

Mecânica Quântica II

(L. A. Ferreira)

- 1) Métodos de Aproximação
- 2) Partículas idênticas - Segunda Quantização
- 3) Teoria do Espalhamento
- 4) Equações Relativísticas - Eq. de Dirac

Métodos de Aproximação - Teoria da Perturbações

Motivações

- A maior parte dos problemas em MQ não podem ser resolvidos exatamente. Na verdade, as situações físicas "reais" envolvem vários efeitos que não podem ser tratados de maneira exata.
- É necessário um método ~~de aproximação~~ que não ~~se~~ forneça somente uma solução aproximada, como também dê informações sobre a física do problema.

Existem vários métodos de aproximação. Mas quase todos eles utilizam-se do fato que ~~o~~ o sistema pode ser aproximado a um problema com solução exata ~~adicionando~~ Adiciona-se então uma interação que é ~~esta~~ "pequena" em relação ao resto e calcula-se a ^{sua} contribuição perturbativamente.

- Tratamos aqui de problemas de "estados ligados".

Teoria da perturbação independente do tempo

a) O caso não degenerado (Teoria de Rayleigh-Schrödinger)

Considere uma hamiltoniana que pode ser dividida em duas partes

$$H = H_0 + V$$

Onde H_0 é uma Hamiltoniana para cuja solução exata é conhecida, Ou seja conheça-se seus autovalores e autoestados:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

Nós queremos encontrar autovalores aproximados da Hamiltoniana total

$$(H_0 + V) |n\rangle = E_n |n\rangle$$

onde V é conhecido como "perturbação" do sistema.

Ex: Átomo de hidrogênio

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \text{int. Coulombiana } \left(-\frac{e^2}{r}\right)$$

$$V = \text{interação de campos elétrico e magnético externos } (E, B)$$

Costuma-se introduzir um parâmetro λ para se saber o número de vezes que a perturbação V entra no cálculo:

$$(H_0 + \lambda V) |n\rangle = E_n |n\rangle$$

No final fazemos $\lambda \rightarrow 1$. (λ pode variar de 0 a 1, $\lambda=0$ não há perturbação)

Espera-se que exista uma transição suave de $|n^{(0)}\rangle$ para $|n\rangle$ e $E_n^{(0)}$ para E_n conforme λ varia de 0 a 1.

O método é baseado ~~em~~

- numa expansão de E_n e $|n\rangle$ em potências de λ .
- na analiticidade de E_n e $|n\rangle$ no plano λ em torno de $\lambda=0$
- na "esperança" que poucos termos da expansão (1 ou 2) deem um bom resultado
- no fato que os ~~est.~~ autovalores $E_n^{(0)}$ não são degenerados. Isto é, existe somente um estado $|n^{(0)}\rangle$ com energia $E_n^{(0)}$.

O problema de dois estados

Suponha que tenhamos um sistema com dois estados somente, e que a Hamiltoniana é dada por

$$H = H_0 + \lambda V$$

Como os autoestados de H_0 formam um conjunto completo

$$\sum_n |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}| = 1$$

assumimos

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n,n'} |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}| H |n'^{(0)}\rangle \langle n'^{(0)}| \\ &= E_1^{(0)} |1^{(0)}\rangle \langle 1^{(0)}| + E_2^{(0)} |2^{(0)}\rangle \langle 2^{(0)}| + \\ &\quad + \lambda V_{12} |1^{(0)}\rangle \langle 2^{(0)}| + \lambda V_{21} |2^{(0)}\rangle \langle 1^{(0)}| \end{aligned}$$

onde

$$V_{ij} \equiv \langle i^{(0)} | V | j^{(0)} \rangle \quad \text{e onde assumimos } V_{11} = V_{22} = 0$$

Na representação matricial

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)} \end{pmatrix}$$

Como H_0 e H são hermitianos, temos que V também deve ser.

On seja $V_{12}^* = V_{21}$. Vamos considerar o caso em que V_{12} e V_{21} são reais

$$V_{12}^* = V_{12}, \quad V_{21}^* = V_{21}$$

Daí

$$V_{12} = V_{21}$$

Não há perda de generalidade nesta escolha pois podemos aceitar a fase de $|2^{(0)}\rangle$ em relação a $|1^{(0)}\rangle$ de tal modo que isto ocorra:

$$|2^{(0)}\rangle \rightarrow e^{i\phi} |2^{(0)}\rangle \quad (\phi \text{ constante})$$

$$V_{12} = \langle 1^{(0)} | V | 2^{(0)} \rangle \rightarrow e^{i\phi} V_{12}$$

Escolhemos ϕ de tal modo que V_{12} seja real. Pela hermiticidade temos $V_{12}^* = V_{21}$, e daí V_{21} também é real.

A matriz H é 2×2 e portanto pode ser escrita como uma combinação linear de $\mathbb{1}$ e σ_i .

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$$

Como V_{12} e V_{21} são reais σ_2 não entra na expansão:

$$H = a_0 \mathbb{1} + a_i \sigma_i = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 \\ a_1 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} \quad (a_2 = 0)$$

Calculamos os autovalores desta matriz ($M\psi = \lambda\psi \Rightarrow (M - \lambda)\psi = 0 \Rightarrow \det(M - \lambda) = 0$)

$$\det(H - \lambda \mathbb{1}) = 0 \Rightarrow (a_0 + a_3 - \lambda)(a_0 - a_3 - \lambda) - a_1^2 = 0$$

$$\lambda^2 - 2a_0\lambda + a_0^2 - a_1^2 - a_3^2 = 0 \quad \lambda = \frac{2a_0 \pm \sqrt{4a_0^2 - 4(a_1^2 - a_3^2)}}{2}$$

$$\boxed{\lambda = a_0 \pm \sqrt{a_1^2 + a_3^2}}$$

Para ter λ em termos dos autovalores de H_0 e V_{12} fazemos

$$a_0 + a_3 = E_1^{(0)} \quad \lambda V_{12} = a_1$$

$$a_0 - a_3 = E_2^{(0)}$$

$$a_0 = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2}$$

$$a_3 = \frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{2}$$

Dar os autovalores E_1 e E_2 de H se

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix} = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}{4} + \lambda^2 V_{12}^2}$$

Se λV_{12} é pequeno em relação à diferença de energia entre os estados não perturbados

$$\lambda |V_{12}| \leq |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|$$

Usamos a expansão de Taylor $\left(\sqrt{1+\epsilon} = \frac{1}{2}(1+\epsilon)^{-1/2}, \sqrt{1+\epsilon}'' = -\frac{1}{4}(1+\epsilon)^{-3/2} \right)$

$$\sqrt{1+\epsilon} = 1 + \frac{1}{2}\epsilon - \frac{\epsilon^2}{8} + \frac{\epsilon^3}{16} - \frac{3 \cdot 5}{4! \cdot 16} \epsilon^4 \dots = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} (2n-3)!!}{n! 2^n} \epsilon^n$$

E dar em primeira ordem

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix} = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \frac{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{4\lambda^2 V_{12}^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2} + \dots \right\}$$

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

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

Fazendo o teste da razão na série acima obtemos

$$\frac{(2n-1)!! \epsilon^{n+1}}{(n+1)! 2^{n+1}} \frac{n! 2^n}{(2n-3)!! \epsilon^n} = \frac{(2n-1) \epsilon}{2n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \epsilon$$

Portanto para que a série converja precisamos que

$$\frac{4\lambda^2 |V_{12}|^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2} < 1 \Rightarrow \lambda |V_{12}| < \frac{|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|}{2}$$

Note que nem sempre podemos usar a expansão perturbativa para um potencial arbitrariamente pequeno. Como exemplo considere uma partícula em um poço quadrado (veja pag 6a).

Por menor que seja a profundidade V_0 do poço sempre existirá um estado ligado. Para V_0 muito pequeno a energia deste estado é:

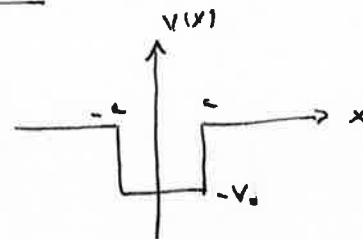
$$E \sim -1\lambda V_0^2$$

Podemos considerar esta energia como sendo a contribuição de segunda ordem do ~~pot~~ poço quadrado, considerado como perturbação, a energia da partícula livre.

No entanto ~~isto~~ como a contribuição é quadrática em V concluiríamos que para a barreira de potencial  obteríamos um estado ligado através da expansão perturbativa. Mas isto é absurdo.

Nota sobre o poço quadrado

Considere um potencial da forma



Os autovalores têm paridade definida. No caso das funções de onda para a energia E encontrada resolvendo-se (Gasiorowicz pag 80):

$$K = \eta \tanh \eta a$$

onde $-K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ $\eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)$ p/ $E < 0$

denotando $\eta = K a$ e $\xi = \eta a$ temos

$$\begin{cases} \eta^2 + \xi^2 = \frac{2m a^2 V_0}{\hbar^2} & (A) \\ \eta = \xi \tanh \xi & (B) \end{cases}$$

Conforme $V_0 \rightarrow 0$ temos $\frac{dA}{dV_0}$ η e $\xi \rightarrow 0$, pois são reais.

Daí

$$\xi \tanh \xi \rightarrow \xi^2 \quad \text{e} \quad \eta \rightarrow 0$$

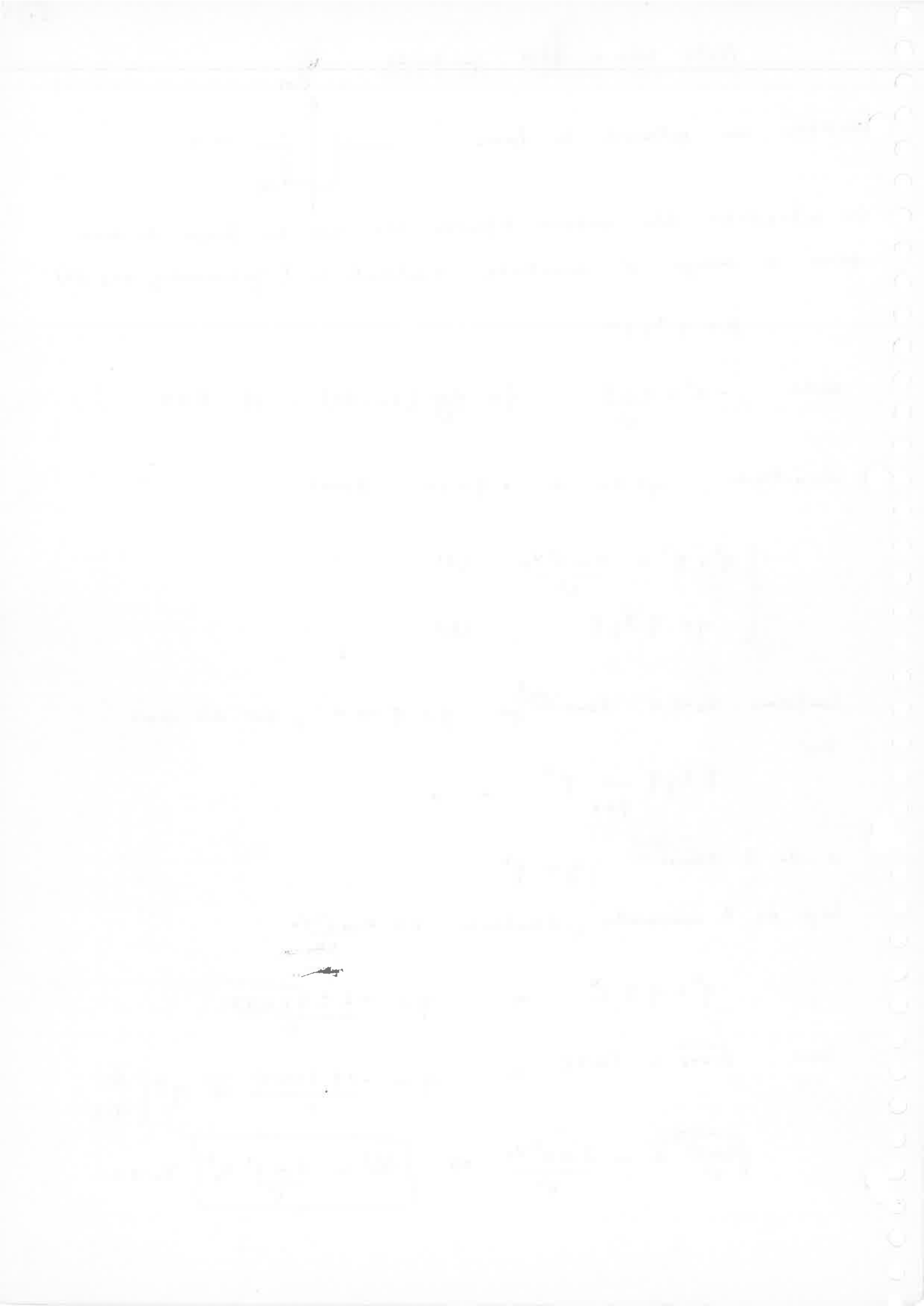
e de B temos $\eta \sim \xi^2$

Logo de A movimenta, denotando $\epsilon = \frac{2m a^2 V_0}{\hbar^2}$

$$\eta^2 + \eta \cong \epsilon^2 \quad \Rightarrow \quad \eta \sim \frac{-1 \pm \sqrt{1+4\epsilon}}{2}$$

Como $\sqrt{1+4\epsilon} \sim 1+2\epsilon$ $\Rightarrow$ $\eta \sim \frac{-1 \pm (1+2\epsilon)}{2} \Rightarrow \eta \cong \begin{cases} \epsilon \\ -1-\epsilon \end{cases}$

$$\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} a \sim \frac{2m a^2 V_0}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{|E| \sim \frac{2m a^2 V_0^2}{\hbar^2}} \quad V_0 \rightarrow 0$$



Desenvolvimento da expansão perturbativa

Suponha que conheçamos os auto estados e autovalores exatos do problema

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

O conjunto $\{|n^{(0)}\rangle\}$ é completo e daí $1 = \sum_n |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|$

Nós assumimos que não há degenerência e faremos resolver

$$(H_0 + \lambda V) |n\rangle = E_n |n\rangle$$

Denotando

$$\Delta_n = E_n - E_n^{(0)}$$

temos

$$(E_n^{(0)} - H_0) |n\rangle = (\lambda V - \Delta_n) |n\rangle$$

Nota que

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

e daí

$(\lambda V - \Delta_n) |n\rangle$ não tem componente na direção de $|n^{(0)}\rangle$.

Portanto podemos atuar em $(\lambda V - \Delta_n) |n\rangle$ com o operador

inverso $\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}$.

Definimos o operador de projeção complementar

$$\phi_n \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|$$

Podemos também atuar em ϕ_n com $\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}$ e daí

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n = \sum_{k \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|$$

Como $(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$ não tem componente na direção de $|n^{(0)}\rangle$

$$(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \phi_n (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

e daí

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

Podemos pensar que

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

No entanto conforme $\lambda \rightarrow 0$ temos $|n\rangle \rightarrow |n^{(0)}\rangle$ e $\Delta_n \rightarrow 0$.

Portanto teríamos $|n\rangle \rightarrow 0$.

A solução correta é obtida adicionando-se um termo proporcional a $|n^{(0)}\rangle$, ou seja

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

Para que $|n\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |n^{(0)}\rangle$ precisamos

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} c_n(\lambda) = 1$$

~~Como $\langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle = 1$~~ Note que se assumirmos ($k \neq n$)

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} |k^{(0)}\rangle = \sum_l c_l |l^{(0)}\rangle$$

obtemos

$$(E_n^{(0)} - H_0) \frac{1}{(E_n^{(0)} - H_0)} |k^{(0)}\rangle = |k^{(0)}\rangle = \sum_l c_l (E_n^{(0)} - E_l^{(0)}) |l^{(0)}\rangle$$

Portanto

$$c_l = 0 \quad \text{p/ } l \neq k \quad \text{e} \quad c_k = \frac{1}{E_m^{(1)} - E_k^{(1)}}$$

Dar

$$\frac{1}{E_m^{(1)} - H_0} |k^{(1)}\rangle = \frac{1}{E_m^{(1)} - E_k^{(1)}} |k^{(1)}\rangle$$

Como $\phi_m (\lambda V - \Delta_m) |m\rangle$ não tem componente na direção de $|m^{(1)}\rangle$,
 vemos que $\frac{1}{E_m^{(1)} - H_0} (\lambda V - \Delta_m) |m\rangle$ também não terá. Como $\langle m^{(1)} | m^{(1)} \rangle = 1$
 obtemos então:

$$c_m(\lambda) = \langle m^{(1)} | m \rangle$$

Ao invés de adotar a normalização

$$\langle m | m \rangle = 1$$

nós ~~usamos~~ usaremos

$$\langle m^{(1)} | m \rangle = c_m(\lambda) = 1$$

Isso corresponde a introduzir um fator no ket normalizado $|m\rangle$.

