ESTAMOS INTERESSADOS

= DADO QUE, EM  $t_0$  O SISTEMA SE ENCONTRA EM  $|\phi_I\rangle$ , QUAL A PROB. DE ENCONTRÁ-LO EM  $|\phi_F\rangle$  NUM TEMPO POSTERIOR  $t$ ?

$$P(t) = \left| \langle \phi_F | \psi(t) \rangle \right|^2$$

COMO OBTER  $|\psi(t)\rangle$ ?  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (H_0 + W(t)) |\psi(t)\rangle$

USANDO A BASE CONHECIDA  $\{|\phi_m\rangle\}$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t) |\phi_m\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \sum_m \dot{c}_m |\phi_m\rangle = \sum_m c_m E_m |\phi_m\rangle + \sum_m c_m W |\phi_m\rangle$$

$$\langle \phi_m | \Rightarrow i\hbar \dot{c}_m = E_m c_m + \underbrace{\sum_n c_n \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}_{W_{mm}(t)}$$

ESTE É UM PROBLEMA DE AUTO-VALORES

NÃO-TRIVIAL (COMO É O PROBLEMA DE RESOLVER A EQ. DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE DO TEMPO)

A SOLUÇÃO PARA  $W=0$  É TRIVIAL

(2)

$$i\hbar \dot{C}_m = E_m C_m \Rightarrow \boxed{C_m = \text{const} \times e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}}$$

ONDE  $\text{const} = C_m(0)$

PARA O CASO GERAL, VAMOS REESCREVER OS COEFICIENTES  $C_m$  COMO  $C_m(t) = b_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$ .

DESSA MANEIRA, ESTAMOS "RETIRANDO" A FASE DINÂMICA  $e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$  DEVIDO A  $H_0$ .

$$\Rightarrow i\hbar \left( \dot{b}_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} - \frac{i E_m}{\hbar} b_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} \right) = \cancel{E_m b_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}} + \sum_n b_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} W_{mn}(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{\dot{b}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_n W_{mn}(t) e^{i W_{mn} t} b_n}$$

ONDE  $W_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$

A PARTIR DE AGORA, PRECISAMOS FAZER APROXIMAÇÕES.

COMO NO CASO DE TED. PERT. INDEPENDENTE DO TEMPO, VAMOS INTRODUIR UM PARÂMETRO QUE NOS PERMITIRÁ ESCREVER UMA SÉRIE PERTURBATIVA.

$$H = H_0 + W(t) \longleftrightarrow H_0 + \lambda W(t) \quad \text{COM } \lambda \ll 1$$

$$\Rightarrow \dot{b}_m = -\frac{i}{\hbar} \lambda \sum_n W_{mn}(t) e^{i W_{mn} t} b_n$$

$$\text{E } b_m(t) = b_m^{(0)}(t) + \lambda b_m^{(1)}(t) + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k b_m^{(k)}(t)$$

Logo,

$$\left( \begin{matrix} b_m^{(0)} + \lambda b_m^{(1)} + \dots \end{matrix} \right) = \frac{-i}{\hbar} \lambda \sum_n W_{mn} e^{i W_{mn} t} \left( b_m^{(0)} + \lambda b_m^{(1)} + \dots \right) \quad (3)$$

ESTA EQUAÇÃO É UM POLINÔMIO EM  $\lambda$ .

BASTA COMPARAR OS TERMOS PARA CADA POTÊNCIA EM  $\lambda$

ORDEN 0:  $b_m^{(0)} = 0 \Rightarrow b_m^{(0)} = \text{CONST} = C_m^{(0)}$

PARA O CASO EM QUE  $|\psi^{(0)}\rangle = |\phi_I\rangle$

$$\Rightarrow |\psi^{(0)}\rangle = \sum_n \left( b_m^{(0)} + \lambda b_m^{(1)} + \dots \right) |\phi_n\rangle = |\phi_I\rangle$$

$$\Rightarrow b_m^{(0)} = \delta_{m,I} \quad \text{e} \quad b_m^{(K)} = 0, \quad \forall K \neq 0$$

ORDEN 1:  $\lambda b_m^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \sum_n W_{mn} e^{i W_{mn} t} b_m^{(0)}$

USANDO QUE  $b_m^{(0)} = \delta_{m,I} \Rightarrow b_m^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} W_{mI} e^{i W_{mI} t}$

OU SEJA

$$b_m^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t W_{mI}(t') e^{i W_{mI} t'} dt'$$

THE FOURIER TRANSFORM (BUT IN FINITE TIME INTERVAL) OF THE PERTURBATION

Como fica  $P_{I \rightarrow F}(t) = |\langle \phi_F | \psi(t) \rangle|^2$ ? (4)

Até 1ª ordem em  $\lambda$ , temos que

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \left( \delta_{n,I} + \lambda b_n^{(1)}(t) + \dots \right) |\phi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \phi_F | \psi(t) \rangle = e^{\frac{-iE_F t}{\hbar}} \underbrace{\langle \phi_F | \phi_I \rangle}_0 + \lambda \sum_n b_n^{(1)} e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \underbrace{\langle \phi_F | \phi_n \rangle}_{\delta_{n,F}} + O(\lambda^2)$$

(Assumindo  $F \neq I$ )

$$= \lambda e^{\frac{-iE_F t}{\hbar}} b_F^{(1)}(t) + O(\lambda^2)$$

$$\Rightarrow P_{I \rightarrow F}(t) = \lambda^2 |b_F^{(1)}(t)|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \lambda W_{FI}(t') e^{i\omega_{FI} t'} dt' \right|^2$$



É INTERESSANTE REESCREVER MOSSOS  
RESULTADOS ATÉ AGORA NA SEGUINTE  
MANEIRA

4a

$$C_F^{(0)}(t) = b_F^{(0)}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_F t} = S_{FI} e^{-\frac{i E_F t}{\hbar}} = \langle \phi_F | U_0(t, 0) | \phi_I \rangle$$

ONDE  $U_0(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$  É O OPERADOR EVOLUÇÃO  
TEMPORAL COM RESPECTO AO  
SISTEMA NÃO PERTURBADO  $H_0$

$$\begin{aligned} C_F^{(1)}(t) &= b_F^{(1)}(t) e^{-\frac{i E_F t}{\hbar}} \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i E_F t}{\hbar}} \int_0^t dt' W_{FI}(t') e^{i W_{FI} t'} dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i E_F t}{\hbar}} \int_0^t dt' \langle \phi_F | e^{\frac{i E_F t'}{\hbar}} W(t') e^{-\frac{i E_F t'}{\hbar}} | \phi_I \rangle \end{aligned}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle \phi_F | e^{\frac{i E_F}{\hbar} (t-t')} W(t') U_0(t', 0) | \phi_I \rangle$$

$$C_F^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle \phi_F | U_0(t, t') W(t') U_0(t', 0) | \phi_I \rangle$$

~~PARA ORDENS SUPERIORES EM TEO. PERTURBADA,~~

EM 2ª ORDEM DE TEO. PERTURBAÇÃO (NÃO FAZEMOS AQUI  
ESSA DEDUÇÃO), ENCONTRA-SE QUE

$$C_F^{(2)}(t) = \left( \frac{1}{2\hbar} \right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle \phi_F | U_0(t, t_1) W(t_1) U_0(t_1, t_2) W(t_2) U_0(t_2, 0) | \phi_I \rangle$$

NA VERDADE, P/ A n-ÉSIMA ORDEM EM TEO. PERTURBAÇÃO,

$$C_F^{(n)}(t) = \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \langle \phi_F | U_0(t, t_1) W(t_1) U_0(t_1, t_2) W(t_2) \dots$$

$$\dots U_0(t_{n-1}, t_n) W(t_n) U_0(t_n, 0) | \phi_I \rangle$$

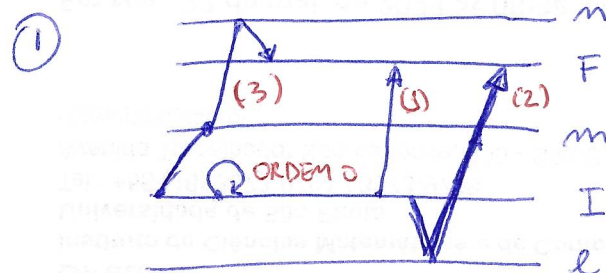
ISSO NOS LEVA A UMA INTERPRETAÇÃO (46)

DA PERTURBAÇÃO:

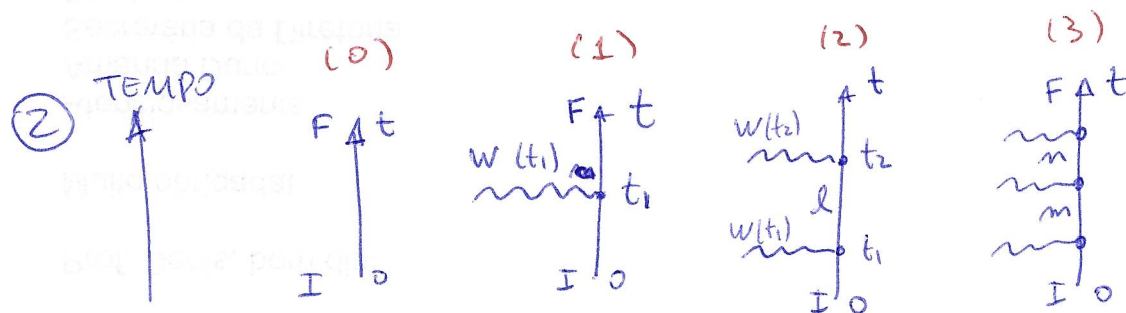
- NA MAIOR PARTE DO TEMPO, O SISTEMA É EVOLUÍDO POR  $H_0$  [OS TERMOS  $U(t_{k-1}, t_k)$  NA SÉRIE PERTURBATIVA (CHAMADA SÉRIE DE DYSON)].

EM POUCOS INSTANTES A PERTURBAÇÃO ATUA SOBRE O SISTEMA [OS TERMOS  $W(t_k)$ ] E TIRA O SISTEMA DO AUTO-ESTADO DE  $H_0$ .

HÁ 2 REPRESENTAÇÕES GRÁFICAS P/ VISUALIZAR A TEORIA DE PERTURBAÇÃO



TRANSIÇÕES "VIRTUAIS" ACONTECEM ANTES DO ESTADO FINAL SER ALCANÇADO



LEGENDA: ↑ = PROPAGAÇÃO LIVRE (DE ACORDO COM  $H_0$ ) NÃO PERTURBADA

~ = INTERAÇÃO COM A PERTURBAÇÃO (PODE "CARREGAR" ENERGIA E MOMENTO)

EXEMPLO:  $W(t) = W_0 \Theta(t)$

(5)

$$= \begin{cases} 0, & t < 0 \\ W_0, & t > 0 \end{cases}$$

EM 1ª ORDEM  
~~INTERACÇÃO~~

$$W_{FI}(t) = \underbrace{\langle \phi_F | W_0 | \phi_I \rangle}_{W_{FI,0}} \Theta(t)$$

O ELEMENTO DE MATRIZ  $W_{FI,0}$  É RESPONSÁVEL PELO QUE É CHAMADO DE REGRAS DE SELECÇÃO, SÓ HAVERÁ EXCITAÇÃO (MUDANÇA DE ESTADO) SE  $W_{FI,0}$  FOR NÃO NULO.

$$b_F^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} W_{FI,0} \int_0^t e^{iW_{FI}t'} dt'$$

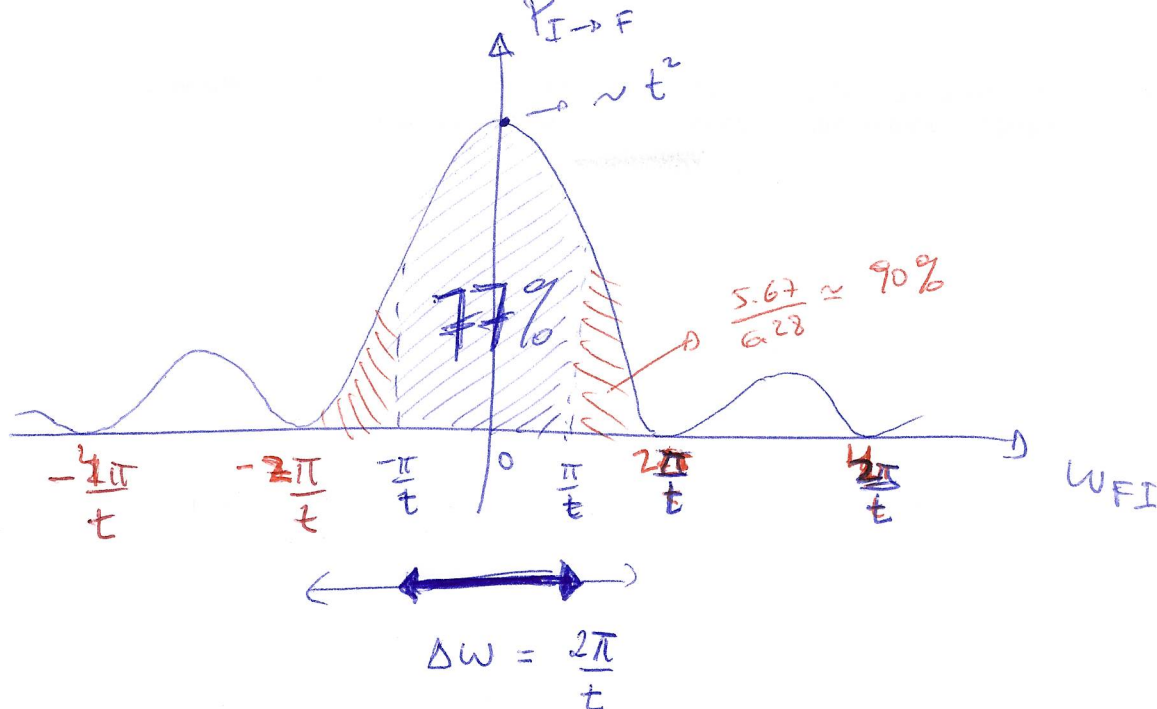
$$\frac{1}{iW_{FI}} \left( e^{iW_{FI}t} - 1 \right) = \frac{2e^{\frac{iW_{FI}t}{2}}}{W_{FI}} \sin\left(\frac{W_{FI}t}{2}\right)$$

$$\boxed{b_F^{(1)}(t) = -i \frac{W_{FI,0}}{\hbar W_{FI}} 2 \sin(W_{FI}t)}$$

$$\Rightarrow P_{I \rightarrow F}(t) \approx |b_F^{(1)}(t)|^2 = \frac{|W_{FI,0}|^2}{(\hbar W_{FI})^2} \times 4 \sin^2\left(\frac{W_{FI}t}{2}\right)$$



6



$$\int_{-\pi/t}^{\pi/t} \frac{4s^{-2}(\omega t/2)}{\omega^2} d\omega \approx 4.86t$$

$$\int_{-2\pi/t}^{2\pi/t} \frac{4s^{-2}(\omega t/2)}{\omega^2} d\omega \approx 5.67t$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{4s^{-2}(\omega t/2)}{\omega^2} d\omega \approx 6.28t$$

A GRANDE MAIORIA DAS TRANSIÇÕES SÓ ACONTECE EM QUE  $\Delta\omega \leq \frac{2\pi}{t}$ .

SENDO  $t$  O TEMPO EM QUE A PERTURBAÇÃO ESTÁ "LIGADA", ENTÃO PODE-SE INTERPRETAR ESSE RESULTADO COMO

UMA RELAÇÃO DE INCERTEZA

\* O PICO CRESCE COM  $\sim t^2$ .

~~DECRESCER~~ A BASE DECRESCER COM  $\sim 1/t$

$\Rightarrow$  A ÁREA DO PICO CENTRAL CRESCE  $\sim t$

$$\Delta\omega \Delta t \approx 2\pi$$

$$\Rightarrow \underbrace{h \Delta\omega \Delta t}_{\Delta E} \approx 2\pi h$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta E \Delta t \approx h}$$

CO A RELAÇÃO DE INCERTEZA EXISTE PORQUE  $H$  NÃO COMUTA COM SEUS MESMO EM TEMPO DIFERENTES

MAS NÃO É UMA RELAÇÃO COMO  $\Delta p \Delta x \geq h$  PORQUE NÃO HÁ OPERADOR ASSOCIADO AO TEMPO QUE NÃO COMUTA COM  $H$ .