Obtemos então

$$|m\rangle = |m^{(1)}\rangle + \frac{\phi_m}{E_m^{(1)} - H_0} (\lambda V - \Delta_m) |m\rangle \quad (5.1.34)$$

onde denotamos

$$\frac{1}{E_m^{(1)} - H_0} \phi_m \quad \text{por} \quad \frac{\phi_m}{E_m^{(1)} - H_0}$$

Note que como $E_n^{(0)}$ são reais

$$\langle n^{(0)} | \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \langle n^{(0)} | \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

e daí

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n &= \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \sum_k |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}| = \sum_k \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}| \\ &= \sum_k |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}| \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \end{aligned}$$

e ainda

$$\begin{aligned} \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n &= \phi_n \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}| \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \langle n^{(0)}| \\ &= \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \end{aligned}$$

On segue

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n$$

Do fato que

$$\langle n^{(0)} | \lambda V - \Delta_n | n \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle n^{(0)} | n \rangle = 1$$

obtemos

~~Assim~~

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

(5.1.35)

Expandindo $|m\rangle$ e Δ_m em série de potência de λ temos

$$|m\rangle = |m^{(0)}\rangle + \lambda |m^{(1)}\rangle + \lambda^2 |m^{(2)}\rangle + \dots$$

$$\Delta_m = \lambda \Delta_m^{(1)} + \lambda^2 \Delta_m^{(2)} + \dots$$

~~isto~~ Não esperamos potências negativas em de λ pois $|m\rangle$ não deve ser singular para $\lambda \rightarrow 0$

De (5.1.35) obtemos

$$\lambda \Delta_m^{(1)} + \lambda^2 \Delta_m^{(2)} + \lambda^3 \Delta_m^{(3)} + \dots = \lambda \langle m^{(0)} | V \{ |m^{(0)}\rangle + \lambda |m^{(1)}\rangle + \dots \}$$

e coletando os termos com mesma potência de λ :

$$\Delta_m^{(1)} = \langle m^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle$$

$$\Delta_m^{(2)} = \langle m^{(0)} | V | m^{(1)} \rangle$$

$$\Delta_m^{(3)} = \langle m^{(0)} | V | m^{(2)} \rangle$$

$$\vdots$$

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

Para saber a correção de ordem N no autovalor E_m precisamos conhecer $|m\rangle$ até ordem $(N-1)$.

De (5.1.34) obtemos

$$|m^{(0)}\rangle + \lambda |m^{(1)}\rangle + \dots = |m^{(0)}\rangle + \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} (\lambda V - \lambda \Delta_m^{(1)} - \lambda^2 \Delta_m^{(2)} - \dots) (|m^{(0)}\rangle + \lambda |m^{(1)}\rangle + \dots)$$

(5.1.38)

Em primeira ordem temos

(12)

$$|m^{(1)}\rangle = \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} V |m^{(0)}\rangle \quad (5.1.39)$$

Uma vez que $\phi_m \Delta_m^{(1)} |m^{(0)}\rangle = 0$

Desta forma $\Delta_m^{(2)}$ fica:

$$\Delta_m^{(2)} = \langle m^{(0)} | V \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} V | m^{(0)} \rangle \quad (5.1.40)$$

O termo da segunda ordem em (5.1.38) fica:

$$|m^{(2)}\rangle = \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} \{ V |m^{(1)}\rangle - \Delta_m^{(1)} |m^{(1)}\rangle \} - \underbrace{\frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} \Delta_m^{(2)} |m^{(0)}\rangle}_{=0}$$

ou seja

$$|m^{(2)}\rangle = \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} V \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} V |m^{(0)}\rangle - \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} \langle m^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle \frac{\phi_m}{E_m^{(0)} - H_0} V |m^{(0)}\rangle$$

Denotando

$$V_{mm} = \langle m^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle$$

temos

$$\Delta_m^{(1)} = V_{mm}$$

e

$$\Delta_m^{(2)} = \langle m^{(0)} | V \frac{1}{E_m^{(0)} - H_0} \sum_{l \neq m} | l^{(0)} \rangle \langle l^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle$$

$$\Delta_m^{(2)} = \sum_{l \neq m} \frac{V_{ml} V_{lm}}{E_m^{(0)} - E_l^{(0)}} \Rightarrow$$

$$\Delta_m^{(2)} = \sum_{l \neq m} \frac{|V_{ml}|^2}{E_m^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

Para a função de onda obtemos

$$|m^{(1)}\rangle = \frac{1}{E_m^{(0)} - H_0} \sum_{k \neq m} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle$$

$$|m^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq m} \frac{V_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle$$

$$|m^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq m} \sum_{l \neq m} \frac{1}{E_m^{(0)} - H_0} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | V \frac{1}{E_m^{(0)} - H_0} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle -$$

$$- \sum_{k \neq m} \sum_{l \neq m} \frac{1}{E_m^{(0)} - H_0} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | \frac{1}{E_m^{(0)} - H_0} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle$$

$$|m^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq m} \sum_{l \neq m} \frac{V_{kl} V_{lm}}{(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})(E_m^{(0)} - E_l^{(0)})} |k^{(0)}\rangle - \sum_{k \neq m} \frac{V_{mm} V_{km}}{(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})^2} |k^{(0)}\rangle$$

Comentários

- 1) Para obter o shift de energia em primeira ordem é preciso calcular o valor esperado de V com respeito aos estados não perturbados
- 2) Note que se temos dois estados n e m ~~tal~~ (por exemplo $E_n^{(0)} > E_m^{(0)}$) tal que $V_{nm} \neq 0$ então da expressão de $\Delta_n^{(1)}$ vemos que eles tendem a se regular pois Δ_n terá uma contribuição

$$\frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} > 0$$

e Δ_m terá uma contribuição igual e de sinal oposto

Isto é um caso particular do "no-level crossing theorem" que diz que dois estados conectados pela perturbação ($V_{ij} \neq 0$) não cruzam ~~se~~ quando a intensidade da perturbação é variada.

- 3) A contribuição de segunda ordem para Δ_n é sempre negativa para n sendo o estado fundamental. Ou seja a mistura do estado fundamental ($V_{0i} \neq 0$) com os outros estados tende a diminuir a energia do estado fundamental.

- 4) Se $\left| \frac{V_{ij}}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} \right|$ é pequeno espera-se que as séries perturbativas converjam. No caso em que H_0 é o operador de energia cinética a perturbação de Rayleigh-Schrodinger é a série de Born. Para uma energia $E_0 < 0$ a série de Born converge se e somente se nem $H_0 + V$ nem $H_0 - V$ tem estados ligados para energia $E \leq E_0$.

Normalizaçao da funcao de onda

Nós normalizamos o estado perturbado $|u\rangle$ como

$$\langle u^{(0)} | u \rangle = 1$$

e não como $\langle u | u \rangle = 1$.

Definimos então o estado perturbado normalizado como

$$|u\rangle_N = z_N^{1/2} |u\rangle$$

ou seja z é determinado por

$${}_N \langle u | u \rangle_N = 1$$

Dai

$$\langle u^{(0)} | u \rangle_N = z_N^{1/2}$$

Significado de z_N : é a probabilidade de encontrar o estado perturbado no estado não perturbado correspondente

Temos

$${}_N \langle u | u \rangle_N = z_N \langle u | u \rangle = 1$$

e

$$\begin{aligned} z_N^{-1} &= \langle u | u \rangle = (\langle u^{(0)} | + \lambda \langle u^{(1)} | + \dots) (|u^{(0)}\rangle + \lambda |u^{(1)}\rangle + \dots) \\ &= 1 + \lambda^2 \langle u^{(1)} | u^{(1)} \rangle + O(\lambda^3) \end{aligned}$$

Uma vez que $|u^{(1)}\rangle$ e $|u^{(2)}\rangle$ não têm componente na direção de $|u^{(0)}\rangle$.

Daí

$$\begin{aligned} Z_n^{(1)} &= 1 + \lambda^2 \sum_{k, k' \neq n} \langle k^{(10)} | \frac{V_{nk'}}{(E_n^{(10)} - E_{k'}^{(10)})} \frac{V_{nk}}{(E_n^{(10)} - E_k^{(10)})} | k^{(10)} \rangle + \dots \\ &= 1 + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n^{(10)} - E_k^{(10)})^2} + O(\lambda^3) \end{aligned}$$

~~$(1+\epsilon)^{-1} = 1 + \epsilon + O(\epsilon^2)$~~ $(1+\epsilon)^{-1} = 1 - \epsilon + O(\epsilon^2)$

On seja até segunda ordem temos

$$Z_n = 1 - \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n^{(10)} - E_k^{(10)})^2} + O(\lambda^3)$$

Note que $Z_n \leq 1$

Esta é a probabilidade do estado ~~perturbado~~ $|n\rangle$ estar no estado não perturbado $|n^{(10)}\rangle$. O 2º termo ~~mede~~ mede a probabilidade dele estar em outros estados.

Como

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(10)} + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n^{(10)} - E_k^{(10)})} + O(\lambda^3)$$

Vemos que (considerando V_{nk} como quantidades fixas, ou seja tomamos a dependência explícita em $E_n^{(10)}$ somente)

$$\frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(10)}} = 1 + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n^{(10)} - E_k^{(10)})^2} + O(\lambda^3)$$

On seja

$$Z_n = \frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(10)}} + O(\lambda^3)$$

Este resultado é na verdade mais geral e vale para outros ordens da perturbação.

Um exemplo trivial

Considere um oscilador harmônico unidimensional

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

com uma perturbação

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

que corresponde a mudar a constante da mola $k = m \omega^2$ por $(1 + \epsilon)k$. É claro que a solução exata é obtida substituindo ω por $\sqrt{1 + \epsilon} \omega$.

Vamos no entanto ver o que ocorre ao estado fundamental.

Temos

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

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

O problema simplifica bastante porque somente dois elementos da matriz V_{k0} contribuem.

$$V_{00} = \frac{\epsilon m \omega^2}{2} \langle 0^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle = \frac{\epsilon \hbar \omega}{4}$$

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

Como a perturbação é par sob $x \rightarrow -x$ somente os elementos

$V_{2n,0}$ são não nulos. Fica como exercício mostrar que $V_{2n,0} = 0$ p/m, 2

Seja então que

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

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

$$\Delta_0 = \hbar\omega \left[\frac{\varepsilon}{4} - \frac{\varepsilon^2}{16} + O(\varepsilon^3) \right]$$

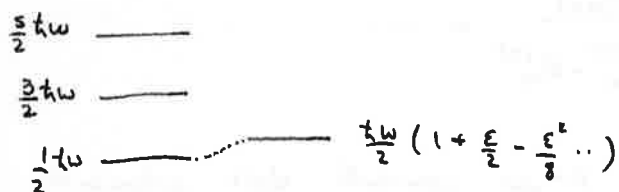
O estado $|0\rangle$ mas tem componente na direção de $|2^{(0)}\rangle$
 Por que H (total) é invariante por $x \rightarrow -x$.

Comparando com o resultado exato

$$\frac{\hbar\omega}{2} \rightarrow \frac{\hbar\omega}{2} \sqrt{1+\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{8} \dots \right]$$

ou seja, existe uma total concordância

Nota que a energia do estado fundamental aumenta



Como observamos anteriormente a mistura do estado fundamental com outros estados $V_{n0} \neq 0$ diminui, em segunda ordem a energia do estado fundamental.

Vejam a mudança da função de onda. Temos

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

fazendo

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

obtemos

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

$$(1+\varepsilon)^{1/8} \sim 1 + \frac{1}{8} \varepsilon + O(\varepsilon^2)$$

$$e^{\lambda(1+\varepsilon)^{1/2}} \sim e^\lambda + \frac{\lambda}{2} e^\lambda \varepsilon + O(\varepsilon^2)$$

e daí

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

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

onde

$$\langle X | 2^{(0)} \rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} \left[-2 + 4 \frac{x^2}{x_0^2} \right]$$

Como

$$\frac{V_{20}}{E_0^{(1)} - E_2^{(0)}} = \frac{\varepsilon \hbar \omega}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\hbar \omega} \left(\frac{1}{\frac{1}{2} - (2 + \frac{1}{2})} \right) = - \frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}}$$

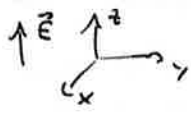
Vemos que o resultado concorda com o da teoria de perturbação. (como vimos anteriormente)

O Efeito Stark

Campo elétrico aplicado em um átomo de um elétron (átomo de hidrogênio) ou átomo com um elétron de valência fora da casca esférica formada pelos demais elétrons.

A Hamiltoniana ψ

$$H = H_0 + V \quad \text{onde} \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0(r) \quad (V_0 - \text{Coulomb potencial / ou outro potencial relevante ao átomo})$$
$$V = -e|E|z \quad (e < 0 \text{ elétron})$$

ou seja o campo elétrico está na direção z 

Importante: O spin do elétron não tem importância neste problema. Portanto se ignorarmos os graus de liberdade associados ao spin, os níveis de energia não são degenerados.

Assumimos que as autofunções de H_0 são conhecidas

Denotando
$$z_{kl} = \langle k^{(0)} | z | l^{(0)} \rangle$$

temos

$$\Delta_k = -e|E|z_{kk} + e^2|E|^2 \sum_{j \neq k} \frac{|z_{kj}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} + \dots$$

A Hamiltoniana ^{não perturbada} ψ invariante sob inversão espacial e como estamos assumindo que os estados não são degenerados obtemos pelo Teorema da Sec 4.2 que $|k^{(0)}\rangle$ deve ter paridade definida. Segue então que

$$\langle k^{(0)} | z | k^{(0)} \rangle = z_{kk} = 0$$

Portanto não existe contribuições em primeira ordem à energia.
Isto está relacionado com o fato que o átomo não tem um dipolo elétrico, uma vez que os estados tem paridade definida.

~~Portanto~~ Nota que o Teorema sec. 4.2 deixa de ser válido quando há degenerescência. ~~Existe~~ Existe um efeito Stark linear ~~no~~ caso de haver degenerescência.

Denotamos por

- n - número quântico principal
- l - momento angular L
- m - Componente z de L , L_z

Usando as regras de seleção (3.10.33) (Teorema de Wigner-Eckart)

$$\langle n' l' m' | z | n l m \rangle = 0 \quad \text{exceto} \quad \begin{matrix} l' = l \pm 1 \\ m' = m \end{matrix}$$

Uma maneira alternativa de ver isto é: O campo elétrico aponta na direção z e portanto quebra a simetria esférica de H . No entanto H ainda é invariante por rotações em torno do eixo z . $[V, L_z] = 0$

Portanto m é um bom número quântico na presença de V .

Se

$$L_z |n l m\rangle = m |n l m\rangle$$

$$\text{então} \quad L_z V |n l m\rangle = V L_z |n l m\rangle = m V |n l m\rangle$$

$$\text{Daí} \quad \langle l' m' | V | n l m \rangle = 0 \quad \text{se} \quad l' \neq m$$

Logo a série perturbativa vai envolver uma superposição de autoestados com mesmos autovalores de L_z .

* Isto é verdade em todos ordens de perturbação.

(2)

A polarizabilidade α de um átomo é definida em termos da variação da energia do estado

$$\Delta = -\frac{1}{2} \alpha |E|^2 \quad (\text{cada estado tem um } \alpha)$$

Consideremos o estado fundamental do hidrogênio, que é não degenerado. Denotamos

$$|0^{(0)}\rangle = |1, 0, 0\rangle$$

Dai

$$\alpha = -2e^2 \sum_{k \neq 0} \frac{|\langle k^{(0)} | z | 1, 0, 0 \rangle|^2}{|E_0^{(0)} - E_k^{(0)}|}$$

A soma inclui todos os estados ligados $|n, l, m\rangle$ e também o espectro contínuo de energia positiva.

Vamos calcular a soma da maneira mais simples:

Suponha que o denominador seja constante

$$\begin{aligned} \sum_{k \neq 0} |\langle k^{(0)} | z | 1, 0, 0 \rangle|^2 &= \sum_{\text{todo } k} \langle 1, 0, 0 | z | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | z | 1, 0, 0 \rangle - \\ &\quad - |\langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle|^2 \\ &= \langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle \end{aligned}$$

↗ termo devido à paridade definida de $|1, 0, 0\rangle$

Devido à simetria esférica do estado fundamental,

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

e usando a expressão p/ a função de onda

$$\langle z^2 \rangle = a_0^2$$

a_0 - raio de Bohr.

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \sim 0,529 \text{ \AA}$$

teremos Com relação ao denominador temos

$$-E_0^{(0)} + E_n^{(0)} \gg -E_0^{(0)} + E_1^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} \left[1 - \frac{1}{4} \right]$$

uma vez que $E_{nn}^{(0)} = -\frac{m e^4}{2 \hbar^2 n^2} = -\frac{e^2}{2 a_0 n^2} \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ e.v}$

Portanto encontramos um limite superior para α

$$\alpha < + 2 e^2 a_0^2 \frac{4}{3} \frac{2 a_0}{e^2} \Rightarrow \alpha < \frac{16}{3} a_0^3 \sim 5.3 a_0^3$$

Usando o resultado exato pode ser obtido usando-se a equação de Schrödinger em coordenadas parabólicas, Dalgaard e Lewis em 55 apresentaram um método para calcular a soma exatamente. O resultado é: (veja verso)

$$\alpha = \frac{9 a_0^3}{2} = 4.5 a_0^3$$

e daí

$$\Delta_0 = -\frac{9}{4} a_0^3 |E|^2$$

On seja a energia do estado fundamental diminui (uma vez que a contribuição só é de 2ª ordem). Pode-se ver isso como:

O campo E cria um dipolo elétrico p no átomo que ganha então uma energia ~~negativa~~ negativa $-pE$

(2)

Cálculo exato da soma (Menzbach pag 424)

Suponha que exista um operador F tal que

$$Z|0^{(0)}\rangle = (F H_0 - H_0 F)|0^{(0)}\rangle = [F, H_0]|0^{(0)}\rangle$$

Note que nos pedimos $Z = [F, H_0]$!!

Dar

$$\begin{aligned}\langle k^{(0)}|Z|0^{(0)}\rangle &= \langle k^{(0)}|FH_0 - H_0F|0^{(0)}\rangle = \\ &= (E_0^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)}|F|0^{(0)}\rangle\end{aligned}$$

Então

$$\begin{aligned}\sum_{k \neq 0} \frac{|\langle k^{(0)}|Z|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} &= \cancel{\sum_{k \neq 0} \langle k^{(0)}|Z|0^{(0)}\rangle \langle 0^{(0)}|Z|k^{(0)}\rangle} \\ &= \sum_{k \neq 0} \langle 0^{(0)}|Z|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|F|0^{(0)}\rangle \\ &= \sum_{k \neq 0} \langle 0^{(0)}|ZF|0^{(0)}\rangle - \underbrace{\langle 0^{(0)}|Z|0^{(0)}\rangle \langle 0^{(0)}|F|0^{(0)}\rangle}_{\substack{0 \\ \text{para periodicidade}}}\end{aligned}$$

onde usamos

$$1 = \sum_{\text{todo } k} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|$$

O operador tem que ser encontrado de alguma maneira. Esta é a dificuldade do método. Obtem-se

$$F = -\frac{m a_0}{\hbar^2} \left(\frac{r}{2} + a_0 \right) Z$$

Dar

$$\sum_{k \neq 0} \frac{Z_{0k}^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = -\frac{m a_0}{\hbar^2} \langle 0^{(0)}| \left(\frac{r}{2} + a_0 \right) Z^2 |0^{(0)}\rangle$$

Devido à simetria esférica do estado fundamental

$$\langle f(r) z^2 \rangle_0 = \langle f(r) x^2 \rangle_0 = \langle f(r) y^2 \rangle_0 = \langle f(r) \frac{r^2}{3} \rangle_0$$

Usando

$$\langle r^m \rangle_0 = \frac{a_0^m}{2^{m+1}} (m+2)!$$

temos

$$\langle \frac{r^2}{2} z^2 \rangle = \langle \frac{r^4}{2} \frac{r^2}{3} \rangle = \frac{1}{6} \langle r^6 \rangle = \frac{a_0^6}{6 \cdot 2^4} 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 = \frac{5}{4} a_0^3$$

$$\langle z^2_0 \rangle = \langle \frac{r^2}{3} \rangle = \frac{1}{3} \frac{a_0^2}{2^3} 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 = a_0^2$$

Então

$$\sum_{k \neq 0} \frac{|Z_{0k}|^2}{E_0 - E_k} = - \frac{m a_0}{\hbar^2} \left\{ \frac{5}{4} a_0^3 + a_0^3 \right\} = - \frac{9}{4} \frac{m a_0^4}{\hbar^2}$$

Donc, α é $-2e^2$ vezes isto e então $\left(a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \right)$

$$\alpha = - \frac{9}{2} a_0^3$$

Perturbação independente do tempo: Caso degenerado

Nós assumimos no caso não degenerado que $|n\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |n^{(0)}\rangle$

No caso degenerado existem vários estados não perturbados com a mesma energia e quando $\lambda \rightarrow 0$ não é óbvio para qual combinação deles $|n\rangle$ tendem.

Precisamos de outras observáveis ~~para~~ que comutam com a hamiltoniana para completar o quadro. Os estados $|k^{(0)}\rangle$ ser tão que k denote um conjunto de n.º quânticos.

Por outro lado a fórmula do caso ~~de~~ não degenerado

$$\frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

apresentaria problemas se aplicada ao caso degenerado pois se $V_{nk} \neq 0$ e $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ há divergência.

Escolha da "espanta": Nós temos liberdade para escolher a base do subespaço gerado pelos estados degenerados. Podemos escolhê-los de tal modo que V seja diagonal, ou seja $V_{mn} = 0$ para $m \neq n$.

Sugorinha que existe uma degenerescência de ~~para~~ grau g antes da perturbação V ser considerada.

Temos um conjunto $\{|m^{(0)}\rangle\}$ de g estados com energia $E_0^{(0)}$

Em geral V quebra a degenerescência e teremos um conjunto $\{|l\rangle\}$ de g estados não degenerados. Quando $\lambda \rightarrow 0$ temos

$|l\rangle \rightarrow |l^{(0)}\rangle$ e o conjunto $\{|l^{(0)}\rangle\}$ gera o mesmo

subespaço que $\{|m^{(0)}\rangle\}$. No entanto $\{|m^{(0)}\rangle\}$ e $\{|l^{(0)}\rangle\}$ podem ser diferentes.

Dar

$$|l^{(0)}\rangle = \sum_{m \in D} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle$$

B. Analogamente ao caso não degenerado temos

$$(H_0 + \lambda V) |l\rangle = E_l |l\rangle$$

$$\text{e } (E_l^{(0)} - H_0) |l\rangle = (\lambda V - \Delta_l) |l\rangle \quad \text{onde } \Delta_l = E_l - E_l^{(0)}$$

Expandindo $|l\rangle$ e Δ_l

$$|l\rangle = |l^{(0)}\rangle + \lambda |l^{(1)}\rangle + \dots$$

$$\Delta_l = \lambda \Delta_l^{(1)} + \lambda^2 \Delta_l^{(2)} + \dots$$

Em primeira ordem

$$(E_l^{(0)} - H_0) |l^{(1)}\rangle = (V - \Delta_l^{(1)}) |l^{(0)}\rangle \quad (5.2.5)$$

$$= (V - \Delta_l^{(1)}) \left\{ \sum_m \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle \right\}$$

Multiplicando por $\langle m^{(0)} |$

$$\langle m^{(0)} | (E_l^{(0)} - H_0) |l^{(1)}\rangle = \sum_m \langle m^{(0)} | V |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle - \Delta_l^{(1)} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle$$

O lado esquerdo é nulo, e dar

$$\sum_m V_{m'l} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle = \Delta_l^{(1)} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle \quad (5.2.6)$$

Em forma matricial

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \dots \\ V_{21} & V_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)} | l^{(0)} \rangle \\ \langle 2^{(0)} | l^{(0)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta_l^{(1)} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)} | l^{(0)} \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.2.7)$$

Para que haja solução é necessário

$$\det(V - \Delta_l^{(1)}) = 0$$

As raízes da equação secular fornecem os autovalores $\Delta_l^{(1)}$ (y d-lis)
Substituindo em (5.2.3) encontramos $\langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle$ para cada l ,
a menos de normalização.

~~Obtemos~~ Obtemos então $\Delta_l^{(1)}$ e $|l^{(0)}\rangle$ para cada l .

Note que $|l^{(0)}\rangle$ diagonaliza V

~~$\langle \tilde{l}^{(0)} | l^{(0)} \rangle =$~~

$$\langle \tilde{l}^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle = \sum_{m, m'} \underbrace{\langle m^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle}_{V_{m'm}} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle \langle \tilde{l}^{(0)} | m^{(0)} \rangle$$

$$= \Delta_l^{(1)} \sum_{m'} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle \langle \tilde{l}^{(0)} | m^{(0)} \rangle$$

$$= \Delta_l^{(1)} \langle \tilde{l}^{(0)} | l^{(0)} \rangle$$

por outro lado

$$= \sum_m \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle \langle \tilde{l}^{(0)} | m^{(0)} \rangle \Delta_{\tilde{l}}^{(1)}$$

$$= \Delta_{\tilde{l}}^{(1)} \langle \tilde{l}^{(0)} | l^{(0)} \rangle$$

Assumimos que as raízes da eq. secular não são degeneradas,
isto é, a degenerescência do sistema é quebrada totalmente em
1ª ordem. Daí

$$\langle \tilde{l}^{(0)} | l^{(0)} \rangle (\Delta_{\tilde{l}}^{(1)} - \Delta_l^{(1)}) = 0 \Rightarrow \langle \tilde{l}^{(0)} | l^{(0)} \rangle = 0 \quad \text{p/ } l \neq \tilde{l}$$

e consequentemente

$$\langle \tilde{l}^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle = \Delta_l^{(1)} \delta_{l, \tilde{l}}$$

Nota que a expressão de Δ_i'''

$$\Delta_i''' = \langle l^{i0'} | V | l^{i0'} \rangle$$

é bastante parecida com a expressão para Δ_i'' no caso não degenerado. No entanto aqui V nos tem elementos fora da diagonal.

Considere a eq. (5.2.5)

$$(E_D^{i0'} - H_0) | l^{i0'} \rangle = (V - \Delta_i''') | l^{i0'} \rangle$$

Defina o op. de projeção complementar

$$\Phi_D = 1 - \sum_{m \in D} | m^{i0'} \rangle \langle m^{i0'} | = \sum_{k \notin D} | k^{i0'} \rangle \langle k^{i0'} |$$

Novamente $(V - \Delta_i''') | l^{i0'} \rangle$ não tem componente no subespaço degenerado pois ao multiplicando por qualquer $\langle m^{i0'} |$ do qual subesp.

$$\langle m^{i0'} | V - \Delta_i''' | l^{i0'} \rangle = 0$$

Dai

$$\Phi_D (V - \Delta_i''') | l^{i0'} \rangle = (V - \Delta_i''') | l^{i0'} \rangle = \Phi_D V | l^{i0'} \rangle$$

O operador $\frac{1}{E_D^{i0'} - H_0}$ é singular quando junto a Φ_D

Dai

$$| l^{i0'} \rangle = \frac{1}{E_D^{i0'} - H_0} \Phi_D V | l^{i0'} \rangle$$

Usando a definição de Φ_D

$$| l^{i0'} \rangle = \sum_{k \notin D} \frac{V_{kl}}{E_D^{i0'} - E_k^{i0'}} | k^{i0'} \rangle$$

Como no caso de $\bar{n}$ degenerado adotaremos a normalização

$$\langle l^{(0)} | l \rangle = 1$$

Dar de

$$(E_0^{(0)} - H_0) | l \rangle = (\lambda V - \Delta_l) | l \rangle$$

temos

$$\Delta_l = \lambda \langle l^{(0)} | V | l \rangle$$

e usando a expansão

$$\lambda \langle l^{(0)} | V \{ | l^{(0)} \rangle + \lambda | l^{(1)} \rangle + \dots \} = \lambda \Delta_l^{(1)} + \lambda^2 \Delta_l^{(2)} + \dots$$

Em 2ª ordem temos

$$\Delta_l^{(2)} = \langle l^{(0)} | V | l^{(1)} \rangle = \langle l^{(0)} | V \frac{\phi_0}{E_0^{(0)} - H_0} V | l^{(0)} \rangle$$

e daí

$$\Delta_l^{(2)} = \sum_{k \neq 0} \frac{|V_{kl}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Nota que este procedimento funciona desde que não haja degenerência nas raízes da eq. secular, ~~ou seja~~

Para o método funcionar é preciso que a degenerência do sistema seja eliminada totalmente em 1ª ordem de perturbação.

Efeito Stark linear

Resolvendo-se a eq. de Schrodinger para o átomo de H levando-se em conta apenas o potencial Coulombiano obtemos que a energia depende somente do n: quântico principal n

$$E_n^{(0)} = -\frac{e^2}{2a_0 n^2}$$

Portanto com exceção do estado fundamental, todos os demais estados são degenerados. Para um dado n temos

$$0 \leq l < n \quad \text{e} \quad -l \leq m \leq l$$

Consideremos $n=2$.

$$2s \quad \begin{matrix} m=0 \\ l=0 \end{matrix}$$

$$2p \quad \begin{matrix} m=-1 \\ l=1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} m=0 \\ l=1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} m=1 \\ l=1 \end{matrix}$$

$$E_2^{(0)} = -\frac{e^2}{8a_0^2}$$

A perturbação $e\mathbf{r}$

$$V = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}$$

Como vimos, temos que diagonalizar V no subespaço dos estados degenerados

- V possui elementos da matriz não nulos somente entre estados de paridade opostas.
- além do mais os valores de m têm que ser iguais uma v_{ij} que $(L_z, V) = 0$

$2s$
 $\overbrace{2p}^{m=0 \quad m=1 \quad m=2-1}$

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \langle 2s | 2p, m=0 \rangle & 0 & 0 \\ \langle 2p, m=0 | V | 2s \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Fazendo-se o cálculo exato

$$\langle 2s | V | 2p, m=0 \rangle = \langle 2p, m=0 | V | 2s \rangle = 3e a_0 |E|$$

Dar (uma vez que só importa a matriz 2×2 no topo à esquerda)

$$\det \left(3e a_0 |E| \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 3e a_0 |E| \\ 3e a_0 |E| & -\lambda \end{pmatrix}$$

$$= \lambda^2 - (3e a_0 |E|)^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 3e a_0 |E|$$

~~Para se obter os valores próprios para a perturbação~~

Os autoestados são determinados por:

$$3e a_0 |E| \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2s \\ 2p \end{pmatrix} = 3e a_0 |E| \begin{pmatrix} 2p \\ 2s \end{pmatrix}$$

Definindo os estados

Para calcular os autoestados ~~se~~ nota que

$$V |m\rangle = V_{mm'} |m\rangle$$

Introduzindo estados $|j\rangle$ tais que

$$V |j\rangle = \lambda_j |j\rangle$$

que se podem ser escritos como

$$|j\rangle = M_{jm} |m\rangle$$

Dai

$$V|j\rangle = V M_{jm} |m\rangle = M_{jm} V_{mm'} |m'\rangle = M_{jm} V_{mm'} M_{m'j'}^{-1} \frac{j'}{2} |j'\rangle \\ = \lambda_j |j\rangle$$

Denotando $D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{pmatrix}$ temos que M diagonaliza V

$$D = M^{-1} V M$$

No caso de $V = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ temos $M = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, $M^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

pois

$$M V M^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e daí os autoestados são

$$|j\rangle = M |m\rangle \Rightarrow | \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle \pm |2\rangle)$$

Portanto os valores possíveis de Δ''' são

$$\Delta'''_{\pm} = \pm 3ea_0|E| \quad \text{e} \quad \Delta'''_{2p(m=\pm 1)} = 0$$

e os autoestados

$$| \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2s, m=0\rangle \pm |2p, m=0\rangle) \quad \text{e} \quad |2p, m=\pm 1\rangle$$

Ao contrário do caso não degenerado (nível fundamental $|100\rangle$) o shift em energia é linear em $|E|$. A razão disso é que os estados $| \pm \rangle$ têm um momento de dipolo elétrico permanente independente da perturbação. Como $| \pm \rangle$ não tem paridade definida é possível ter $\langle \pm | z | \pm \rangle \neq 0$. Na verdade

$$\langle \pm | z | \pm \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \pm \langle 2p, m=0 | z | 2s, m=0 \rangle \pm \langle 2s, m=0 | z | 2p, m=0 \rangle \right\}$$

No caso n degenerado o estado (1100) n tem momento de dipolo elétrico permanente. No entanto o campo elétrico induz um momento ~~induz~~ que é (em primeira ordem) linear em E . Daí da interação $\vec{p} \cdot \vec{E}$, vemos que o shift em energia é quadrático em $|E|$.

No átomo de H "real" os níveis $2s$ e $2p$ não são degenerados devido à interação spin-órbita.

Questão: É possível aplicar teoria de perturbação ~~para~~ ^{para} estados degenerados neste caso?

Experimentalmente verifica-se que se os elementos de matriz da perturbação são grandes comparados com a ~~separação~~ ^{separação} dos níveis o efeito é linear em $|E|$.

Quando é pequena o efeito é quadrático.

Portanto o formalismo da teoria de perturbação degenerada pode ser aplicada quando a separação dos níveis é muito pequena comparada com a perturbação.

Interação spin-órbita

O efeito em uma imagem ingênua:

No átomo de H o elétron "vê" o núcleo girar em uma "órbita circular". Como o núcleo é carregado, isto cria um campo magnético B que por sua vez interage com o momento magnético do elétron. Isto produz uma variação de energia $\Delta = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

Suponha que $V_c(r)$ seja o potencial central independente da spin ~~para~~ ^{o núcleo} para ~~um~~ ^o elétron de valência de átomos do tipo do hidrogênio ($\text{Na}, \text{K}, \dots$). O campo elétrico é então

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon} \nabla V_c(r)$$

Mas como o elétron está em movimento ele sente um campo magnético dado por (lei de Ampere)

$$\mathbf{B} = -\frac{\nabla \times \mathbf{E}}{c}$$

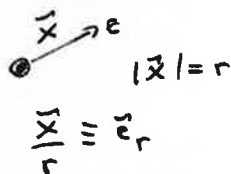
O momento magnético do elétron é

$$\vec{\mu} = \frac{e \vec{S}}{m c}$$

e daí o potencial spin-orbita é

$$V_{LS} = -e \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \vec{\mu} \cdot \left(\frac{\nabla \times \mathbf{E}}{c} \right) = \frac{e \vec{S}}{m c} \left[\frac{\vec{p}}{m c} \times \frac{\vec{x}}{r} \frac{1}{\epsilon c} \frac{dV_c}{dr} \right]$$

uma vez que $\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$



$$\frac{\vec{x}}{r} \equiv \vec{e}_r$$

Daí

$$V_{LS} = \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p})$$

Devido à precessão de Thomas existe um fator $\frac{1}{2}$ nesta expressão

Portanto a Hamiltoniana total é

$$H = H_0 + \lambda V_{LS} \quad \text{onde} \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_c(r)$$

(30)

Os momentos angulares orbital e de spin comutam

$$[\vec{L}, \vec{S}] = 0$$

Portanto podemos escolher os autoestados de H_0 como sendo também autoestados de

$$L^2, L_z, S^2, S_z$$

Mas como L_z e S_z não comutam com $\vec{L} \cdot \vec{S}$ é muito melhor trabalhar com as autofunções de

$$L^2, S^2, J^2, J_z \quad \text{onde} \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

pois estes comutam com $\vec{L} \cdot \vec{S}$ uma vez que

$$\begin{aligned} [L_i + S_i, L_j S_j] &= [L_i, L_j] S_j + L_j [S_i, S_j] \\ &= i \epsilon_{ijk} \{ L_k S_j + L_j S_k \} \\ &= i \epsilon_{ijk} L_k S_j + \epsilon_{ikj} L_k S_j = 0 \end{aligned}$$

Desta forma V_{LS} já fica diagonalizado uma vez que

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2)$$

Desta forma V_{LS} já fica diagonalizado.