# CONCLUSÕES

7

a) PARA  $Wt \ll 1 \Rightarrow P_{FI} \sim t^2$  CRESCE RAPIDAMENTE

b) A MAIORIA DAS TRANSIÇÕES SÓ SÃO QUE  $|E_F - E_I| \Delta t \lesssim 2\pi\hbar = \hbar$  (77%)

$\Delta E = |E_F - E_I| \equiv$  INCERTEZA NA ENERGIA DO SISTEMA

$t = \Delta t =$  INTERVALO DE TEMPO EM QUE O SISTEMA ESTÁ SOB INFLUÊNCIA DA PERTURBAÇÃO  $W_0$ .

c) A ENERGIA DO SISTEMA É "CONSERVADA" DENTRO DO ERRO  $\frac{2\pi\hbar}{t}$ . ESSE ERRO É DEVIDO AO AGENTE EXTERNO QUE "LIGA"  $W_0$ .

\* REESCREVENDO  $P_{I \rightarrow F} = t^2 \left| \frac{W_{FI,0}}{\hbar} \right|^2 \frac{\sin^2 \theta}{\theta^2}, \theta = \frac{W_{FI} t}{2}$

- CASO  $\theta \ll 1 \Rightarrow P_{I \rightarrow F} \approx \left| \frac{W_{FI}}{\hbar} \right|^2 t^2$

TAXA DE TRANSIÇÃO  $\Gamma_{I \rightarrow F} \equiv \frac{dP}{dt} \propto t$  (CRESCE LINEARMENTE NO TEMPO)

- CASO  $\theta \gg 1$  (ENQUANTO 1º ORDEM DE TEO. PERT. AINDA É VÁLIDA  $P_{I \rightarrow F} \ll 1$ )

$\Rightarrow \frac{\sin^2(W_{FI} t/2)}{(W_{FI} t/2)^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 2\pi \delta(W_{FI})$

$\Rightarrow P_{I \rightarrow F} \rightarrow 2\pi \left| \frac{W_{FI,0}}{\hbar} \right|^2 \delta(W_{FI}) t$

$\Rightarrow \Gamma_{I \rightarrow F} = 2\pi \left| \frac{W_{FI,0}}{\hbar} \right|^2 \delta(W_{FI})$

ESSE RESULTADO VEM DO

FAZTO  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$

$\Rightarrow \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x)$

$\Gamma_{I \rightarrow F} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{FI,0}|^2 \delta(E_F - E_I)$

## DECAIMENTO PARA O CONTÍNUO

(8)

- SUPONHA QUE EXISTA UM CONTÍNUO DE ESTADOS QUE A PERTURBAÇÃO "CONECTA" O ESTADO INICIAL.

• QUAL A PROBABILIDADE DE DECAIMENTO?

$|I\rangle$

$$P_I(t) = \sum_F P_{I \rightarrow F}(t)$$



CONTÍNUO DE ESTADOS

CONTÍNUO DE ESTADOS:  $\sum_F \mapsto \int dE_F \rho(E_F)$

DENSIDADE DE ESTADOS

$$\Rightarrow P_I(t) = \int dE_F \rho(E_F) P_{I \rightarrow F}(t)$$

PARA TEMPOS LONGOS ENQUANTO 1ª ORDEM FOR VÁLIDA

$$\simeq \int dE_F \rho(E_F) \frac{2\pi}{\hbar} |W_{FI,0}|^2 \delta(E_F - E_I) t$$

$$\Rightarrow \boxed{P_I = \Gamma_I t} \quad \text{ONDE}$$

$$\boxed{\Gamma_I = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle F | W_0 | I \rangle|^2 \rho(E_I)}$$

ESTA TAXA DE DECAIMENTO (TAXA DE TRANSIÇÃO)

É CONHECIDA COMO REGRA ÁUREA DE FERMI

(FERMI'S GOLDEN RULE)

EX: EFEITO AUGER (NÃO TRATAREMOS AQUI)

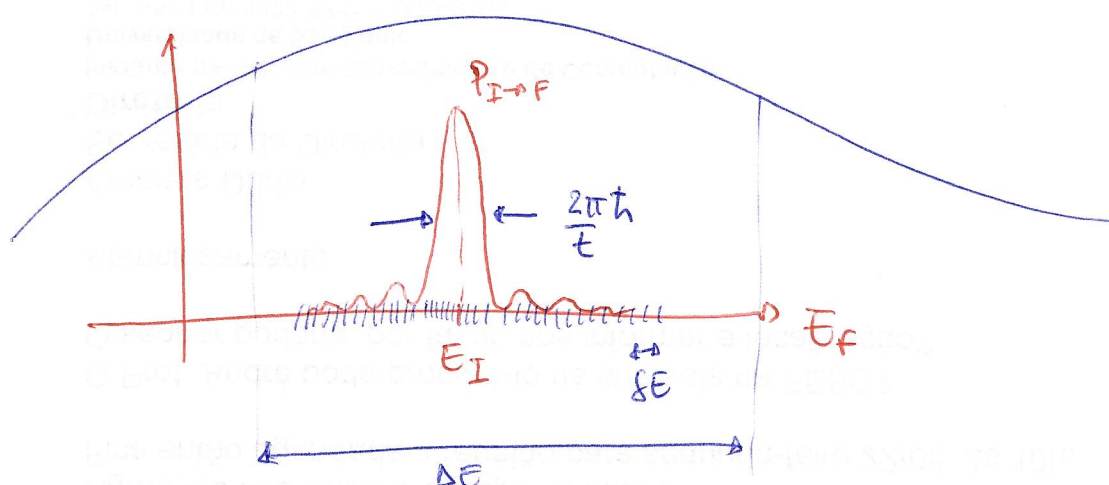
# OUTRA DERIVAÇÃO

9

$$P_I(t) = \int dE_F \rho(E_F) \frac{|W_{FI0}|^2}{(E_F - E_I)^2} 4 \sin^2\left(\frac{(E_F - E_I)t}{2\hbar}\right) \quad \text{VIDE PG 5}$$

HIPÓTESES:

- $\rho(E)$  VARIA LENTAMENTE EM TORNO DOS ESTADOS FINAIS
- $|W_{FI0}|^2$  TAMBÉM VARIA LENTAMENTE EM TORNO DOS ESTADOS FINAIS



$\Delta E$   
↳ ESCALA DE ENERGIA ONDE  $\rho(E)$  E/OU  $|W_{FI0}|^2$  VARIAM APRECIavelmente

$$\Rightarrow P_I(t) \approx \rho(E_I) |W_{FI0}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4 \sin^2\left(\frac{(E_F - E_I)t}{2\hbar}\right)}{(E_F - E_I)^2} dE_F$$

LIMITES DE INTEGRAÇÃO OR ENQUANTO  $\frac{\sin^2(x)}{x^2}$  POR A ZERO SUFICIENTEMENTE RÁPIDO

$$\Rightarrow P_I(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{FI0}|^2 \rho(E_I) t = \Gamma t$$

OBS: ①  $P = \Gamma t \rightarrow$  DEFINIÇÃO:  $\tau = \frac{1}{\Gamma} =$  "TEMPO DE VIDA"

②  $\frac{2\pi\hbar}{t} \gg \Delta E \Rightarrow t \ll \frac{2\pi\hbar}{\Delta E}$  (CONTÍNUO DE ESTADOS E UMA BOA APROXIMAÇÃO)

③  $\Gamma \hbar \ll \Delta E \Rightarrow$  O SISTEMA "DECAI" P/ O CONTÍNUO E NÃO RETORNA P/  $|I\rangle$ . DECAYMENTO "IRREVERSÍVEL"



# MAIS OUTRA DERIVADA

(10)

$$\Gamma_I = \frac{d}{dt} P_I(t) = \frac{d}{dt} \int dE_F p(E_F) \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t W_{FI,0} e^{iW_{FI}t'} dt' \right|^2$$
$$= \frac{d}{dt} \int dE_F p(E_F) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \frac{\langle F | W_0 | I \rangle \langle I | W_0 | F \rangle}{\hbar^2} e^{iW_{FI}(t_1 - t_2)}$$

- USING THE ASSUMPTIONS THAT  $p(E_F)$  AND  $W_{FI,0}$  VARIES SLOWLY AROUND  $E_I$ , THEN

$$\Gamma_I = \frac{d}{dt} \left( p(E_I) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \frac{|W_{FI,0}|^2}{\hbar^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dE_F e^{\frac{iE_F - E_I}{\hbar}(t_1 - t_2)}}_{\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(t_1 - t_2)} = 2\pi\hbar \delta(t_1 - t_2)} \right)$$
$$= \frac{d}{dt} \left( p(E_I) \frac{|W_{FI,0}|^2}{\hbar} 2\pi \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \delta(t_1 - t_2) \right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\Gamma_I = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle F | W_0 | I \rangle|^2 p(E_I)}$$