A função de onda é dada por

$$\psi_{n,l,m} = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

A Precisamos calcular o valor esperado de V_{LS} nestes estados pois

$$A_{l,l}^{(1)} = \langle l^{(1)} | V_{LS} | l^{(1)} \rangle \quad \text{e} \quad | l^{(1)} \rangle \equiv \psi_{n,l,m}$$

Obtemos então

$$\Delta_{mlj} = \frac{1}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{nl} \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases} \rightarrow j = l + \frac{1}{2} \\ \rightarrow j = l - \frac{1}{2}$$

onde usamos

$$\int Y^+ s.c. Y d\Omega = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} l \rightarrow j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) \rightarrow j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty R_{nl}(r) \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} R_{nl} r^2 dr$$

O caso do Sódio (Na)

Os 11 elétrons do Na estão distribuídos como

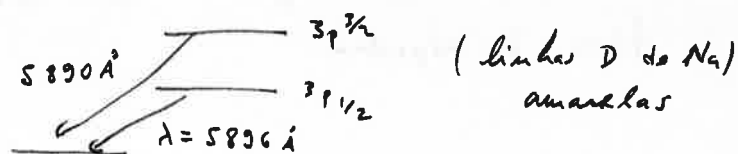
$$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^1$$

Os 10 elétrons de dentro formam uma ~~nuvem~~ ^{nuvem} esférica e portanto o elétron 3s vê um potencial radial $V_c(r)$. Logo Na é um átomo do tipo do Hidrogênio quando o elétron 3s está em órbita.

Os níveis 3s e 3p não são degenerados pois o potencial $V_c(r)$ não é Coulombiano.

Nós estamos interessados no ~~splitting~~ splitting dos níveis $3p_{1/2}$ e $3p_{3/2}$ devido à interação spin-órbita.

Experimentalmente temos



Por outro lado para $z \sim 1$

$$\left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{nl} \sim \frac{e^2}{a_0^3}$$

e dar

38

$$\Delta \sim \frac{e^2}{a_0^3} \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [1 - (0-2)] \sim \frac{e^2}{a_0^3} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2$$

Usando $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ temos que

$$\frac{\frac{e^2}{mc^2}}{\frac{\hbar}{mc}} : a_0 : 1 : 137 : (137)^2$$

raio clássico do elétron comprimento de onda de Compton do elétron raio de Bohr

Na série de Balmer o ~~splitting~~ splitting dos níveis n'

$$\Delta = \frac{e^2}{2a_0n^2} - \frac{e^2}{2a_0m^2} \sim \frac{e^2}{a_0}$$

Portanto o splitting do spin orbita está relacionado com o splitting na série de Balmer por:

$$\left(\frac{e^2}{a_0^3} \frac{\hbar^2}{m^2c^2}\right) : \frac{e^2}{a_0} : \frac{1}{(137)^2} : 1$$

Por isso o splitting do spin orbita é chamado de estrutura fina do espectro.

Efeito Zeeman

Átomos do tipo do H em um campo magnético uniforme.
No caso do spin ser levado em conta temos o Efeito Zeeman anômalo.

O potencial visto para um campo magnético uniforme é

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r})$$

e se $\vec{B} = B \vec{e}_z \Rightarrow \vec{A} = -\frac{1}{2} (B y \vec{e}_x - B x \vec{e}_y)$

A interação é dada pelo acoplamento mínimo

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

Daí

$$H = H_0 + \lambda V \quad \text{onde} \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_c(r)$$

$$\lambda V = -\frac{e}{2mc} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2 A^2}{2mc^2}$$

Note que

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = -\frac{1}{2} B \left(\frac{\partial y}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial y} \right) = 0$$

e ~~daí~~ como

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \vec{A} \psi &= -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \psi = -i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi - i\hbar (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi \\ &= \vec{A} \cdot \vec{p} \psi = -i\hbar (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi \end{aligned}$$

Portanto para este campo magnético $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$

E ainda

$$\vec{A} \cdot \vec{p} = -\frac{1}{2} (y p_x - x p_y) B = \frac{1}{2} B L_z$$

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4} B^2 (x^2 + y^2)$$

(4)

Esta forma a hamiltoniana fica

$$H = \frac{P^2}{2m} + V_c(r) - \frac{e}{2mc} B L_z + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2)$$

Podemos ainda adicionar a interação com o spin

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{mc} B S_z$$

O termo quadrático em B não é importante para átomos de um elétron. (veja comentário na página seguinte)
Omitindo este termo e considerando a interação spin-órbita temos que a Hamiltoniana é feita de três termos

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + V_c(r)$$

$$H_{LS} = \frac{1}{2mc^2} \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$H_B = -\frac{eB}{2mc} (L_z + \underset{\uparrow}{2S_z})$$

fator girromagnético
do elétron

Tomando H_B como perturbação:

Usaremos os autoestados de $H_0 + H_{LS}$, ou seja autoestados de J^2, J_z, L^2, L_z

Como

$$L_z + 2S_z = J_z + S_z$$

a variação em primeira ordem da perturbação é

$$-\frac{eB}{2mc} \langle J_z + S_z \rangle_{j=l \pm 1/2, m}$$

Comentário sobre a magnitude dos termos lineares e quadráticos em B

Nós temos $\text{for } L_z \sim \hbar$ e $(x^2 + y^2) \sim a_0^2$
 Daí

$$\frac{\frac{e B L_z}{2 m c}}{\frac{e^2 B^2 (x^2 + y^2)}{8 m c^2}} = \frac{e B \hbar}{2 m c} \frac{8 m c^2}{e^2 B^2 a_0^2} = 4 \frac{\hbar c}{e^2} \frac{e}{a_0^2} \frac{1}{B} = \frac{e/a_0^2}{B} \frac{137 \times 4}{\hbar}$$

onde usamos $\frac{e^2}{\hbar c} \sim \frac{1}{137}$

Como $e \sim 4,8 \times 10^{10} \text{ ues}$, $a_0 \sim 0,53 \times 10^8 \text{ cm}$, temos for

$$\frac{e}{a_0^2} = \frac{4,8 \times 10^{10} \text{ ues}}{(0,53)^2} \sim 1,7 \times 10^7 \frac{(\text{ues})^2}{\text{cm}^2} \frac{1}{\text{ues}} \sim 1,7 \times 10^7 \text{ gauss}$$

(1 gauss = 1 dyu/ues)

Portanto para for os dois termos sejam da mesma ordem
 é preciso for B seja da ordem de $10^8 \text{ gauss}!!$

O valor esperado de J_z é $\hbar m$ $\langle J_z \rangle_{j=l \pm 1/2} = \hbar m$

Usando o teorema da projeção temos

$$\langle S_z \rangle_{j=l \pm 1/2} = \langle \vec{S} \cdot \vec{J} \rangle_{j=l \pm 1/2} \frac{\hbar m}{\hbar^2 j(j+1)}$$

$$= \frac{m}{2 j(j+1)} \langle J^2 + S^2 - L^2 \rangle_{j=l \pm 1/2}$$

$$= \hbar m \left\{ \frac{(l \pm 1/2)(l \pm 1/2 + 1) + 3/4 - l(l+1)}{2(l \pm 1/2)(l \pm 1/2 + 1)} \right\}$$

$$= \pm \frac{\hbar m}{(2l+1)}$$

$$(\vec{J} - \vec{S})^2 = L^2$$

$$J^2 + S^2 - 2\vec{J} \cdot \vec{S} = L^2$$

$$\vec{J} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 + S^2 - L^2)$$

Consequentemente em primeira ordem

$$\Delta_B^{(1)} = - \frac{e B}{2 m_e c} m_l \left[1 \pm \frac{1}{2l+1} \right] \quad \text{fórmula de Lande.}$$

$$\frac{e \hbar}{m c} = \frac{4,8 \times 10^{10} \text{ ues}}{0,911 \times 10^{-27}} \frac{0,6582 \times 10^{-15} \text{ ev} \cdot \text{sec}}{3 \times 10^{10} \text{ cm/sec}} \sim 10^{-8} \text{ ev} \frac{\text{ues}}{\text{dina}}$$

$$\frac{e \hbar}{m c} \sim 10^{-8} \text{ eV/gauss} \quad \left(\begin{array}{l} 1 \text{ gauss} = 1 \text{ dina/ues} \\ 1 \text{ dina} = 10 \text{ cm/s}^2 \end{array} \right)$$

Consideremos agora o caso oposto em que o campo magnético é muito intenso (limite de Paschen-Back)

Tomamos como Hamiltoniana não perturbada

$$H_0' = H_0 + H_B$$

Os bons n.ºs quânticos são L_z e S_z

J^2 não é bom n.º quântico pois o campo B intenso escolhe uma direção privilegiada (no caso o eixo z). Usamos os autoestados

$$|l, s=1/2, m_l, m_s\rangle$$

e daí

$$\langle H_B \rangle_{m_l, m_s} = - \frac{e B \hbar}{2 m c} (m_l + 2 m_s)$$

A degeneração de H_0 em m_l e m_s desaparece em H_0' .

Temos agora que os estados com mesmo valor de $m_l + 2 m_s$ são degenerados. Ou seja

$$[m_l + 1] \text{ e } [(m_l + 2) + (-1)]$$

Temos então

$$\begin{aligned}\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle &= \langle L_z S_z + \frac{1}{2} (L_+ S_- + L_- S_+) \rangle_{m_l, m_s} \\ &= \hbar^2 m_l m_s\end{aligned}$$

pois $\langle L_{\pm} \rangle_{m_l} = 0$ $\langle S_{\pm} \rangle_{m_s} = 0$

Como $H_{LS} = \frac{1}{2m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$ temos

$$\langle H_{LS} \rangle_{m_l, m_s} = \frac{\hbar^2 m_l m_s}{2 m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle$$

{ Note que $\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle$ é diagonal ~~nest~~ no subespaço degenerado
pois m_l difere de 2 entre os estados do subespaço e $L_{\pm} (L_{\pm})$
só (desce) de uma unidade o valor de m_l }

Como $\left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle \sim \frac{e^2}{a_0^3} \Rightarrow \langle H_{LS} \rangle \sim \left(\frac{\hbar}{m_e c} \right)^2 \frac{e^2}{a_0^3}$ (B finito)

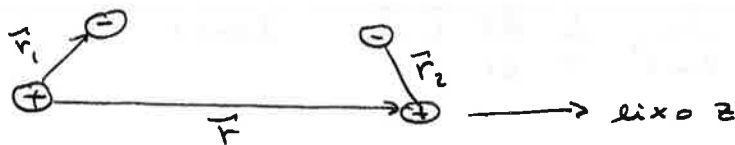
Por outro lado $\langle H_B \rangle \sim \frac{e \hbar B}{m_e c}$ (B finito)

A interação de Van der Waals

~~Interação~~ ~~força~~

Força atrativa que existe entre dois átomos neutros e que para longas distâncias ~~apenas~~ varia com $\frac{1}{r^6}$.

Considere dois átomos de H no estado fundamental



A Hamiltoniana é $H = H_0 + U$

onde

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2}$$

$$U = \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{|\vec{r} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r} + \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|}$$

A solução de menor energia de H_0 é o produto das ^{funções de} onda dos estados fundamentais dos hidrogênios não interagentes

$$U_0^{(0)} \equiv U_{1,0,0}^{(0)}(r_1) U_{1,0,0}^{(0)}(r_2)$$

Para $r \gg a_0$ expandimos U em potências de $\frac{r_1}{|\vec{r}|}$

$$U = \frac{e^2}{r^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - z_1 z_2) + O\left(\frac{1}{r^4}\right) + \dots$$

O termo proporcional a $\frac{1}{r^3}$ corresponde à interação de dois dipolos $e\vec{r}_1$ e $e\vec{r}_2$ separados por uma distância $\vec{r}$.

A contribuição em 1ª ordem à variação de energia é nula pois estamos calculando

$$\int U_0^{(0)} U_0^{(0)} d\tau$$

$$\int U_{100}(r_1) U_{100}(r_2) \{x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2 z_1 z_2\} U_{100}(r_1) U_{100}(r_2)$$

e como o valor esperado de x é nulo (ou y e z) temos:

$$V_{00} = 0$$

A contribuição em 2ª ordem é

$$E^{(2)} = \frac{e^4}{r^6} \sum_{k \neq 0} \frac{|\langle k^{10} | x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2 z_1 z_2 | 0^{10} \rangle|^2}{E_0^{10} - E_k^{10}}$$

e portanto a energia varia como

$$E^{(2)} \sim - \frac{e^2}{r^6} \quad (\text{pois } E_k^{10} > E_0^{10})$$

e a força é atrativa.

Método Variacional

A série de Rayleigh-Schrödinger funciona quando conhecemos a solução exata de uma parte dominante da Hamiltoniana.

O método variacional é útil p/ estimar a energia do ~~o~~ estado fundamental quando nós conhecemos a solução exata da parte dominante de H .

Tomamos um "trial fun" $|\tilde{0}\rangle$ que imita o verdadeiro estado fundamental $|0\rangle$.

Definimos

$$\bar{H} = \frac{\langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle}$$

Teorema: $\bar{H} \geq E_0$

On seje, obtenos um limite superior para a energia do estado fundamental

Prova: Expandimos $|\tilde{0}\rangle$ em termos dos autoestados de H , que são conhecidos

$$|\tilde{0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \langle k|\tilde{0}\rangle |k\rangle$$

onde

$$H|k\rangle = E_k |k\rangle$$

Dai

$$\begin{aligned} \langle \tilde{0}|H|\tilde{0}\rangle &= \sum_{k,k'=0} \langle \tilde{0}|k'\rangle \langle k'|H|k\rangle \langle k|\tilde{0}\rangle \\ &= \sum_{k=0} E_k |\langle \tilde{0}|k\rangle|^2 \end{aligned}$$

On seje

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \frac{\sum_{k=0} |\langle \tilde{0}|k\rangle|^2 E_k \leftarrow E_k - E_0 + E_0}{\sum_{k=0} |\langle \tilde{0}|k\rangle|^2} \\ &= \frac{\sum_{k=0} |\langle \tilde{0}|k\rangle|^2 (E_k - E_0) + \sum_{k=0} |\langle \tilde{0}|k\rangle|^2 E_0}{\sum_{k=0} |\langle \tilde{0}|k\rangle|^2} \\ &= \frac{\sum_{k=1} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2 (E_k - E_0)}{\sum_{k=0} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2} + E_0 \geq E_0 \end{aligned}$$

uma vez que $E_k - E_0 > 0$ ($k > 0$)

Para uma escolha not muito boa de $|\tilde{0}\rangle$ ainda obtemos uma estimativa razoável para a energia do est. fund. pois,

$$\langle \tilde{H} | \tilde{0} \rangle \sim O(\epsilon) \quad \text{p/ } \tilde{H} \neq 0$$

temos que

$$\bar{H} - E_0 \sim \frac{\sum (O(\epsilon))^2 (E_k - E_0)}{1 + \sum (O(\epsilon))^2} \sim O(\epsilon^2)$$

No entanto o termo não diz quão longe estamos do resultado exato.

Podemos dizer que $\bar{H}$ é estacionário c.r.a. variações

$$|\tilde{0}\rangle \rightarrow |\tilde{0}\rangle + \delta|\tilde{0}\rangle$$

ou seja $\delta\bar{H} = 0$ quando $|\tilde{0}\rangle$ coincide com $|0\rangle$.

Isto que dizer: se usamos $|0\rangle + \delta|0\rangle$ para calcular $\bar{H}$ comitamos um erro da ordem de $(\delta|0\rangle)^2$ na estimativa da energia do est. fund.

Na prática temos que usar intuição física para "chutar" $|\tilde{0}\rangle$.

Também podemos escrever $|\tilde{0}\rangle$ em função de parâmetros λ_i e calcular $\bar{H}$ em função destes parâmetros.

Daí minimizaremos $\bar{H}$ colocando

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda_i} = 0$$

Isto determina os valores ^{ideais} de λ_i ~~para os quais~~ e daí substituímos em $\bar{H}$.

Ex: Suponha que alguém advinhe que a função de onda do 1.º est. fund. do hidrogênio é

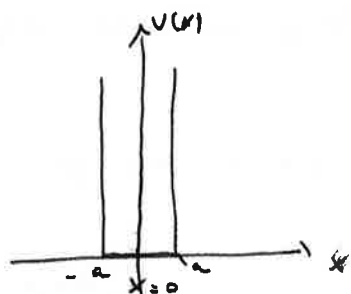
$$\langle x|0 \rangle \sim e^{-r/a}$$

onde a é um parâmetro.

Minimizando $\bar{H}$ encontra-se o valor correto de $E_0 = -\frac{e^2}{2a_0}$

e o mínimo a é alcançado quando $a \equiv a_0$ (raio de Bohr)

Ex



A solução exata é

$$\langle x|0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a}$$

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{4a^2}$$

Como a função de onda deve ser zero em $x = \pm a$ e como o est. fund. não deve ter "nós", poderíamos chutar

$$\langle x|\tilde{0} \rangle = a^2 - x^2$$

Daí

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int_{-a}^a (a^2 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx} \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{\int_{-a}^a (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx} = \frac{10}{\pi^2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{8 a^2 m^2} \sim 1.0432 E_0 \end{aligned}$$

1.3% da erro

Fazendo

$$\langle x | \delta \rangle = |a|^\lambda - |x|^\lambda$$

obtemos

$$\bar{H} = \left[\frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{(2\lambda-1)} \right] \left(\frac{\hbar^2}{4m^2 a^2} \right)$$

e daí

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow \lambda = \frac{1+\sqrt{6}}{2} \sim 1.72$$

$$\bar{H}_{\min} \approx \left(\frac{5+2\sqrt{6}}{\pi^2} \right) E_0 \sim 1.00298 E_0 \quad \underline{0,3\% \text{ de erro}}$$

Diferença entre $|0\rangle$ e $|\delta\rangle$:

Assumindo $|\delta\rangle$ está normalizada

$$\bar{H}_{\min} = \sum_{k=0} | \langle k | \delta \rangle |^2 E_k \geq | \langle 0 | \delta \rangle |^2 E_0 + 9 E_0 [\langle 2 | \delta \rangle |^2 \dots]$$

uma vez que $\langle 1 | \delta \rangle = 0$ por questões de paridade e onde $9 E_0$ é a energia do segundo estado excitado

Daí

$$\bar{H}_{\min} \geq | \langle 0 | \delta \rangle |^2 E_0 + 9 E_0 (1 - | \langle 0 | \delta \rangle |^2)$$

ou

$$8 E_0 | \langle 0 | \delta \rangle |^2 - 9 E_0 + \bar{H}_{\min} \geq 0$$

$$| \langle 0 | \delta \rangle |^2 \geq \frac{9 E_0 - \bar{H}_{\min}}{8 E_0} = 0.99963$$

Quanto mais diferente de 1, $| \langle 0 | \delta \rangle |^2$ e θ por o resultado de

Escrevendo

$$\langle 0 | \delta \rangle \sim \cos \theta$$

temos

$$\theta \sim 1,1^\circ$$

Potenciais dependentes do tempo: Representação da interação

Consideramos a hamiltoniana

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

onde H_0 não depende explicitamente do tempo mas $V(t)$ depende.

Suponha que as autofunções e autovalores de H_0 são conhecidos:

$$H_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$$

Estamos interessados no caso em que inicialmente apenas um estado, $|i\rangle$, está populado.

Conforme o tempo passa, a perturbação $V(t)$ causa transições e outros estados se tornam populados.

O operador de evolução não é simplesmente $e^{-iHt/\hbar}$ quando H depende explicitamente de t .

Questão: Qual a probabilidade, em função do tempo, de encontrar o sistema em um estado $|m\rangle$ com $m \neq i$?

Precisamos saber como um estado qualquer evolui no tempo com a Hamiltoniana $H = H_0 + V(t)$.

Suponha que em $t=0$ temos

$$|\alpha\rangle = \sum_m c_m(0) |m\rangle$$

1. queremos encontrar $c_m(t)$ tal que

$$|\alpha, t_0=0, t\rangle = \sum_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle$$

onde $|\alpha, t_0=0, t=0\rangle$ é o ket na rep. de Schrodinger em $t=t_0$ e cujo ket correspondente em $t=0$ é $|\alpha\rangle$.

A fase $e^{-iE_\alpha t/\hbar}$ é colocada porque ~~de~~ a evolução temporal de $c_\alpha(t)$ fica dependendo somente de $V(t)$. Tal fase existe mesmo quando $V=0$ e dar ~~em~~ $c(t) = c(0)$.

Representação de Interação

Suponha que em $t=t_0$ tenhamos um estado $|\alpha\rangle$ e que em $t=t$ temos o estado, na rep. de Schrodinger, $|\alpha, t_0, t\rangle_S$.

Definimos

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I \equiv e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S \quad (*)$$

onde $|\alpha\rangle_I \equiv$ estado na rep. de interação (introduzida agora)

Para operadores definimos

$$A_I \equiv e^{iH_0 t/\hbar} A_S e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (**)$$

e em particular

$$V_I \equiv e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$$

↑ potencial dependente do tempo
na rep. de Schrodinger

Os estados e operadores nas reps de Schrodinger e Heisenberg estão relacionados por

$$|\alpha\rangle_H = e^{iH t/\hbar} |\alpha, t_0=0, t\rangle_S$$

$$A_H = e^{iH t/\hbar} A_S e^{-iH t/\hbar}$$

A diferença de (*) e (**) é que temos agora H e não H_0 .

Vejamos a evolução temporal

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S) \\
 &= -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S + e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_S}_{\text{(da eq. de Schrodinger)}} \\
 &= e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S
 \end{aligned}$$

e daí

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0, t\rangle_I \quad (5.5.11)$$

On seja V_I tome o lugar da Hamiltoniana na eq. de interação. Se a perturbação V_I é nula o ket $|\alpha, t_0, t\rangle_I$ é constante no tempo.

No caso de uma observável A

$$i\hbar \frac{\partial A_I}{\partial t} = -H_0 A_I + e^{iH_0 t/\hbar} \frac{\partial A_S}{\partial t} e^{-iH_0 t/\hbar} + A_I H_0$$

Se A_S não depende explicitamente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial A_I}{\partial t} = [A_I, H_0] \quad \left(\begin{array}{l} \text{para a eq. de Heisenberg} \\ \text{com } H \text{ trocado por } H_0 \end{array} \right)$$

Portanto

	Rep. Heisenberg	Rep. Int.	Rep. Schrodinger
Estado	n evolui	evolui com V	evolui com H
Operador	evolui com H	evolui com H_0	n evolui

$\Updownarrow$
 rep. intermediária
 entre a de Heisenberg
 e Schrodinger

Rep. de Interação também chamada de Rep. de Dirac

Do fato que (veja S.S.4)

$$|\alpha, t_0=0, t\rangle_S = \sum_n C_n(t) e^{-i E_n t/\hbar} |n\rangle$$

temos

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0=0, t\rangle_I &= e^{i H_0 t/\hbar} |\alpha, t_0=0, t\rangle_S \\ &= \sum_n C_n(t) |n\rangle \quad (\text{pois } H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle) \end{aligned}$$

Portanto na mp. de interações continuamos a usar os autoestados de H_0 (estacionários) como base.

De (S.S.11) (multiplicando por $\langle m|$)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle m|\alpha, t_0, t\rangle_I &= \langle m|V_I|\alpha, t_0, t\rangle_I \\ &= \sum_n \langle m|V_I|n\rangle \langle n|\alpha, t_0, t\rangle \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \langle m|V_I|n\rangle &= \langle m|e^{i H_0 t/\hbar} V_S(t) e^{-i H_0 t/\hbar}|n\rangle \\ &= V_{nm}(t) e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \end{aligned}$$

onde $V_{nm}(t) = \langle m|V_S(t)|n\rangle$

Como $\langle m|m\rangle = \delta_{mm}$ temos

$$C_m(t) = \langle m|\alpha, t_0, t\rangle_I$$

e então

$$i\hbar \frac{\partial C_m(t)}{\partial t} = \sum_n V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} C_n(t)$$

~~De fato~~
~~esta equação~~
~~está errada~~

onde

$$\omega_{nm} = -\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12}t} \\ V_{21} e^{i\omega_{21}t} & V_{22} \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

O Problema de dois estados dependentes do tempo

Definimos o problema por

$$H_0 = E_1 |1\rangle\langle 1| + E_2 |2\rangle\langle 2| \quad (E_2 > E_1)$$

$$V(t) = \gamma e^{i\omega t} |1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t} |2\rangle\langle 1| \quad (5.5.18)$$

$$(\hat{O}|m\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\hat{O}|m\rangle \Rightarrow \hat{O} = \sum_{m,n} |m\rangle\langle n| O_{nm}, O_{nm} = \langle m|\hat{O}|n\rangle)$$

Portanto temos

$$V_{11} = V_{22} = 0 \quad V_{12} = V_{21}^* = \gamma e^{i\omega t}$$

Podemos encontrar a solução exata do problema. Se em $t=0$ somente o nível 1 é populado

$$c_1(0) = 1 \quad c_2(0) = 0$$

obtemos γ (veja problema 30)

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\}$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

Esta é conhecida como a fórmula de Rabi

A probabilidade do estado 2 estar populado ~~está~~ oscila no tempo com uma probabilidade

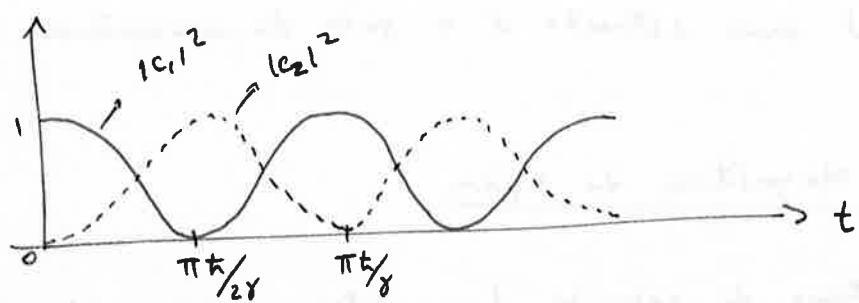
$$\mathcal{R} = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$

A amplitude tende a 1 (alta taxa de transição) quando

$$\omega \sim \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad \text{Condição de ressonância}$$

Isto ~~ocorre~~ quando a frequência da perturbação, (campo elétrico ou magnético) é próxima da frequência ω_{21} característica do sistema.

No ponto $\omega = \omega_{21}$ $\gamma = \frac{\gamma}{\hbar}$ temos

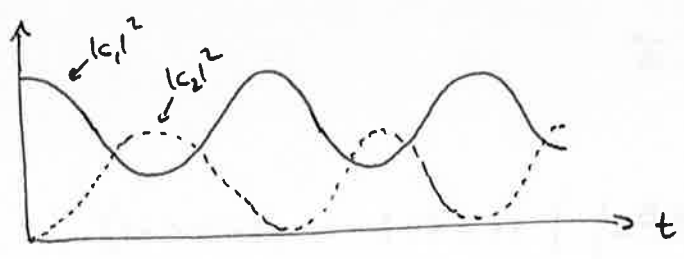


- em $t=0$ o sistema está no estado 1
 - em $t = \frac{\pi \hbar}{2\gamma}$ " " " " " 2
 - em $t = \frac{\pi \hbar}{\gamma}$ " " " " " 1
- nesta intervalo há absorção de energia
nesta intervalo há emissão de energia
movimento

Portanto $V(t)$ não só fornece como recebe energia do sistema.

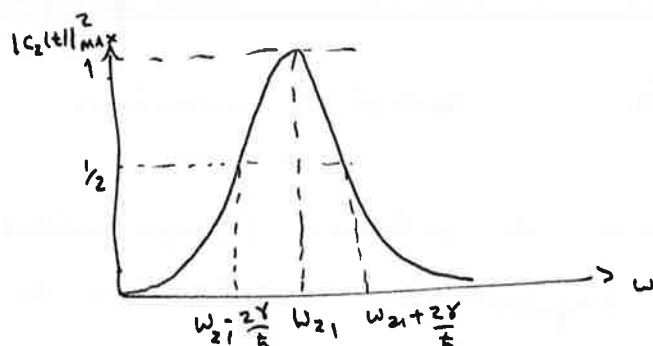
$V(t)$ provoca transições nos dois sentidos $1 \rightleftharpoons 2$.

Fora da ressonância teríamos



ou seja o estado 1 sempre terá uma população não nula.
e o 2 não atingirá a população máxima.

O valor máximo de $|c_2(t)|^2$ em função de ω é



Vemos então que quanto mais fraco o potencial perturbativo ($\gamma \rightarrow 0$)
 ~~V_{12}~~ ($V_{12} = \gamma e^{i\omega t}$) mais estreito é o pico da ressonância

Ressonância Magnética de spin

Considere um sistema de spin $1/2$ (um elétron ligado a um átomo) submetido a um campo magnético uniforme e independente do tempo na direção z e um outro dependente do tempo girando no plano xy

$$\vec{B} = B_0 \hat{e}_z + B_1 (\cos \omega t \hat{e}_x + \sin \omega t \hat{e}_y)$$

B_0, B_1 constantes.

O efeito de B_0 tomamos como H_0 (Hamiltoniana não perturbada)

" " " B_1 " " V

Como

$$\vec{\mu} = \frac{e \hbar}{m c} \vec{S}$$

temos

$$H_0 = -\left(\frac{e \hbar B_0}{2 m c}\right) (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)$$

$$V(t) = -\left(\frac{e \hbar B_1}{2 m c}\right) \left\{ \cos \omega t (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) + \right. \\ \left. i \sin \omega t (|-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-|) \right\}$$

A razão disso é que a interação é dada por

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

$$= -\frac{e B_0}{mc} \hat{S}_z - \frac{e B_1}{mc} \left\{ \hat{S}_x \cos \omega t + \hat{S}_y \sin \omega t \right\}$$

Como

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y$$

temos

$$\frac{S_+ + S_-}{2} = S_x$$

$$\frac{S_+ - S_-}{2i} = S_y$$

Além do mais

$$\langle \pm | S_z | \pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle + | S_z | - \rangle = 0$$

$$\langle \pm | S_{\pm} | \pm \rangle = 0$$

$$\langle + | S_+ | - \rangle = \hbar$$

$$\langle - | S_- | + \rangle = \hbar$$

Dai

$$H = -\frac{e B_0}{mc} \sum_{i,j} |i\rangle \langle i | \hat{S}_z | j \rangle \langle j| -$$

$$- \frac{e B_1}{mc} \sum_{i,j} \frac{\hbar}{2} \left\{ \cos \omega t |i\rangle \langle i | (S_+ + S_-) | j \rangle \langle j| + \sin \omega t |i\rangle \langle i | \left(\frac{S_+ - S_-}{2i} \right) | j \rangle \langle j| \right\}$$

$$= -\frac{e \hbar B_0}{2mc} (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) -$$

$$- \frac{e B_1 \hbar}{2mc} \left\{ \cos \omega t (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) - i \sin \omega t (|+\rangle \langle -| - |-\rangle \langle +|) \right\}$$

Para $e < 0$ vemos que $E_+ > E_-$ e daí $|+\rangle$ — nível superior

$|-\rangle$ — " inferior.

A diferença de energia é

$$E_+ - E_- = \frac{|e| \hbar B_0}{mc}$$

e daí a frequência característica do sistema

$$\omega_{Z1} = \frac{|e| \hbar B_0}{mc}$$

Revisão da precessão de spin

(5.)

Se colocarmos $B_x = 0$ no caso anterior. Então a Hamiltoniana é

$$H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e B_0}{m c} S_z$$

e o operador de evolução temporal

$$\exp(-i H_0 t / \hbar) = \exp\left(i \frac{e B_0}{m c} \frac{S_z}{\hbar} t\right) = \exp\left(i \frac{\omega t}{2} S_z\right)$$

onde $\omega = \frac{|e| B_0}{m c}$ ($e < 0$)

Em $t=0$, seja um estado $|\alpha\rangle$ dado por

$$|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad \text{onde} \quad c_{\pm} = \langle \pm | \alpha \rangle$$

Em $t=t$

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= e^{-i H_0 t / \hbar} |\alpha\rangle \\ &= c_+ e^{-i S_z \omega t / \hbar} |+\rangle + c_- e^{-i \omega t S_z / \hbar} |-\rangle \\ &= e^{-i \omega t / 2} c_+ |+\rangle + e^{i \omega t / 2} c_- |-\rangle \\ &= c_+(t) |+\rangle + c_-(t) |-\rangle \end{aligned}$$

Portanto

$$|C_{\pm}(t)|^2 = |C_{\pm}(0)|^2$$

ou seja a probabilidade de encontrar o estado em um dado autoestado não muda no tempo.