• GENERALIZAR A REGRAS ÁURE DE FERMI PARA  
PERTURBAÇÕES HARMÔNICAS

(11)

$$W(t) = W_0 \cos(\omega t + \phi) = \frac{1}{2} \left( V_0 e^{i\omega t} + V_0^+ e^{-i\omega t} \right)$$

onde  $V_0 = W_0 e^{i\phi}$

$$\Rightarrow P_{I \rightarrow F}(t) = \left| \frac{-i}{\hbar} \langle \phi_F | V_0 | \phi_I \rangle \int_0^t \frac{e^{i(\omega + \omega_{FI})t'}}{2} dt' - \frac{i}{\hbar} \langle \phi_F | V_0^+ | \phi_I \rangle \int_0^t \frac{e^{i(\omega_{FI} - \omega)t'}}{2} dt' \right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| W_{FI,0} e^{i\phi} e^{\frac{i(\omega + \omega_{FI})t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega + \omega_{FI}}{2} t\right)}{\omega + \omega_{FI}} + W_{FI,0} e^{-i\phi} e^{\frac{i(\omega_{FI} - \omega)t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{FI} - \omega}{2} t\right)}{\omega_{FI} - \omega} \right|^2$$

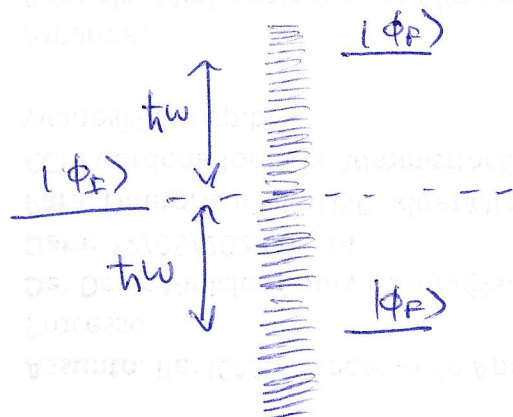
PARA TEMPOS LONGOS  $\frac{\sin^2\left(\frac{A}{2}t\right)}{A^2 t} \rightarrow \pi \delta(A)$  (VIRE PAG ⑦)

SENDO ASSIM, O TERMO CRUZADO  $\rightarrow \delta(\omega - \omega_{FI}) \delta(\omega + \omega_{FI}) = 0$

$$\Rightarrow P_{I \rightarrow F}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |W_{FI,0}|^2 \left[ \pi \delta(\omega + \omega_{FI}) t + \pi \delta(\omega - \omega_{FI}) t \right]$$

PARA DECAIMENTO NO  
CONTÍNUO, TEMOS QUE

$$P_I = \sum_F P_{I \rightarrow F} \rightarrow \int dE_F \rho(E_F) P_{I \rightarrow F} = \Gamma_I t, \text{ onde}$$



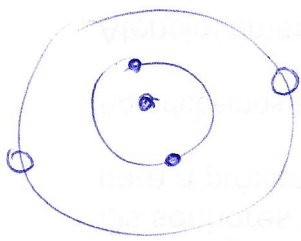
$$\Gamma_I = \frac{\pi}{\hbar} |\langle \phi_F | W_0 | \phi_I \rangle|^2 \left( \rho(E_I - \hbar\omega) + \rho(E_I + \hbar\omega) \right)$$

EMISSION  $\swarrow$   $\searrow$  ABSORÇÃO

Exemplo: Efeitos foto-elétricos

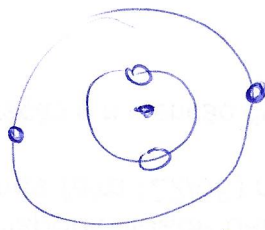
EXEMPLO: EFEITO AUGER PI O He

(12)



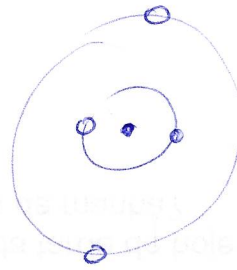
$$E = -108 \text{ eV}$$

$$m_1 = m_2 = 1$$



$$E = -27 \text{ eV}$$

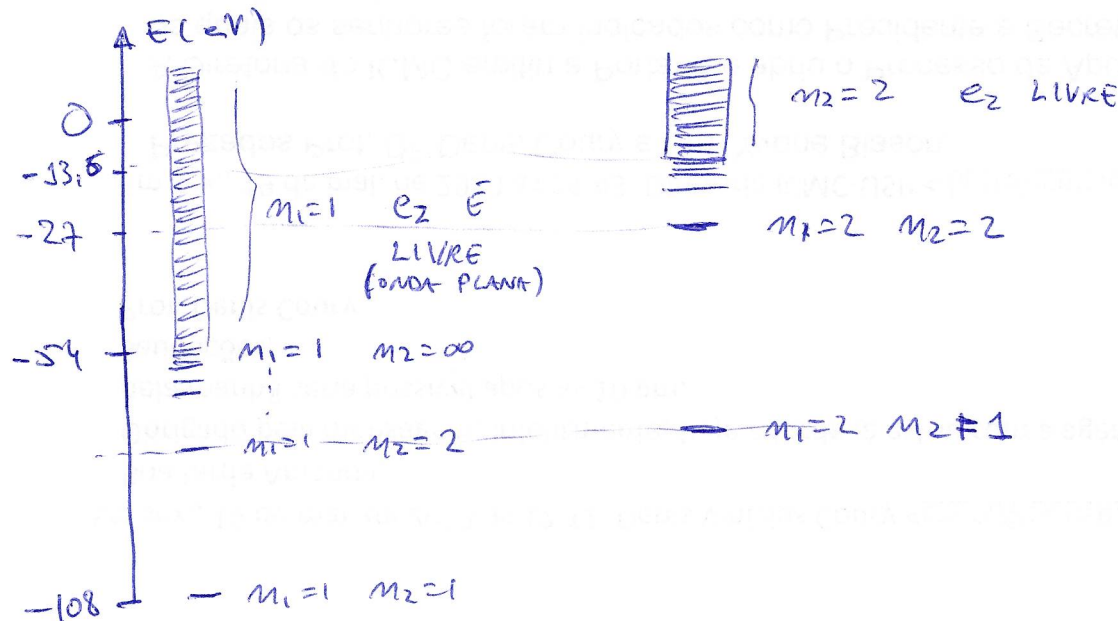
$$m_1 = m_2 = 2$$



+  $e^-$  LIVRE

$$E = -54 \text{ eV}$$

$$m_1 = 1, m_2 = \infty$$



$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

$$W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

AS TRANSIÇÕES

$$|2s, 2s\rangle \rightarrow |1s, 2s\rangle + \gamma$$

$$|1s, 1s\rangle + 2\gamma$$

SÃO TAMBÉM POSSÍVEIS, MAS MENOS PROVÁVEIS

TAXA DE TRANSIÇÃO:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle 1s, \vec{k} | W | 2s, 2s \rangle|^2 \rho(E = -27 \text{ eV})$$

INTERAÇÃO  $e-e$   $\vec{E}$   
SUFICIENTE P/ PROMOVER  
A TRANSIÇÃO

$$|2s, 2s\rangle \rightarrow |1s\rangle \otimes |\vec{k}\rangle$$

EMIÇÃO DE  $e^-$  SEM  
RADIÇÃO

(AUTO-IONIZAÇÃO OU  
TRANSIÇÃO AUGER)

$$W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{r}_1) Y_{lm}(\hat{r}_2) \quad (13)$$

PRECISAMOS CALCULAR  $\langle 100, \vec{k} | W | 200, 200 \rangle$

$$\langle \vec{r} | l m \rangle = R_{lm}(r) Y_{lm}(\hat{r})$$

$$\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{4\pi}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{r})$$

↓  
FUNÇÃO DE BESSEL ESFÉRICA

REGRAS DE SELEÇÃO:

$\langle 100 | W | 200 \rangle$  SELECIONA  $l=0$  EM  $W$

$$\Rightarrow W \rightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times 4\pi \frac{1}{r_>} \underbrace{Y_{00}^*(\hat{r}_1) Y_{00}(\hat{r}_2)}_{1/4\pi}$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_>} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \max\{r_1, r_2\}}$$