No entanto o valor esperado de S_x e S_y dependem do tempo. Temos

$$\begin{aligned} \langle \alpha(t) | S_+ | \alpha(t) \rangle &= \hbar c_- e^{i \omega t / 2} c_+^* e^{i \omega t / 2} \\ &= \hbar c_+^* c_- e^{i \omega t} \end{aligned}$$

$$\langle \alpha(t) | S_- | \alpha(t) \rangle = \hbar c_+ e^{-i \omega t / 2} c_-^* e^{-i \omega t / 2} = \hbar c_+ c_-^* e^{-i \omega t}$$

Dar

$$\langle \alpha(t) | S_x | \alpha(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} (c_+^* c_- e^{i\omega t} + c_+ c_-^* e^{-i\omega t})$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left\{ \begin{aligned} & \left(\frac{c_+^* c_- + c_+ c_-^*}{2} \right) e^{i\omega t} - \cancel{\frac{c_+ c_-^*}{2} e^{i\omega t}} \\ & + \left(\frac{c_+^* c_- + c_+ c_-^*}{2} \right) e^{-i\omega t} - \cancel{\frac{c_+^* c_-}{2} e^{-i\omega t}} \\ & + \left(\frac{c_+^* c_- - c_+ c_-^*}{2} \right) e^{i\omega t} + \cancel{\frac{c_+ c_-^*}{2} e^{i\omega t}} \\ & + \left(\frac{c_+^* c_- - c_+ c_-^*}{2} \right) e^{-i\omega t} + \cancel{\frac{c_+^* c_-}{2} e^{-i\omega t}} \end{aligned} \right\}$$

$$\langle \alpha(t) | S_y | \alpha(t) \rangle = \frac{\hbar}{2i} (c_+^* c_- e^{i\omega t} - c_+ c_-^* e^{-i\omega t})$$

$$= \frac{\hbar}{4i} \left\{ \begin{aligned} & (c_+^* c_- - c_+ c_-^*) e^{i\omega t} + \cancel{c_+ c_-^* e^{i\omega t}} \\ & + (c_+^* c_- - c_+ c_-^*) e^{-i\omega t} - \cancel{c_+^* c_- e^{-i\omega t}} \\ & - (c_+^* c_- + c_+ c_-^*) e^{-i\omega t} + \cancel{c_+^* c_- e^{-i\omega t}} \\ & + (c_+^* c_- + c_+ c_-^*) e^{i\omega t} - \cancel{c_+ c_-^* e^{i\omega t}} \end{aligned} \right\}$$

Logo

$$\langle S_x \rangle_t = \langle S_x \rangle_0 \cos \omega t - \langle S_y \rangle_0 \sin \omega t$$

$$\langle S_y \rangle_t = \langle S_y \rangle_0 \cos \omega t + \langle S_x \rangle_0 \sin \omega t$$

Temos ainda que

$$\langle \alpha(t) | S_z | \alpha(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \{ |c_+|^2 - |c_-|^2 \} \equiv \langle S_z \rangle_0$$

Como vimos antes nesta "Revisão" apesar do valor esperado de S_x e S_y ~~se~~ ~~no~~ ~~dependem~~ ~~do~~ ~~tempo~~ os valores de $|c_+|^2$ e $|c_-|^2$ não dependem do tempo, quando $B_1 = 0$.

No caso $B_1 \neq 0$ $|c_+|^2$ e $|c_-|^2$ vão variar no tempo. Para ver isso vamos ~~de~~ identificar

$$\frac{-e \hbar B_1}{2 m c} \rightarrow \gamma \quad \omega \rightarrow \omega$$

e usar os resultados obtidos para o sistema de dois estados.

A interação pode ser escrita como

$$\begin{aligned} V(t) &= - \frac{e \hbar B_1}{2 m c} \left\{ e^{-i\omega t} |+\rangle \langle -| + e^{i\omega t} |-\rangle \langle +| \right\} \\ &= \gamma e^{i\omega t} |-\rangle \langle +| + \gamma e^{-i\omega t} |+\rangle \langle -| \end{aligned}$$

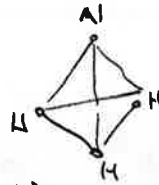
Identificando $|+\rangle \equiv 2$ e $|-\rangle \equiv 1$ obtemos o mesmo potencial da (5.5.18) (pag (54))

Portanto dos gráficos da pag (55) vemos que há uma sucessão de transições entre os estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ além é claro da precessão do spin devido a B_0 .

~~Assim~~ É claro que a ressonância é atingida quando $\omega = \omega_{21}$.

Masers

Consideramos a molécula de amônia NH_3



Ela tem dois autoestados de paridade $|S\rangle$ e $|A\rangle$.

$|A\rangle$ tem uma energia um pouco maior que $|S\rangle$

Por questões de simetria esperamos que o momento de dipolo elétrico da molécula $\vec{\mu}_{el}$ seja proporcional ao vetor posição $\vec{x}$ do átomo N.

Consideremos a interação dependente do tempo

$$V(t) = -\vec{\mu}_{el} \cdot \vec{E} \quad \text{onde} \quad \vec{E} = |E|_{\max} \hat{z} \cos \omega t$$

A variação espacial de $\vec{E}$ é desprezada pois um comprimento de onda é grande em relação à molécula NH_3 ; pois a frequência é escolhida como sendo

$$\omega \approx \frac{E_A - E_S}{\hbar}$$

Por razão de paridade

$$\langle A | \mu_{el} | A \rangle = \langle S | \mu_{el} | S \rangle = 0$$

mas os elementos fora da diagonal não são nulos

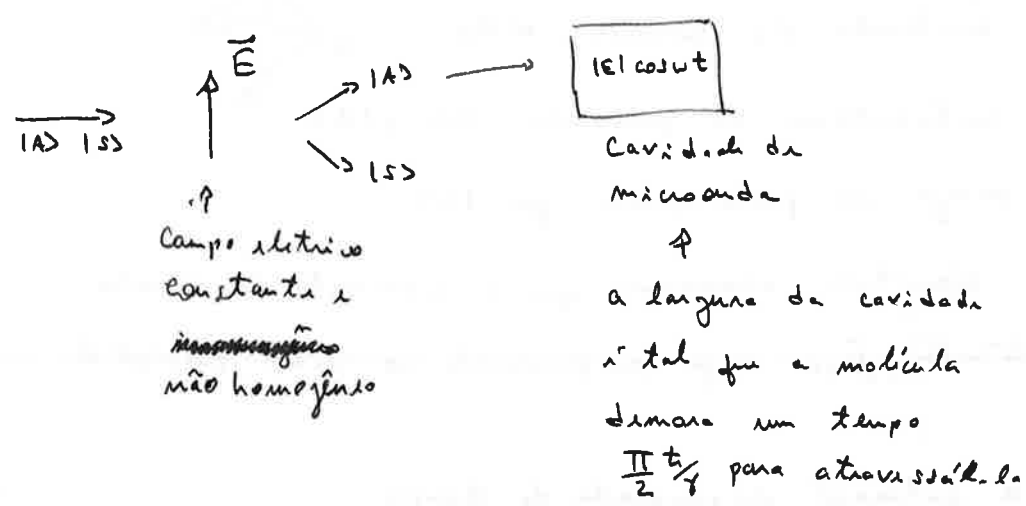
$$\langle A | \mu_{el} | S \rangle = \langle S | \mu_{el} | A \rangle \neq 0$$

Dai

$$V(t) = \gamma_1 |A\rangle \langle S| + \gamma_2 |S\rangle \langle A|$$

e o potencial conecta os dois estados e a discussão do sistema de dois estados se aplica aqui.

funcionamento do maser:



Portanto ao sair da cavidade as moléculas estarão no estado $1S$ e a energia que perderam transform. em radiação da frequência ω ou seja $|E| \cos \omega t$. Obtemos então um amplificador da intensidade da radiação. (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation MASER)

Teoria da perturbação dependente do tempo

Série de Dyson

Nós vimos como usar a eq. de interação para tratar potenciais dependentes do tempo. Também resolvemos exatamente o problema de dois estados.

No entanto muitos problemas não podem ser resolvidos exatamente. Fazemos então uma expansão perturbativa.

Como o problema se resume em resolver a eq. (5.5.15) para encontrar os coeficientes $c_n(t)$ fazemos a expansão

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots$$

onde os n entre parênteses denotam a ordem da perturbação.

~~Sistema de equações (5.5.15) e (5.5.16) para o estado i este populado~~

Substituindo em (5.5.15)

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} c_m$$

temos

$$i\hbar \frac{d}{dt} (c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + \dots) = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} (c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + \dots)$$

e daí

$$\frac{d}{dt} c_n^{(0)} = 0$$

~~$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n^{(1)} = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} c_m^{(0)}$$~~

⋮

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n^{(k)} = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} c_m^{(k-1)}$$

Onde seja $c_n^{(0)}$ é independente do tempo e $c_n^{(k)}$ é determinado a partir de $c_n^{(k-1)}$

Se inicialmente somente o estado i está populado fazemos $c_m^{(0)} = \delta_{mi}$ e daí

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n^{(1)} = V_{ni} e^{i\omega_{ni}t} \Rightarrow c_n^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_{ni} e^{i\omega_{ni}t'}$$

onde a constante de integração é tal que $c_n^{(1)}(t_0) = 0$

Desta maneira integramos as eqs (5.5.15) e encontramos $c_n^{(k)}$ iterativamente. Esta é a maneira que Dirac ~~foi~~ resolveu o problema em 1927.

Um método mais moderno é o de Dyson utilizando o operador de evolução temporal na rep. de interação. Ele pode também ser utilizado em teorias relativísticas.

Definimos o operador de evolução temporal na up. de interação como

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0, t_0\rangle_I$$

Como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

temos

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I U_I(t, t_0) \quad (5.6.3)$$

A condição inicial para esta equação é dada

$$U_I(t_0, t_0) = 1 \quad (5.6.4)$$

(5.6.3) e (5.6.4) são equivalentes a

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

Obtemos então uma expansão

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V(t') \left[1 - \int_{t_0}^{t'} dt'' V_2(t'') U_I(t'', t_0) \right] = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') + \dots \\ &\dots \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^{(n)}) + \dots \end{aligned}$$

Esta é a chamada série de Dyson. que foi aplicada primeiramente a QED covariante

~~Probabilidade de transição~~

Probabilidade de transição

Vejamos a relação entre $U_I(t, t_0)$ e $U_S(t, t_0)$ (na eq. de Schrödinger)
Temos

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_I &= e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t, t_0\rangle_S \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) |\alpha, t_0, t_0\rangle_S \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\alpha, t_0, t_0\rangle_I \end{aligned}$$

e daí

$$U_I(t, t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar}$$

Note que se em $t=0$ o sistema está no estado $|i\rangle$ que é
auto estado de H_0 temos que no tempo t estará no estado

$$\begin{aligned} |i, t_0=0, t\rangle_I &= U_I(t, 0) |i\rangle_I = U_I(t, 0) e^{+iH_0 0/\hbar} |i\rangle_S \\ &= U_I(t, 0) |i\rangle_S \\ &= \sum_n |n\rangle \langle n| U_I(t, 0) |i\rangle \end{aligned}$$

Portanto $\langle n| U_I(t, 0) |i\rangle$ nada mais é que o coeficiente $c_n(t)$
definido anteriormente. Temos então

$$\langle n| U_I(t, t_0) |i\rangle = e^{i(E_n t - E_i t_0)/\hbar} \langle n| U(t, t_0) |i\rangle$$

E $\langle n| U(t, t_0) |i\rangle$ é a amplitude de transição entre os estados
 i e n . Logo $\langle n| U_I |i\rangle$ mas é a ~~amplitude~~ amplitude de
transição, mas é a probabilidade de transição

$$|\langle n| U_I(t, t_0) |i\rangle|^2 = |\langle n| U(t, t_0) |i\rangle|^2$$

No que a probabilidade de transição entre autoestados de operadores que não comutam com H_0 nos é dada por $|\langle a | U_I | b \rangle|^2$, pois

$$\begin{aligned} \langle a | U_I | b \rangle &= \langle a | e^{i H_0 t / \hbar} U_S e^{-i H_0 t_0 / \hbar} | b \rangle \\ &= \sum_{a', b'} x_{a'}^* y_{b'} \langle a' | U | b' \rangle \end{aligned}$$

onde $e^{-i H_0 t / \hbar} | a \rangle = \sum_{a'} x_{a'} | a' \rangle$

$$e^{-i H_0 t_0 / \hbar} | b \rangle = \sum_{b'} y_{b'} | b' \rangle$$

Nestas casas precisamos expandir $| a \rangle$ e $| b \rangle$ em termos de autoestados de H_0 .

Caso típico.

Consideremos o caso em que t em $t = t_0$ o sistema está no estado $| i \rangle$ que é autoestado de H_0 . A menos de uma fase $| i, t_0, t_0 \rangle_S$ e $| i \rangle$ a menos de uma fase

Escolhamos

$$| i, t_0, t_0 \rangle_S = e^{-i E_i t_0 / \hbar} | i \rangle$$

e daí

$$| i, t_0, t_0 \rangle_I = | i \rangle$$

No tempo t

$$| i, t_0, t \rangle_I = U_I(t, t_0) | i \rangle$$

Comparando com a definição de $C_m(t)$

$$| i, t_0, t \rangle_I = \sum_m C_m(t) | m \rangle$$

Vemos que

$$C_m(t) = \langle m | U_I(t, t_0) | i \rangle$$

Usando a série de Dyson para $U_I(t, t_0)$ obtemos uma expansão para $C_m(t) = C_m^{(0)} + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \dots$ onde $C_m^{(k)}$ é de ordem k no potencial perturbador

$$C_m(t) = \langle m | U_I(t, t_0) | i \rangle = \langle m | i \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle m | V_I(t') | i \rangle + \\ + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle m | V_I(t') V_I(t'') | i \rangle + \dots$$

e então

$$C_m^{(0)} = \langle m | i \rangle = \delta_{mi}$$

$$C_m^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle m | V_I(t') | i \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_m - E_i)t'/\hbar} \langle m | V(t') | i \rangle \\ = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{mi}t'} V_{mi}(t') \quad \omega_{mi} = \frac{E_m - E_i}{\hbar} \quad (5.6.17) \\ V_{mi} = \langle m | V_I(t') | i \rangle$$

$$C_m^{(2)} = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{i\omega_{mn}t'} e^{i\omega_{ni}t''} V_{mn}(t') V_{ni}(t'')$$

A transição de probabilidade é

$$P(i \rightarrow m) = |\langle m | U_I(t_0, t_0) | i \rangle|^2 = |C_m(t)|^2 \\ = |C_m^{(0)} + C_m^{(1)} + \dots|^2 \\ = |C_m^{(0)}|^2 + [C_m^{(0)} C_m^{(1)*} + C_m^{(1)*} C_m^{(0)}] + \\ + [|C_m^{(1)}|^2 + C_m^{(0)} C_m^{(2)*} + C_m^{(1)*} C_m^{(2)}] \\ = P^{(0)} + P^{(1)} + P^{(2)} + \dots$$

Como $C_m^{(0)} = \delta_{mi}$

$$P_i^{(0)} = \delta_{mi} \quad P_m^{(1)} = \delta_{mi} \{ 2 \operatorname{Re} C_m^{(1)} \} \quad P_m^{(2)} = |C_m^{(1)}|^2 + \delta_{mi} 2 \operatorname{Re} C_m^{(2)}$$

Perturbação por um potencial constante

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{p/ } t < 0 \\ V \text{ (ind. de } t) & \text{p/ } t \geq 0 \end{cases}$$

Se em $t=0$ estamos no estado $|i\rangle$ temos

$$C_n^{(0)} = \delta_{ni}$$

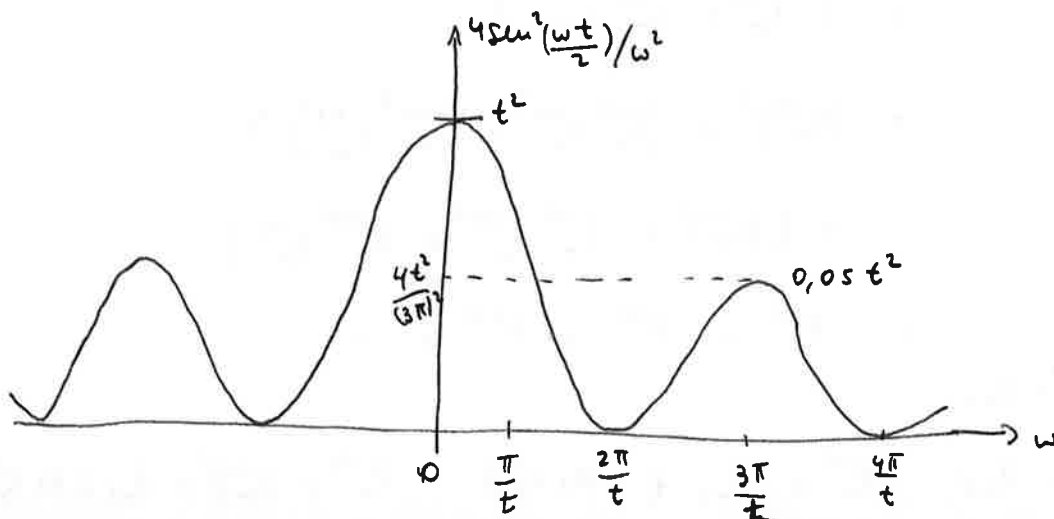
$$\begin{aligned} C_n^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt' = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \left. \frac{e^{i\omega_{ni}t'}}{i\omega_{ni}} \right|_{t=0}^t \\ &= \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t}) \end{aligned}$$

e daí

$$\begin{aligned} |C_n^{(1)}|^2 &= \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} (1 - e^{i\omega_{ni}t})(1 - e^{-i\omega_{ni}t}) \\ &= \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} (2 - 2\cos\omega_{ni}t) \quad \left[\begin{array}{l} \cos x - \cos y = 2 \sin \frac{x+y}{2} \sin \frac{y-x}{2} \\ x=0 \text{ e } y=\omega_{ni}t \end{array} \right] \\ &= \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right) \quad \left[\begin{array}{l} \cos x - \cos y = 2 \sin \frac{x+y}{2} \sin \frac{y-x}{2} \\ x=0 \text{ e } y=\omega_{ni}t \\ 1 - \cos y = 2 \sin^2 \frac{y}{2} \end{array} \right] \end{aligned}$$

~~Para~~ • Ou seja $|C_n^{(1)}|^2$ depende de $|V_{ni}|^2$, $|E_n - E_i|$.

Fazendo o gráfico de $4\sin^2(\frac{\omega t}{2})/\omega^2$ contra ω para t fixo ($\omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$)



$$\omega' = \frac{\omega t}{2} \quad \omega'' = \frac{\omega}{t}$$

Portanto a altura em $\omega=0$ é t^2 e a largura de pico é proporcional a $1/t$. Para t grande somente as frequências menores que $\frac{2\pi}{t}$ contribuem para $|c_n^{(1)}|^2$. Ou seja, para as energias que satisfazam

$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega|} = \frac{2\pi \hbar}{|E_n - E_i|}$$

Portanto para um intervalo de tempo Δt desde que a perturbação foi ligada a transição só será apreciável se

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar$$

ΔE - energia envolvida na transição $\Delta E = E_n - E_i$

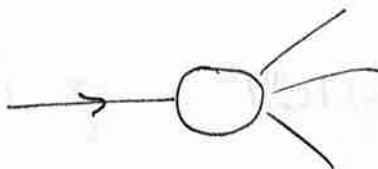
Portanto para Δt pequenos podemos tolerar uma não conservação da energia ΔE maior. Conforme Δt cresce esta não conservação diminui.

No caso $E_n = E_i$ ($\omega=0$) temos $(\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1)$

$$|c_n^{(1)}|^2 = \frac{|V_{ni}|^2 t^2}{\hbar^2}$$

Dois exemplos onde $E_n = E_i$ são

i) Espalhamento elástico



a partícula muda de direção (momento) mas não de energia

ii) Átomo de He - $|i\rangle \equiv (2s)^2$ dois elétrons excitados

$|f\rangle \equiv (1s)^2 + \text{elétron livre}$

a energia de $|i\rangle$ e $|f\rangle$ é a mesma pois não há emissão de radiação.

Quando temos vários estados finais com energia E_n próximo da E_i estamos interessados na probabilidade do sistema ir para qualquer um dos estados finais, i.e.

$$\sum_{n, E_n \sim E_i} |c_n^{(t)}|^2$$

Definimos a densidade de estados finais como

$$\rho(E) dE = \text{n.º de estado com energia entre } E \text{ e } E+dE$$

Daí

$$\sum_{n, E_n \sim E_i} |c_n^{(t)}|^2 \Rightarrow \int dE_n \rho(E) |c_n^{(t)}|^2 =$$

$$= 4 \int \sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right] \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \rho(E_n) dE_n$$

Usando

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

temos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right] = \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(E_n - E_i)$$

Daí

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int dE_n \rho(E_n) |c_n^{(t)}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|V_{ni}|^2} \rho(E_n) t \Big|_{E_n \sim E_i}$$

Portanto a probabilidade de transição total é proporcional a t para t grande. Isto é decorrência do fato de ela ser proporcional a área sob o pico que tem altura t^2 e largura $1/t$.

O significado de $\overline{|V_{ni}|^2}$ é o seguinte: apesar das energias serem as mesmas para os estados i e n , os estados em si podem (e são) diferentes. Desta forma V_{ni} também não é o mesmo p/ todo n . Por esta razão tomamos a média.

A probabilidade de transição por unidade de tempo, chamada de taxa de transição γ é definida por

$$W_{i \rightarrow m} = \frac{d}{dt} \left(\sum_n |c_n^{(1)}|^2 \right)$$

Des resultados acima vemos que γ é constante em t p/ $t \rightarrow \infty$.

$$W_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mi}|^2 \rho(E_m) \delta(E_m - E_i)$$

Esta é a chamada regra de ouro de Fermi (apesar da teoria ter sido desenvolvida por Dirac)

É comum denotar

$$W_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i)$$

que deve ser entendido como integrado em $\int dE_m \rho(E_m)$

A contribuição da 2ª ordem p/ potencial constante

Temos

$$\begin{aligned} C_m^{(2)} &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_n V_{nm} V_{ni} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ni}t''} \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_n \frac{V_{nm} V_{ni}}{E_m - E_i} \int_0^t dt' \underbrace{e^{i\omega_{nm}t'} (e^{i\omega_{ni}t'} - 1)}_{e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'}} \end{aligned}$$

O 1º termo no r.h.s. tem a mesma dependência temporal que $c_n^{(1)}$, pois

$$C_n^{(1)} = \frac{V_{ni}}{E_m - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

Se esse fosse o único termo usáramos os mesmos argumentos para concluir que quando $t \rightarrow \infty$ a contribuição só vem de $E_m \sim E_i$.

De fato, quando E_m difere de E_m e E_i o segundo termo oscila rapidamente e não contribui p/ a transição.

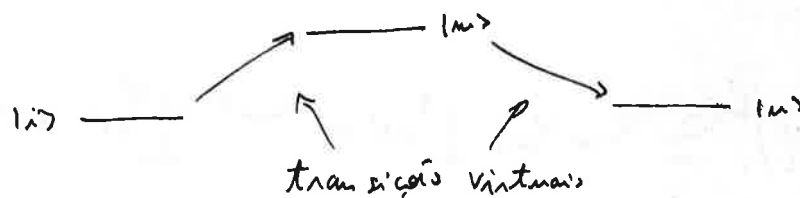
§ Com a contribuição de $C_m^{(1)}$ e $C_m^{(2)}$ temos

$$W_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{mi} + \sum_n \frac{V_{mn} V_{ni}}{E_i - E_m} \right|^2 \rho(E_m) \Big|_{E_m \sim E_i}$$

Interpretação:

$V_{mi} \rightarrow$ transição direta $|i\rangle \rightarrow |m\rangle$

$V_{mn} V_{ni} \rightarrow$ existe uma transição virtual no meio que viola a conservação de energia



Quando $V_{mn} V_{ni} \neq 0$ e $E_m \sim E_i$ a fórmula precisa de um tratamento especial que veremos no problema 31 e seção 5.8.

Temos que trocar

$$E_m - E_i \text{ por } E_m - E_i + i\epsilon.$$

Perturbação Harmônica

Considere um potencial da forma

$$V(t) = V e^{i\omega t} + V^+ e^{-i\omega t} \quad (5.6.39)$$

onde V é um operador que pode depender de $\hat{x}$, $\hat{p}$ etc.

Como $C_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') dt' \quad (\text{veja 5.6.17})$

temos ($t_0=0$)

$$\begin{aligned} C_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t [V_{ni} e^{i\omega t'} + V_{ni}^+ e^{-i\omega t'}] e^{i\omega_{ni}t'} dt' \\ &= \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{\omega + \omega_{ni}} V_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} V_{ni}^+ \right\} \end{aligned}$$

Esta fórmula é bastante parecida com o caso do potencial constante. Basta fazer

$$\omega_{ni} \rightarrow \omega_{ni} \pm \omega$$

e vemos que cada termo é igual ao potencial constante. Na verdade

$$\begin{aligned} |C_n^{(1)}(t)|^2 &= \frac{1}{\hbar^2} \left\{ \frac{(1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t})(1 - e^{-i(\omega + \omega_{ni})t})}{(\omega + \omega_{ni})^2} |V_{ni}|^2 + \right. \\ &\quad + \frac{(1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t})(1 - e^{-i(\omega_{ni} - \omega)t})}{(\omega_{ni} - \omega)^2} |V_{ni}^+|^2 + \\ &\quad + \frac{(1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t})(1 - e^{-i(\omega_{ni} - \omega)t})}{(\omega + \omega_{ni})(\omega_{ni} - \omega)} (V_{ni})^* (V_{ni}^+)^* + \\ &\quad \left. + \frac{(1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t})(1 - e^{-i(\omega + \omega_{ni})t})}{(\omega_{ni} - \omega)(\omega + \omega_{ni})} V_{ni}^+ (V_{ni})^+ \right\} \end{aligned}$$

Usando $\cos x - \cos y = 2 \sin \frac{x+y}{2} \sin \frac{y-x}{2}$ temos:

$$\begin{aligned}
 |C_m^{(1)}(t)|^2 &= \frac{|V_{m_i}|^2}{\hbar^2} \left[\frac{2 - 2 \cos(\omega_{m_i} + \omega)t}{(\omega + \omega_{m_i})^2} + \right. \\
 &\quad + \frac{|V_{m_i}^+|^2}{\hbar^2} \frac{2 - 2 \cos(\omega_{m_i} - \omega)t}{(\omega_{m_i} - \omega)^2} + \\
 &\quad + \frac{V_{m_i} [V_{m_i}^+]^+}{\hbar^2 V_{im}} \left[\frac{1 + e^{2i\omega t} - e^{i(\omega + \omega_{m_i})t} - e^{-i(\omega_{m_i} - \omega)t}}{(\omega + \omega_{m_i})(\omega_{m_i} - \omega)} \right] + \\
 &\quad + \frac{(V_{m_i}^+)(V_{m_i})}{\hbar^2} \left[\frac{1 + e^{-2i\omega t} - e^{-i(\omega + \omega_{m_i})t} - e^{i(\omega_{m_i} - \omega)t}}{(\omega + \omega_{m_i})(\omega_{m_i} - \omega)} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 4 \frac{|V_{m_i}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{(\omega_{m_i} + \omega)t}{2}}{(\omega + \omega_{m_i})^2} + 4 \frac{|V_{m_i}^+|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{(\omega_{m_i} - \omega)t}{2}}{(\omega_{m_i} - \omega)^2} + \\
 &\quad + \frac{V_{m_i} V_{im}}{\hbar^2} e^{i\omega t} \left\{ \frac{2 \cos \omega t - 2 \cos \omega_{m_i} t}{(\omega + \omega_{m_i})(\omega_{m_i} - \omega)} \right\} + \\
 &\quad + \frac{V_{im}^+ V_{m_i}^+}{\hbar^2} e^{-i\omega t} \left\{ \frac{2 \cos \omega t - 2 \cos \omega_{m_i} t}{(\omega + \omega_{m_i})(\omega_{m_i} - \omega)} \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 4 \frac{|V_{m_i}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{(\omega_{m_i} + \omega)t}{2}}{(\omega + \omega_{m_i})^2} + 4 \frac{|V_{m_i}^+|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{(\omega_{m_i} - \omega)t}{2}}{(\omega_{m_i} - \omega)^2} + \\
 &\quad + \frac{4}{\hbar^2} \frac{\sin \frac{(\omega_{m_i} + \omega)t}{2} \sin \frac{(\omega_{m_i} - \omega)t}{2}}{(\omega + \omega_{m_i})(\omega_{m_i} - \omega)} 2 \operatorname{Re} (V_{m_i} V_{im} e^{i\omega t})
 \end{aligned}$$

Conforme $t \rightarrow \infty$, $|c_n^{(1)}|^2$ tem um valor nulo para

$$W_{ni} + \omega \sim 0 \quad \text{ou} \quad E_n \sim E_i - \hbar\omega \quad (i)$$

$$^* \quad W_{ni} - \omega \sim 0 \quad \text{ou} \quad E_n \sim E_i + \hbar\omega \quad (ii)$$

No primeiro caso temos emissão estimulada de radiação e no segundo absorção

$$\begin{array}{cc} (i) & (ii) \\ E_i & E_n \\ \downarrow \hbar\omega & \uparrow \hbar\omega \\ E_n & E_i \end{array}$$

Em analogia com o caso do potencial constante

$$W_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|V_{ni}|^2} \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i - \hbar\omega} \quad (*)$$

$$W_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|V_{ni}^+|^2} \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i + \hbar\omega} \quad (**)$$

On seja $|V_{ni}|^2$ muda a probabilidade de emissão e $|V_{ni}^+|^2$ ~~muda~~ da absorção.

Como $|V_{ni}|^2 = |V_{in}^+|^2$ sempre vez por $V_{in}^+ = \langle i | V^+ | n \rangle = \langle n | V | i \rangle^+$

temos ~~então~~ então da (*) e (**)

$$\frac{\text{taxa de emissão para } i \rightarrow [n]}{\text{densidade de estados finais } [n]} = \frac{\text{taxa de absorção para } n \rightarrow [i]}{\text{densidade de estados finais } [i]}$$

onde no segundo caso $[i]$ é o estado final.

Portanto a probabilidade de transição é máxima no caso

a) potencial constante $\rho \Big|_{E_n \sim E_i}$

b) " harmônico $\rho \Big|_{E_n \sim E_i \pm \hbar\omega}$

Aplicações a interação com o campo clássico de radiação

Absorção e emissão estimuladas : Interação de um elétron atômico (livre) com o campo clássico de radiação

Desprezando termos em $|A|^2$ temos

$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c})^2}{2m} + e\phi(x) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A} + e\phi(x)$$

uma vez que $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$ pois estamos assumindo $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

Tomamos $\vec{A}$ como

$$\vec{A} = 2A_0 \hat{e} \cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot x - \omega t\right)$$

onde

$\hat{e}$ - polarização linear

$\hat{n}$ - direção de propagação

Como $\hat{e} \cdot \hat{n} = 0$ temos $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

Escrevendo

$$\vec{A} = 2A_0 \hat{e} \left[e^{i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot x - i\omega t} + e^{-i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot x + i\omega t} \right]$$

e dar

$$V(t) \equiv -\frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p} = -\frac{e}{mc} A_0 \hat{e} \cdot \vec{p} \left[e^{i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot x - i\omega t} + e^{-i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot x + i\omega t} \right]$$

Comparando com (5.6.39) nós vemos que o termo em $e^{-i\omega t}$ é responsável pela absorção e aquele em $e^{i\omega t}$ pela emissão.

Consideremos a absorção. Temos

$$V_{ni}^+ = -\frac{e A_0}{m c} \left(e^{i \frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right)_{ni}$$

e daí ~~obtemos a probabilidade de transição por unidade de tempo~~ $\delta(E_n - E_i - \hbar \omega)$

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2 c^2} |A_0|^2 |\langle n | e^{i \frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar \omega)$$

onde a função delta é colocada no mesmo sentido que em (5.6.35).

A seção de choque para absorção é

$$\sigma_{abs} \sim \frac{\text{Energia por unidade de tempo absorvida pelo átomo}}{\text{Fluxo de radiação do campo de radiação}}$$

$$[\sigma] = \frac{(E) T^{-1}}{(E) T^{-1} L^{-2}} \sim L^2 \text{ (área)}$$

O fluxo do campo e^- (c x densidade da energia)
 u

1

$$u = \frac{1}{2} \left(\frac{E_{max}^2}{8\pi} + \frac{B_{max}^2}{8\pi} \right)$$

$$1 \quad \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\vec{E} = 2 \frac{A_0 \omega}{c} \vec{E} \cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x} - \omega t\right)$$

$$\begin{aligned} \vec{B}_x &= \partial_y B_z - \partial_z B_y = -2 A_0 \left[B_z \frac{\omega}{c} \epsilon_z n_y - \frac{\omega}{c} \epsilon_y n_z \right] \sin\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x} - \omega t\right) \\ &= -2 \frac{A_0 \omega}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{n})_x \sin\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x} - \omega t\right) \end{aligned}$$

2

$$E_{max}^2 + B_{max}^2 = 8 \frac{|A_0|^2 \omega^2}{c^2} \Rightarrow u = \frac{1}{2\pi} |A_0|^2 \frac{\omega^2}{c^2}$$

2

$$\text{Fluxo} = c u = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c} |A_0|^2$$

Dar:

$$\sigma_{abs} = \frac{\hbar \omega \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2 c^2} |A_0|^2 |\langle m | e^{i(\omega/c) \hat{n} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_m - E_i - \hbar \omega)}{\frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c} |A_0|^2}$$

$$= \frac{4\pi^2 \hbar}{m^2 c \omega} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) |\langle m | e^{i \frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_m - E_i - \hbar \omega)$$

Como $\delta(E_m - E_i - \hbar \omega) = \frac{1}{\hbar} \delta(\omega_{mi} - \omega)$ e $\delta(\omega_{mi} - \omega)$ tem dimensões de T , temos

$$[\sigma] \sim \frac{T}{M^2} (M L T^{-1})^2 T = L^2$$

Aproximação de dipolo elétrico

No caso do comprimento de onda da radiação ser muito maior que as dimensões do átomo nós podemos aproximar a série

$$e^{i \frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x}} = 1 + i \frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x} + \dots$$

pelo primeiro termo da série, i.e. 1. A razão é que

$$\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi \nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \mathbf{x} \sim \frac{x}{\lambda}$$

Como calculamos elementos de matriz entre estados atômicos os valores de x que entram ~~em~~ em questão são da ordem da dimensão do átomo e daí $\frac{x}{\lambda} \ll 1$.