$\langle \vec{k} | W | 200 \rangle$  SELECIONA A COMPONENTE  $l=0$  DA ONDA PLANA

$$\langle \vec{k} | \vec{r}_2 \rangle \rightarrow \frac{4\pi}{V} j_0(kr_2) Y_{00}^*(\hat{k}) Y_{00}(\hat{r}_2)$$

$$= \frac{1}{V} j_0(kr_2)$$

REGRAS ÁUREAS DE FERMÍ:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle ss, \vec{k} | W | zs, zs \rangle \right|^2 \rho(E_F)$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int 4\pi r_1^2 dr_1 \int 4\pi r_2^2 dr_2 R_{10}(r_1) Y_{00}^* \frac{j_0(kr_2)}{\sqrt{V}} \frac{1}{r_>} R_{20}(r_1) R_{20}(r_2) Y_{00} Y_{00}$$



$$\langle 1s, \vec{k} | W | 2s, 2s \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{r_1^2 r_2^2 \sqrt{4\pi} R_{10}^*(r_1) R_{20}(r_1) j_0(kr_2) R_{20}(r_2)}{\sqrt{V} \max\{r_1, r_2\}}$$

$$\begin{cases} R_{10}(r) = 2 \left( \frac{r}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{r}{a_0}} \\ R_{20}(r) = \left( \frac{r}{2a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \end{cases} \quad j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$

PRECISAMOS INTEGRAR

$$\int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \frac{r_1^2 r_2^2}{r_2} \frac{2}{2^{3/2}} \left( \frac{r_1}{a_0} \right)^3 \left( 2 - \frac{r_1}{a_0} \right) e^{-\frac{3}{2} \frac{r_1}{a_0}} \frac{\sin kr_2}{kr_2} \left( \frac{r_2}{2a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{r_2}{a_0} \right) e^{-\frac{r_2}{2a_0}}$$

FAZENDO  $\frac{r_1}{a_0} = x_1$  E  $\frac{r_2}{a_0} = x_2$

$$\int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \frac{x_1^2 x_2^2}{\frac{a_0}{2} x_2} \frac{1}{4} (2-x_1) e^{-\frac{3}{2} x_1} \frac{\sin\left(\frac{ka_0}{2} x_2\right)}{\frac{ka_0}{2} x_2} \left(\frac{a_0}{2}\right)^{\frac{3}{2}} (2-x_2) e^{-\frac{x_2}{2}}$$

$$= \frac{1}{4} \frac{a_0^2}{a_0} \frac{1}{ka_0} \left(\frac{a_0}{2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \int_0^\infty dx_1 dx_2 \frac{x_1^2 x_2^2 (2-x_1)(2-x_2) \sin\left(\frac{ka_0}{2} x_2\right) e^{-\frac{3}{2} x_1 - \frac{x_2}{2}}}{\max\{x_1, x_2\} x_2}$$

$$\int_0^\infty dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 x_1 (2-x_1) e^{-\frac{3}{2} x_1} x_2 (2-x_2) \sin\left(\frac{ka_0}{2} x_2\right) e^{-\frac{x_2}{2}}$$

$$+ \int_0^\infty dx_1 \int_{x_1}^\infty dx_2 x_1^2 (2-x_1) e^{-\frac{3}{2} x_1} (2-x_2) \sin\left(\frac{ka_0}{2} x_2\right) e^{-\frac{x_2}{2}}$$

$$= \frac{32 R (8 + 42 R^2 + R^4)}{27 (4 + R^2)^4}, \quad R = \frac{ka_0}{2}$$

$$= F(R) = \frac{32 R (8 + 42 R^2 + R^4)}{27 (4 + R^2)^4}$$

DA REGRA ÁUREA DE FERMÍ,  $E_I = E_F$

(15)

$$E_I = E_{2s,2s}, \quad E_F = E_{1s} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ENERGIA:  $E_{m_1 m_2} = E_{m_1} + E_{m_2}$

$$E_m = -Z^2 \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{m^2} = -Z^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{2m^2} \approx -\frac{Z^2}{m^2} \times 13.6 \text{ eV}$$

$$= -\frac{Z^2}{2} \alpha^2 mc^2 \frac{1}{m^2}$$

$$E_I = 2 \times \left( -\frac{Z^2}{2} \times 13.6 \text{ eV} \right) \approx -27.2 \text{ eV}$$

$$E_F = -54.4 \text{ eV} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \left( \frac{-Z^2 \alpha^2 mc^2}{8} \right) + \frac{Z^2 \alpha^2 mc^2}{2}$$

$$= \frac{Z^2 \alpha^2 mc^2}{4}$$

$$\Rightarrow \left[ k = \frac{Z\alpha mc}{\sqrt{2}\hbar} = \frac{Z}{\sqrt{2}a_0} = \frac{\sqrt{2}}{a_0} \right]$$

$$\approx 2.7 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} \approx 2.35 \text{ \AA}$$

"VELOCIDADE" DO  $e^-$  AUGER:  $v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = \sqrt{\frac{2 \times 27.2 \text{ eV}}{510 \text{ KeV}/c^2}} \approx 0.01 c$

PRECISAMOS AGORA DA DENSIDADE DE ESTADOS DAS ONDAS PLANAS

solu

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int \rho(E) dE, \quad \text{MAS } \sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{1}{(\Delta k)^3} \int d\vec{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int 4\pi k^2 dk$$

$$\text{MAS } \frac{1}{3} k^3 = \frac{1}{3} \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} \Rightarrow k^2 dk = \frac{1}{2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

$$\Rightarrow \rho(E) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} m \sqrt{2mE} \times (4\pi) = \frac{m}{\hbar^3} \sqrt{2mE} dE$$

FINALMENTE,

(16)

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle 1s, \vec{k} | W | 2s, 2s \rangle \right|^2 \rho(E)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \times \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \times \frac{z^2}{4} \times \frac{1}{ka_0} \times \left(\frac{a_0}{z}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{4\pi}{V}} F\left(\frac{ka_0}{z}\right) \right|^2 \times \frac{V m \sqrt{2mE}}{(2\pi\hbar)^3} \times 4\pi$$

ONDE  $\left\{ \begin{array}{l} ka_0 = \sqrt{z} \Rightarrow \frac{ka_0}{z} = \frac{1}{\sqrt{z}} \end{array} \right.$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = \alpha^2 mc^2$$

$$F\left(\frac{1}{\sqrt{z}}\right) = \frac{49.024\sqrt{z}}{1.594 \cdot 523} \approx 0.0438888 = \frac{832\sqrt{z}}{19683} \approx 0.06$$

$$\Rightarrow \Gamma = \frac{1}{\pi\hbar^4} m \sqrt{2m\alpha^2 mc^2} (\alpha^2 mc^2)^2 \frac{1}{z} \left(\frac{a_0}{z}\right)^3 4\pi \times (0.0597788)^2$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{z}} (0.06)^2 \frac{(\alpha^2 mc^2)^{5/2} (ma_0)^{3/2}}{\hbar^4}, \quad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha mc}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{z}} (0.06)^2 \frac{(\alpha mc^2)^{5/2} m^{3/2} \hbar^3}{\hbar^4 \alpha^3 m^3 c^3} = \frac{1}{2\sqrt{z}} \frac{(0.06)^2 mc^2}{\hbar \alpha}$$

$$\approx \frac{1}{2\sqrt{z}} \frac{(0.06)^2 510 \text{ KeV}}{6.582 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}} \sqrt{137} \approx 1.146 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$$

TEMPO DE VIDA DO

$$\text{ESTADO } (2s, 2s) = \frac{1}{\Gamma} \sim 10^{-19} \text{ s}$$



APLICAÇÃO = ÁTOMO DE H NUM CAMPO E.M. OSCILANTE

(17)

$$H = \frac{|\vec{p} + e\vec{A}|^2}{2m} + V_0 - e\phi$$

USANDO O "GAUGE" DE COULOMB,  $\phi=0$ ,  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$

$$\Rightarrow H = \frac{p^2}{2m} + V_0 + \frac{e}{2m} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{2m} A^2$$

ORDEN SUPERIOR  $\rightarrow$  DESPREZAR

MAS  $\vec{p} \cdot \vec{A} |\psi\rangle = -i\hbar \nabla \cdot (\vec{A} |\psi\rangle)$

$$= -i\hbar (\nabla \cdot \vec{A}) |\psi\rangle - i\hbar \vec{A} \cdot \nabla |\psi\rangle = \vec{A} \cdot (-i\hbar \nabla |\psi\rangle) = \vec{A} \cdot \vec{p} |\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} = 2\vec{A} \cdot \vec{p}$$

$$\Rightarrow H = \frac{p^2}{2m} + V_0 + \frac{e}{m} \vec{A} \cdot \vec{p}$$

$W \equiv$  PERTURBAÇÃO

$H_0$  (ÁTOMO DE H NÃO PERTURBADO)

POTENCIAL VETOR: (NOTE QUE É UM CAMPO DE RADIAÇÃO CLÁSSICO)

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \vec{A}(\omega') e^{-i\omega'(t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c})}$$

ONDE  $\begin{cases} \hat{n} \equiv \text{DIREÇÃO DE PROPAGACÃO} \\ \vec{A} \cdot \hat{n} = 0 \end{cases}$

COMO  $A(\vec{r}, t) \in \mathbb{R} \Rightarrow \vec{A}^*(\omega') = \vec{A}(-\omega')$

EXEMPLO:  $\hat{n} = \hat{z}$  E  $\vec{A}(\omega') = A_0 (\delta(\omega - \omega') + \delta(\omega + \omega')) \hat{z}$

$$\Rightarrow \begin{cases} \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} = 2\omega A_0 \sin(\omega(t - z/c)) \hat{z} \\ \vec{B}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{A} = 2\frac{\omega}{c} A_0 \sin(\omega(t - z/c)) \hat{y} \end{cases}$$

# VEZOR DE POYNTING

(18)

$$\vec{N} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \times (\nabla \times \vec{A}) = \frac{4\omega^2 A_0^2}{4\mu_0 c} \sin^2(\omega t - \frac{\omega z}{c}) \hat{z}$$

$$\Rightarrow \bar{N} = \frac{1}{2} \frac{4\omega^2 A_0^2}{\mu_0 c} = \frac{1}{2} \epsilon_0 c E_0^2 \quad (\text{como esperado})$$

~~PROSECÇÃO~~ CALCULAR PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO

$$b_{I \rightarrow F}^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} W_{FI}(t) e^{i\omega_{FI}t} dt$$

\* NOTE OS LIMITES DE INTEGRAÇÃO. ESTAMOS

CONSIDERANDO QUE A PERTURBAÇÃO (CAMPO E.M. EXTERNO)

POI LIGADO EM  $t_0 = -\infty$  E ESTÁ LIGADO ATÉ  $t = +\infty$

$$W(t) = \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'(t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c})} \vec{A}(\omega') \cdot \vec{p}$$

$$\text{INTEGRANDO SOBRE } t : \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega_{FI} - \omega')t} dt = 2\pi \delta(\omega_{FI} - \omega')$$

$$\Rightarrow b_{I \rightarrow F}^{(1)} = \frac{2\pi}{i\hbar} \left( \frac{e}{m} \right) \langle \Phi_F | e^{i\omega_{FI} \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c}} \vec{A}(\omega_{FI}) \cdot \vec{p} | \Phi_I \rangle$$

SEJA  $\vec{A}(\omega_{FI}) = A(\omega_{FI}) \hat{e}$ ,  $\hat{e} \equiv$  DIREÇÃO DE POLARIZAÇÃO  
ONDE  $\hat{e} \cdot \hat{n} = 0$

$$\Rightarrow P_{I \rightarrow F} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \hbar^2} |A(\omega_{FI})|^2 |\langle \Phi_F | e^{i\omega_{FI} \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c}} \vec{p} \cdot \hat{e} | \Phi_I \rangle|^2$$

É INTERESSANTE RELACIONAR ESSE RESULTADO  
COM O VETOR DE POYNTING E A SEQ DE CHARGE

(19)

$$\vec{N} = -\frac{1}{\mu_0} \left( \frac{\partial \vec{\pi}}{\partial t} \right) \times (\nabla \times \vec{A})$$

$$= -\frac{1}{\mu_0} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' (-i\omega') A(\omega') \hat{e} e^{-i\omega'(t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c})} \right) \times \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' \frac{i\omega''}{c} A(\omega'') e^{-i\omega''(t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c})} \hat{n} \times \hat{e} \right)$$

ONDE USAMOS QUE  $\nabla \times (f \vec{c}) = f \nabla \times \vec{c} + \nabla f \times \vec{c}$

AGORA, USAMOS QUE  $\hat{e} \times (\hat{n} \times \hat{e}) = (\hat{e} \cdot \hat{e}) \hat{n} - (\hat{e} \cdot \hat{n}) \hat{e} = \hat{n}$

$$\Rightarrow \vec{N} = -\frac{\hat{n}}{\mu_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' d\omega'' A(\omega') A(\omega'') e^{-i(\omega' + \omega'')(t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c})} \omega' \omega''$$

$$\text{PRESSÃO DE RADIÇÃO} \equiv \frac{\vec{N} \cdot \hat{n}}{c} = \frac{\text{ENERGIA}}{\text{VOLUME}}$$

LEMBRESE QUE  $\vec{D} \cdot \vec{N} = \frac{\partial u}{\partial t} \Rightarrow [N] = \frac{\text{ENERGIA}}{\text{ÁREA} \cdot \text{TEMPO}} \rightarrow \frac{\text{ENERGIA INCIDENTE}}{\text{ÁREA} \cdot \text{TEMPO}}$

DEFININDO:  $\int_0^{\infty} \tilde{N}(\omega) d\omega = c \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\vec{N} \cdot \hat{n}}{c} dt$

$[N] = \frac{\text{ENERGIA}}{\text{ÁREA} \cdot \text{FREQÜÊNCIA}} \rightarrow \frac{\text{ENERGIA INCIDENTE}}{\text{ÁREA} \cdot \text{FREQÜÊNCIA}}$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} \tilde{N}(\omega) d\omega = -\frac{1}{\mu_0 c} \int d\omega' d\omega'' A(\omega') A(\omega'') \omega' \omega'' \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega' + \omega'')(t - \frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c})}$$

$$= \frac{2\pi}{\mu_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\omega) \underbrace{A(-\omega)}_{A^*(\omega)} \omega^2$$

$$= \frac{4\pi}{\mu_0 c} \int_0^{\infty} |A(\omega)|^2 d\omega$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{N}(\omega) = \frac{4\pi\omega^2 |A(\omega)|^2}{\mu_0 c}}$$



Logo,  $P_{I \rightarrow F} = \frac{\pi e^2}{m^2 \hbar^2} \frac{\mu_0 c}{\omega^2} \tilde{N}(\omega) \left| \langle \phi_F | e^{i\omega_{FI} \frac{\hat{m} \cdot \vec{n}}{c}} \vec{p} \cdot \hat{e} | \phi_I \rangle \right|^2$  (20)

AGORA RELACIONAMOS COM A SEQ DE CHOQUE DE ABSORÇÃO

$$\int_0^\infty \sigma(\omega) \tilde{N}(\omega) d\omega \equiv \text{ENERGIA ABSORVIDA}$$

$$\Rightarrow [\sigma(\omega)] = \frac{\text{ENERGIA ABSORVIDA}}{\text{ENERGIA INCIDENTE / ÁREA}} \quad (\text{NA FREQUÊNCIA } \omega)$$

$$\text{MAS } \int_0^\infty \sigma(\omega) \tilde{N}(\omega) d\omega = \int_0^\infty \underbrace{\hbar \omega_{FI}}_{\text{ENERGIA INCIDENTE}} \underbrace{P_{I \rightarrow F}}_{\text{PROB. ABSORÇÃO}} d\omega_{FI}$$

$$\Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{m^2 \hbar^2} \mu_0 c \frac{\hbar \omega}{\omega^2} |\langle \phi_F | e^{i\omega_{FI} \frac{\hat{m} \cdot \vec{n}}{c}} \vec{p} \cdot \hat{e} | \phi_I \rangle|^2, \quad \text{LEMBRANDO QUE } \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2 \omega} \alpha |\langle \phi_F | e^{i\omega_{FI} \frac{\hat{m} \cdot \vec{n}}{c}} \vec{p} \cdot \hat{e} | \phi_I \rangle|^2}$$

AGORA PRECISAMOS CALCULAR O ELEMENTO  
DE MATRIZ  $\langle \phi_F | e^{i W_{FI} \frac{\hat{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}{c}} \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{e}} | \phi_I \rangle$

(21)

ORDÉM DE GRANDEZA DE  $W_{FI} \frac{\hat{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}{c}$

$$\hbar W_{FI} \sim \text{ENERGIA DE LIGAMEN} \sim \frac{z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2a_0)}$$

$$a \sim \text{RAIO DO ÁTOMO} \sim \frac{a_0}{z}$$

$$\Rightarrow W_{FI} \frac{\hat{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}{c} \sim \frac{1}{\hbar} \frac{z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2a_0)} \left( \frac{a_0}{cz} \right) = \frac{ze^2}{2\hbar 4\pi\epsilon_0 c} = \frac{1}{2} z\alpha$$

LOGO  $W_{FI} \frac{\hat{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}{c}$  É TÍPICAMENTE PEQUENO DESDE QUE  
 $z \ll \frac{1}{\alpha} \approx 137$

$\Rightarrow$  PODAMOS EXPANDIR

$$e^{i W_{FI} \frac{\hat{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}{c}} = 1 + i W_{FI} \frac{\hat{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{r}}}{c} + \dots$$

1º TERMO: DIPOLÔ ELÉTRICO

$$\langle F | \vec{\mathbf{p}} | I \rangle \quad \text{NOTE QUE } H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{r}})$$

$$\frac{m}{i\hbar} \langle F | \vec{\mathbf{r}} | I \rangle$$

$$\begin{aligned} [\vec{\mathbf{r}}, H_0] &= \frac{1}{2m} [\vec{\mathbf{r}}, p^2] = \frac{1}{2m} \left( \underbrace{[\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}]}_{i\hbar} \vec{\mathbf{p}} + \vec{\mathbf{p}} \underbrace{[\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}]}_{i\hbar} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{m} \vec{\mathbf{p}} \end{aligned}$$

$$= m \frac{E_I - E_F}{i\hbar} \langle F | \vec{\mathbf{r}} | I \rangle$$

$$= i m W_{FI} \langle F | \vec{\mathbf{r}} | I \rangle = \langle F | \vec{\mathbf{p}} | I \rangle$$

# REGRAS DE SELEÇÃO

(22)

SOMENTE AS TRANSIÇÕES EM QUE

$$\langle f | \vec{r} | i \rangle \neq 0$$

- EM GERAL, REGRAS DE SELEÇÃO SE ORIGINAM EM INTEGRAIS DO TIPO  $\int \psi_f^* \hat{O} \psi_i d\vec{r}$  ONDE  $\hat{O}$  É O "OPERADOR TRANSIÇÃO".

— É BASTANTE ÚTIL CONHECER AS SIMETRIAS DE  $\psi_{f,i}$  PARA DESCOBRIR AS TRANSIÇÕES PERMITIDAS

EXEMPLO:  $|i\rangle = |1s\rangle = |100\rangle$

$|f\rangle = |n \ell m\rangle$  (ESTADO GÊNÉRICO DO ÁTOMO H)

$$\begin{cases} \langle \vec{r} | 1s \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0} \\ \langle \vec{r} | n \ell m \rangle = \sqrt{\left( \frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!}} e^{-\frac{1}{2}\rho} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ = F(n) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad \text{ONDE } \rho = \frac{2r}{na_0} \end{cases}$$

$$\text{SEJA } \vec{r} \cdot \hat{e} = \vec{r} \cdot \hat{z} = z = r \cos \theta = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \phi)$$

↓  
POLARIZAÇÃO  
DO CAMPO ELÉTRICO

$$\Rightarrow \langle n \ell m | z | 100 \rangle = (\text{INTEGRAL RADIAL}) \times \int d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{10}(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) \\ \propto \int d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{10}(\theta, \phi)$$

$\Rightarrow$  SOMENTE TRANSIÇÕES PI ESTADOS TAIS QUE  $\ell=1, m=0$  SÃO ~~PERMITIDAS~~ SELECIONADAS



SE TIVÉSSEMOS ESCOLHIDO  $\hat{e} = \hat{x}$

(23)

$$\Rightarrow \vec{r} \cdot \hat{e} = x = r \sin\theta \cos\phi \propto r (Y_{11}(\theta, \phi) + Y_{1-1}(\theta, \phi))$$

LOGO, AS TRANSIÇÕES PERMITIDAS

SERIAM AQUELAS EM QUE  $\Delta l = 1, \Delta m = \pm 1$

• EM GERAL, AS TRANSIÇÕES DE DÍPOLO ELÉTRICO SÃO TAIS QUE

$$\Delta l = \pm 1, \Delta m = -1, 0, 1$$

OU SEJA,

$$\langle n' l' m' | \vec{r} \cdot \hat{e} | n l m \rangle \neq 0$$

$$p/ \Delta l = l - l' = \pm 1$$

$$\Delta m = m - m' = -1, 0, 1$$

### REGRAS DE SELEÇÃO (OUTRA DERIVAÇÃO)

CONSIDERE AS TRANSIÇÕES DO TIPO DÍPOLO ELÉTRICO

$$\langle n' l' m' | \vec{r} | n l m \rangle \neq 0$$

• LEMBRE-SE QUE 
$$\begin{cases} L_z |n l m\rangle = m \hbar |n l m\rangle \\ [L_z, z] = [x p_y - y p_x, z] = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \langle f | [L_z, z] | i \rangle = 0 = (m' - m) \hbar \langle n' l' m' | z | n l m \rangle$$

$$\Rightarrow \langle f | z | i \rangle \neq 0 \quad \text{SOMENTE QUANDO}$$

$$\begin{aligned} m &= m' \\ \Rightarrow \Delta m &= 0 \end{aligned}$$

• AGORA, TRABALHAMOS AS COMPONENTES  $x, y$  (24)

$$\text{DEFINIÇÃO} = L_{\pm} \equiv x \pm iy$$

$$\begin{aligned} [L_z, L_{\pm}] &= [x p_y - y p_x, x \pm iy] = -y [p_x, x] \pm i x [p_y, y] \\ &= +i\hbar y \mp i x (i\hbar) = \pm\hbar (x \pm iy) = \pm\hbar L_{\pm} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle F | [L_z, L_{\pm}] \mp \hbar L_{\pm} | I \rangle = 0$$

$$= \hbar (m' - (m \pm 1)) \langle m' | L_{\pm} | m \rangle = 0$$

$\Rightarrow$  AS TRANSIÇÕES PERMITIDAS SÃO TAIS QUE

$$\Delta m = m' - m = \pm 1$$

• QUAL A RESTRIÇÃO  $p / l \in l'$ ?

ESTRATÉGIA: USAR  $L^2$ . Lembre que  $L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$

$$\begin{aligned} [L^2, z] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, z] = [L_x^2 + L_y^2, z] = L_x [L_x, z] + [L_x, z] L_x + (x - iy) \\ &= L_x [y p_z - z p_y, z] + [y p_z - z p_y, z] L_x + L_y [z p_x - x p_z, z] + [z p_x - x p_z, z] L_y \\ &= L_x (-i\hbar y) - i\hbar y L_x + i\hbar (L_y x + x L_y) \\ &= i\hbar (\{x, L_y\} - \{y, L_x\}) \end{aligned}$$

NÃO É NULO E NEM APARECE  $L^2$  NEM  $z$  DO LADO DIREITO

O QUE FAZER?

R: COMUTAR MAIS UMA VEZ

MAS É CONVENIENTE SIMPLIFICAR

$$\begin{aligned} \{x, L_y\} &= x L_y + L_y x = x L_y + x L_y + [L_y, x] = 2x L_y - i\hbar z \\ \{y, L_x\} &= y L_x + L_x y = 2y L_x + [L_x, y] = 2y L_x + i\hbar z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [L^2, z] = 2i\hbar (x L_y - L_x y)$$

AGORA DEVEMOS ENCARAR A TERCIEIRA

(25)

ÁLGEBRA DE CÁLCULO COMUTADOR  $[L^2, [L^2, z]]$

$$\begin{aligned} \bullet [L_x^2, x L_y] &= L_x^2 x L_y - x L_y L_x^2 = x [L_x^2, L_y] \\ &= x (L_x [L_x, L_y] + [L_x, L_y] L_x) = x (L_x (i\hbar L_z) + (i\hbar L_z) L_x) \\ &= i\hbar x \{L_x, L_z\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet [L_x^2, L_x y] &= L_x [L_x^2, y] = L_x^2 [L_x, y] + L_x [L_x, y] L_x \\ &= L_x^2 (i\hbar z) + \underbrace{L_x (i\hbar z) L_x}_{i\hbar (z L_x + [L_x, z])} \\ &= i\hbar (L_x^2 z + z L_x^2) - (i\hbar)^2 y L_x = i\hbar \{z, L_x^2\} - (i\hbar)^2 y L_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet [L_y^2, x L_y] &= [L_y^2, x] L_y = L_y [L_y, x] L_y + [L_y, x] L_y^2 = L_y (-i\hbar z) L_y - i\hbar z L_y^2 \\ &= -i\hbar (L_y^2 z + z L_y^2) + (i\hbar)^2 L_y x \end{aligned}$$

$$\bullet [L_y^2, L_x y] = [L_y^2, L_x] y = (L_y [L_y, L_x] + [L_y, L_x] L_y) y = -i\hbar \{L_y, L_z\} y$$

$$\begin{aligned} \bullet [L_z^2, x L_y] &= L_z [L_z, x L_y] + [L_z, x L_y] L_z = L_z [L_z, x] L_y + L_z x [L_z, L_y] + [L_z, x] L_y L_z + x [L_z, L_y] L_z \\ &= L_z (i\hbar y) L_y + L_z x (-i\hbar L_x) + (i\hbar y) L_y L_z + x (-i\hbar L_x) L_z \\ &= i\hbar (L_z y L_y + y L_y L_z - (L_z x L_x + x L_x L_z)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet [L_z^2, L_x y] &= L_z (L_x [L_z, y] + [L_z, L_x] y) + (L_x [L_z, y] + [L_z, L_x] y) L_z \\ &= L_z L_x (-i\hbar x) + L_z (i\hbar L_y) y + L_x (-i\hbar x) L_z + (i\hbar L_y) y L_z \\ &= i\hbar (L_z y L_y + y L_y L_z - (L_z x L_x + x L_x L_z)) \end{aligned}$$

note que  $[L_z^2, x L_y - L_x y] = 0$

Logo  $[L^2, x L_y - L_x y] = i\hbar x \{L_x, L_z\} + i\hbar \{L_y, L_z\} y - i\hbar \{z, L_x^2 + L_y^2\} + (i\hbar)^2 (y L_x + L_y x)$



26

$$= 2L_y L_z y = i\hbar L_x y$$

$$= 2L_y(yL_z + [L_z, y]) - i\hbar L_x y$$

$$= 2yL_yL_z + 2L_y(-i\hbar x) - i\hbar L_x y$$

$$= 2yL_yL_z - i\hbar(2L_yx + L_xy)$$

$$\begin{aligned}
 &= 2x L_x L_z + 2y L_y L_z - i\hbar (L_x y + L_y x + [L_y, x]) \\
 &= 2 \left[ x (y p_z - z p_y) + y (z p_x - x p_z) \right] L_z - i\hbar (L_x y + L_y x) + (i\hbar)^2 z \\
 &= 2z (y p_x - x p_y) L_z - i\hbar (L_x y + L_y x) + (i\hbar)^2 z \\
 &= -2z L_z^2 - i\hbar (L_x y + L_y x) + (i\hbar)^2 z \\
 &= -\{z, L_z^2\} - i\hbar (L_x y + L_y x) + (i\hbar)^2 z
 \end{aligned}$$

## COLETANDO OS TERMOS

$$= i\hbar \left( -\{z, L^2\} + \underbrace{[y, L_x]}_{= -i\hbar z} - L_x y \right) + (i\hbar)^2 z$$

$$= -i\hbar \{x_1, L^2\}$$

FINALMENTE

$$\Rightarrow [L_z, [L_z, z]] = 2i\hbar(-i\hbar\{z, L_z^2\}) = 2\hbar^2\{z, L_z^2\}$$

Logo,  $\langle F | [L^2, [L^2, z]] - 2\hbar^2 \{z | L^2\} | I \rangle = 0$

(27)

$$L^4 z - 2L^2 z L^2 + z L^4 - 2\hbar^2 z L^2 - 2\hbar^2 L^2 z$$

$$\Rightarrow \hbar^4 \left[ (l'(l'+1))^2 - 2(l'(l'+1))(l(l+1)) + (l(l+1))^2 - 2l'(l'+1) - 2l(l+1) \right] \langle m'l'm' | z | m l m \rangle = 0$$

$$= \hbar^4 (l'-l-1)(l'-l+1)(l'+l)(l'+l+2) \langle m'l'm' | z | m l m \rangle \Rightarrow$$

SENDO  $\Delta l = l' - l$ , ENTÃO AS TRANSIÇÕES PERMITIDAS SÃO TAIS QUE  $\Delta l = \pm 1$

POR SIMETRIA, O MESMO RESULTADO SE APLICA P/

$$\text{AS COMPONENTES } x \text{ E } y = [L^2, [L^2, x_y]] = 2\hbar^2 \{L^2, x_y\}$$

### QUADRO POLO ELÉTRICO

NESTE CASO, OS ELEMENTOS DE MATRIZES SÃO

$$\langle F | x_y, z, yz, x^2, y^2, z^2 | I \rangle$$

- $[L_z, z^2] = 0 \Rightarrow \Delta m = 0$
- $[L_z, \pi_{\pm} z] = \pm \hbar \pi_{\pm} z \Rightarrow \Delta m = \pm 1$
- $[L_z, \pi_{\pm}^2] = \pm 2\hbar \pi_{\pm}^2 \Rightarrow \Delta m = \pm 2$

P/ O NR QUÂNTICO  $l$ , ENCONTRA-SE  $\Delta l = 0, \pm 2$

P/ OBTER ESSE RESULTADO, PRECISA-SE CALCULAR

$$[L^2, [L^2, z^2]]$$

CONSERVAÇÃO DO MOMENTO ANGULAR: NÉSSAS TRANSIÇÕES,  $\Delta l \neq 0$ .

OU SEJA, OS ESTADOS INICIAL E FINAL DA MATÉRIA TEM MOMENTOS ANGULARES DISTINTOS. ESSA DIFERENÇA É DEVIDA À RADIAÇÃO ABSORVIDA OU EMITIDA.

# REGRAS DE SOMA (SUM RULES)

(28)

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \Rightarrow [H_0, x] = \frac{1}{2m} [p^2, x] = -\frac{i\hbar}{m} p_x$$

$$\Rightarrow [x, [H_0, x]] = -\frac{i\hbar}{m} [x, p_x] = \frac{\hbar^2}{m}$$

$$\Rightarrow \langle I | [x, [H_0, x]] | I \rangle = \frac{\hbar^2}{m} = \langle I | x H_0 x - x x H_0 - H_0 x x + x H_0 x | I \rangle$$

$$= 2 \left( \langle I | x H_0 x | I \rangle - E_I \langle I | x x | I \rangle \right)$$

$\uparrow \sum_F |F\rangle \langle F|$ 
 $\uparrow \sum_F |F\rangle \langle F|$

$$= 2 \sum_F (E_F - E_I) |\langle F | x | I \rangle|^2 = 2\hbar \sum_F \omega_{FI} |\langle F | x | I \rangle|^2$$

VIDE PG (20)

$$\Rightarrow \sum_F \sigma(\omega_{FI}) = \sum_F \frac{4\pi^2 \alpha}{m^2 \omega_{FI}} |\langle F | e^{\frac{i\omega_{FI} \hat{n} \cdot \vec{r}}{c}} \vec{p} \cdot \hat{e} | I \rangle|^2$$

$\approx 1$  (DIPOLAR ELÉTRICO)

$$\approx \sum_F 4\pi^2 \alpha \omega_{FI} |\langle F | \vec{n} \cdot \hat{e} | I \rangle|^2 \quad (\text{VIDE PG (21)})$$

$\approx x$  (PARA  $\hat{e} = \hat{x}$ )

$$= 4\pi^2 \alpha \sum_F \omega_{FI} |\langle F | x | I \rangle|^2 = 4\pi^2 \alpha \times \frac{\hbar}{2m}$$

$$\Rightarrow \sum_F \sigma(\omega_{FI}) \equiv \text{SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL} = \frac{2\pi^2 \hbar \alpha}{m}$$

CURVATURA: RAIO CLÁSSICO DO  $e^-$   $r_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} = \frac{\alpha \hbar}{mc}$

$$\Rightarrow \sum_F \sigma(\omega_{FI}) = 2\pi^2 r_0 c$$