A frequência ω tem que ser tal que $\hbar \omega$ é da ordem do espaçamento dos níveis

Dai

$$\hbar \omega \sim \frac{Ze^2}{(a_0/Z)} \sim \frac{Ze^2}{R_{\text{atomo}}}$$

Então

$$\frac{c}{\omega} = \frac{\lambda}{2\pi} \sim \frac{\hbar c R_{\text{atomo}}}{Ze^2} \sim \frac{137 R_{\text{atomo}}}{Z}$$

Ou seja

$$\frac{R_{\text{atomo}}}{\lambda/2\pi} \sim \frac{Z}{137} \ll 1$$

Portanto precisamos ter átomos de número atômico pequeno.

Logo, dentro desta aproximação

$$\langle m | e^{i\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle = \hat{\mathbf{E}} \cdot \langle m | \hat{\mathbf{p}} | i \rangle$$

Tomando $\hat{\mathbf{E}}$ na direção x e escrevendo

$$\frac{i\hbar p_x}{m} = [x, H_0] \quad \text{onde} \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + e\phi$$

temos

$$\begin{aligned} \langle m | p_x | i \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \langle m | [x, H_0] | i \rangle = \frac{i m}{\hbar} \langle m | x E_i - E_m x | i \rangle \\ &= i m \omega_{mi} \langle m | x | i \rangle \end{aligned} \quad \left(\text{Por isto é chamada de} \right. \\ \left. \text{aprox. de dipolo} \right)$$

Usando as regras de seleção p/ dipolo:

$\hat{x}$ é um tensor esférico de rank 1 com $q = \pm 1$

devemos ter $m' - m = \pm 1$ e $|j'| - j| = 0, 1$

Se $\hat{\mathbf{E}}$ está na direção y a mesma regra vale

Se $\hat{\mathbf{E}}$ " " " " z , então $q=0$ e $m'=m$

Usando a aproximação de dipolo temos ($\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$)

$$\sigma_{abs} \sim 4\pi^2 \alpha \frac{E_x^2}{1} \frac{\omega_{ni}^2}{\omega} \delta(\omega - \omega_{ni}) \sim 4\pi^2 \alpha \omega_{ni} \delta(\omega - \omega_{ni}) |\langle n | x | i \rangle|^2$$

Portanto a seção de choque tem um pico ^{delta function} quando a frequência da radiação é igual ao espaçamento dos níveis. ($\omega \sim \frac{E_n - E_i}{\hbar} = \omega_{ni}$)
Quando i é o est. fund. $\omega_{ni} \gg 0$ ~

$$\int \sigma_{abs}(\omega) d\omega = \sum_n 4\pi^2 \alpha \omega_{ni} |\langle n | x | i \rangle|^2$$

Definir a "intensidade da oscilação" f_{ni} como

$$f_{ni} \equiv \frac{2m \omega_{ni}}{\hbar} |\langle n | x | i \rangle|^2$$

e daí

$$\begin{aligned} \sum_n f_{ni} &= \sum_n \frac{2m \omega_{ni}}{\hbar} \langle i | x | n \rangle \langle n | x | i \rangle \\ &= \frac{2m}{\hbar} \left\{ \sum_n \langle i | x \frac{(E_n - E_i)}{\hbar} | n \rangle \langle n | x | i \rangle + \sum_n \langle i | x \frac{(E_i - E_n)}{\hbar} | n \rangle \langle n | x | i \rangle \right\} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n \left\{ \langle i | [x, H_0] | n \rangle \langle n | x | i \rangle + \langle i | x | n \rangle \langle n | [H_0, x] | i \rangle \right\} \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \langle i | ([x, H_0] x) | i \rangle \end{aligned}$$

Mas

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

e daí

$$\boxed{\sum_n f_{ni} = 1}$$

Esta é a regra da soma de Thomas-Reiche-Kuhn

Note que esta regra não depende muito da forma da Hamiltoniana.

Potanto

$$\begin{aligned} \int \sigma_{abs}(\omega) d\omega &= \sum_n 4\pi^2 \alpha \hbar \omega_{ni} \frac{2m}{\hbar} |\langle n | x | i \rangle|^2 \frac{\hbar}{2m} \\ &= 4\pi^2 \alpha \frac{\hbar}{2m} = 2\pi^2 c \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \end{aligned}$$

O resultado é independente de $\hbar$, uma vez que esta é a regra da soma de oscilações conhecida em eletrodinâmica.

E o resultado é bastante independente da Hamiltoniana.

Efeito Fotoelétrico

Neste caso o elétron é excitado para fora do material e portanto temos uma transição entre um estado ligado $|i\rangle$ e um estado do espectro contínuo $|n\rangle$ ($E > 0$). Tal estado pode ser aproximado por uma onda plana. $|k_f\rangle$

A fórmula para $\sigma_{abs}(\omega)$ pode ser usada mas devemos fazer a integração usando a densidade de estados $\rho(E_n)$

Contagem dos estados finais:

- Usamos a normalização na caixa $\int_{\Omega} |\psi|^2 = 1$

- Impondo condições periódicas

Daí $\langle x | k_f \rangle = \frac{e^{i k_f x}}{L^{3/2}} \Rightarrow \frac{1}{L^3} \int_{-L/2}^{L/2} dx dy dz = 1$

~~$$\int_{-L/2}^{L/2} dx dy dz \frac{e^{i k_x x}}{L^{3/2}} \frac{e^{i k_y y}}{L^{3/2}} \frac{e^{i k_z z}}{L^{3/2}} = \frac{1}{L^3} \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy \int_{-L/2}^{L/2} dz = 1$$~~

=

As condições periódicas impõem:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

Portanto conforme $L \rightarrow \infty$ k torna-se um variável contínua.

O problema de contar os n: de estados é reduzido à contagem dos pontos dentro de um espaço tridimensional. Definimos

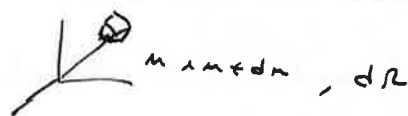
$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

Quando $L \rightarrow \infty$ podemos tratar n como uma variável contínua.

A energia está relacionada a k_f e n como

$$E = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 (2\pi)^2}{L^2}$$

Considera o elemento de volume



Seu volume é $n^2 dn d\Omega$

O n: de estados no intervalo E e $E + dE$ com direção em $d\Omega$ sendo k_f e-

$$\begin{aligned} n^2 d\Omega \frac{dn}{dE} dE &= \frac{L^2}{(2\pi)^2} k_f^2 d\Omega \frac{L}{2\pi} \frac{dk_f}{dE} dE \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m}{\hbar^2} k_f dE d\Omega \end{aligned}$$

Uma vez que

$$dE = \frac{\hbar^2 k_f}{m} dk_f$$

Portanto (integrando em E)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 k_f}{m^2 \omega} |\langle k_f | e^{i\omega/c \hat{n} \cdot \vec{x}} \hat{E} \cdot \vec{p} | i \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{m \hbar}{k_f^2}$$

Consideremos a emissão de um elétron da camada K . A função de onda i é aquela do est. fund. do hidrogênio com a_0 trocado por $\frac{a_0}{Z}$. Daí

$$\langle k_f | e^{i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{x}} \hat{E} \cdot \vec{p} | i \rangle = \hat{E} \cdot \int d^3x \frac{e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{x}}}{L^{3/2}} e^{i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{x}} (-i\hbar \vec{\nabla}) \left[e^{-Zr/a_0} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \right]$$

Integrando por partes e usando que

$$\hat{E} \cdot [\vec{\nabla} e^{i\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{x}}] = 0 \quad \text{uma vez que } \hat{E} \cdot \hat{n} = 0$$

e ainda

$$\vec{\nabla} e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{x}} = -i\vec{k}_f e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{x}}$$

obtemos

$$= \frac{\hbar \hat{E} \cdot \vec{k}_f}{L^{3/2}} \int d^3x e^{-i(\vec{k}_f - \frac{\omega}{c} \hat{n}) \cdot \vec{x}} e^{-Zr/a_0} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$$

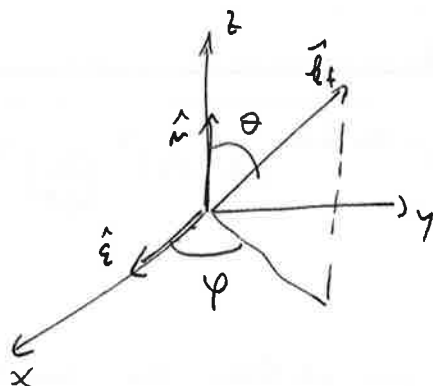
transf. de Fourier da função de onda

com respeito a $\vec{q} = \vec{k}_f - \frac{\omega}{c} \hat{n}$

Usando problema 39

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32 e^2 k_f \frac{(\hat{E} \cdot \vec{k}_f)^2}{m c \omega} \frac{Z^5}{a_0} \frac{1}{[Z^2/a_0^2 + q^2]^4}$$

Usando



$$(\hat{e} \cdot \hat{k}_f)^2 = k_f^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \quad \hat{k}_f \cdot \hat{n} = k_f \cos \theta$$

$$q^2 = k_f^2 - 2 k_f \frac{\omega}{c} \cos \theta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$$

e desta forma escrevemos $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em termos de θ e φ .

"Shift" da energia e largura de decaimento

Queremos saber agora o que ocorre a $c_i(t)$ sob a get de uma perturbação onde o índice i corresponde ao estado inicial.

Consideraremos uma variação suave na Hamiltoniana devido à perturbação. Em $t \rightarrow -\infty$ a perturbação se anula e ela evolui no tempo como

$$V(t) = e^{\eta t} V$$

V - independente do tempo

η - pequeno e positivo

Para $t \rightarrow -\infty$ temos que o estado inicial no rep. de interações é

$$|\alpha, t \rightarrow -\infty\rangle_I = |i\rangle$$

Primeiramente vejamos como a regra de ouro de Fermi pode ser derivada usando-se esta perturbação que é ligada suavemente. Usando a série de Dyson (ou Dirac) (5.6.17), temos p/ $m \neq i$

$$C_m^{(0)}(t) = 0$$

$$\begin{aligned} C_m^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} V_{mi} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t e^{\eta t'} e^{i\omega_{mi}t'} dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} V_{mi} \frac{e^{\eta t} e^{i\omega_{mi}t}}{\eta + i\omega_{mi}} \end{aligned}$$

Daí, em primeira ordem

$$|C_m(t)|^2 \sim |C_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{mi}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{mi}^2}$$

$$\text{e } \frac{d}{dt} |C_m(t)|^2 \sim \frac{2|V_{mi}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{mi}^2}$$

Tomando o limite $\eta \rightarrow 0$ e usando

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{mi}^2} = \pi \delta(\omega_{mi}) = \pi \hbar \delta(E_m - E_i)$$

obtemos

$$W_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i)$$

que é a regra de ouro de Fermi.

Calculamos $c_i(t)$. De (5.6.17)

$$c_i^{(0)} = 1$$

$$c_i^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{ii} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t e^{i\eta t'} = -\frac{i}{\hbar} V_{ii} e^{\eta t}$$

$$c_i^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{i\omega_{im}t'} V_{im} e^{\eta t'} e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi} e^{\eta t''} =$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m V_{im} V_{mi} \int_{-\infty}^t dt' \underbrace{e^{(\eta + i\omega_{im})t'} \frac{e^{(\eta + i\omega_{mi})t'}}{\eta + i\omega_{mi}}} = \frac{e^{2\eta t'}}{\eta + i\omega_{mi}}$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m V_{im} V_{mi} \frac{e^{2\eta t}}{2\eta(\eta + i\omega_{mi})}$$

e note $(V_{mi} = V_{im}^*, \text{ pois } V = V^\dagger)$

$$c_i^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

Soma as contribuições até 2ª ordem

$$c_i(t) \sim 1 - \frac{i}{\hbar} V_{ii} \frac{e^{\eta t}}{\eta} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

e

$$\frac{d c_i(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} V_{ii} e^{\eta t} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{\eta} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

Como $\frac{1}{1+\varepsilon} \equiv 1 - \varepsilon + O(\varepsilon^2)$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_i} \frac{dc_i}{dt} &= \left(1 + \frac{i}{\hbar} V_{ii} \frac{e^{\eta t}}{\eta} + O(V^2) \right) \left(-\frac{i}{\hbar} V_{ii} e^{\eta t} + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{\eta} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} V_{ii} e^{\eta t} - \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \end{aligned}$$

Fazendo $\eta \rightarrow 0$

$$\frac{\dot{c}_i}{c_i} = -\frac{i}{\hbar} V_{ii} - \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)} + O(V^3) \quad (5.8.9)$$

e portanto c_i independente do tempo até segunda ordem

Note que temos $c_m(-\infty) = 0$ $m \neq i$ e $c_i(-\infty) = 1$. Podemos renormalizar

c_m de tal modo que $c_i(0) = 1$. Utilizaremos o ansatz

$$c_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar} \quad \Rightarrow \quad \frac{\dot{c}_i}{c_i} = -\frac{i}{\hbar} \Delta_i \quad (5.8.10)$$

onde Δ_i é constante no tempo e em geral complexo.

Isto é consistente com (5.8.9) uma vez que o r.h.s. é constante.

Pela definição de $c_m(t)$

$$|\alpha(t)\rangle_I = \sum_m c_m(t) |m\rangle$$

temos então

$$|\alpha(t)\rangle_I = e^{-i\Delta_i t/\hbar} |i\rangle + \sum_{m \neq i} c_m(t) |m\rangle$$

e na representação de Schrödinger

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle_S &= e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha(t)\rangle_I = \\ &= e^{-i\Delta_i t/\hbar} e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle + \sum_{m \neq i} \end{aligned}$$

Portanto, como um resultado da perturbação, é como se o estado $|i\rangle$ passasse a ter uma energia

$$E_i + \Delta_i$$

Expandindo

$$\Delta_i = \Delta_i^{(1)} + \Delta_i^{(2)} + \dots$$

e Comparando (5.8.9) e (5.8.10). (Nota que a renormalização no ~~den.~~ altera $\tilde{c}_i/c_i$)

$$\Delta_i^{(1)} = V_{ii}$$

que é o mesmo resultado da teoria da perturbação independente do tempo.

Temos que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\epsilon} = \text{Pr.} \frac{1}{x} - i\pi \delta(x)$$

e daí

$$\text{Re}(\Delta_i^{(2)}) = \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{(E_i - E_m)}$$

$$\text{Im}(\Delta_i^{(2)}) = -\pi \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m)$$

A parte real de $\Delta_i^{(2)}$ corresponde à contribuição em 2ª ordem ao shift de energia na teoria $\bar{n}$ degenerada independente do tempo. A parte imaginária está ligada à vida do auto:

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq i} W_{i \rightarrow m} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m) \\ &= -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \Delta_i^{(2)} \end{aligned}$$

Definimos

$$T_i = -2 \text{Im} \Delta_i^{(2)}$$

e de (5.8.10) temos

$$|c_i|^2 = e^{-T_i t / \hbar}$$

Portanto T_i caracteriza a rapidez com a qual o estado $|i\rangle$ desaparece (decai)

Logo:

parte real de $\Delta_i \equiv$ associado ao shift de energia de $|i\rangle$

" imaginária " " " $\equiv$ " " a largura de decaimento de $|i\rangle$

A vida média da i é

$$\tau_i = \frac{t}{T_i}$$

uma vez que

$$|c_i|^2 = e^{-t/\tau_i}$$

T_i é chamada de largura porque ele é a largura da distribuição transformada de Fourier:

$$\int f(E) e^{-iEt/\hbar} dE = e^{-i[E_i + R_1 \Delta_i]t/\hbar - T_i^2 t/2\hbar}$$

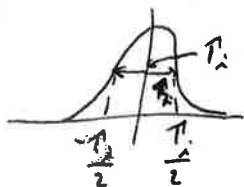
e daí

$$|f(E)|^2 \sim \frac{1}{[E - (E_i + R_1 \Delta_i)]^2 + T_i^2/4}$$

$$|f(E)|_{\max}^2 = \frac{4}{T_i^2} \Rightarrow \frac{1}{2} |f(E)|_{\max}^2 = \frac{2}{T_i^2} = \frac{1}{[E - (E_i + R_1 \Delta_i)]^2 + T_i^2/4}$$

$$\frac{2}{[E - (E_i + R_1 \Delta_i)]^2 + \frac{1}{2}} = 1 \Rightarrow [E - (E_i + R_1 \Delta_i)]^2 = \frac{T_i^2}{4}$$

$$E - (E_i + R_1 \Delta_i) = \pm \frac{T_i}{2}$$



Esta ~~dis~~ distribuição pode ser generalizada para o caso do potencial dependente de t quando $\gamma \rightarrow 0$. No caso da perturbação harmônica basta substituir

$$E_{n(m)} - E_i \rightarrow E_{n(m)} - E_i \pm \hbar \omega$$

Partículas idênticas

Classicamente nós podemos fazer uma ~~distinção~~ distinção entre partículas similares (que têm as mesmas propriedades físicas como por ex. dois elétrons). Isto porque podemos acompanhar precisamente as suas trajetórias em cada instante de tempo.

Na Mecânica Quântica isto não é possível. Se tentarmos medir a posição exatamente em um dado ~~em~~ instante nós podemos dizer nada sobre a posição da partícula no instante seguinte (infinitesimalmente próximo) pois não conhecemos o momento. Portanto em M.Q. partículas idênticas são indistinguíveis. Podemos dizer que a identidade ^(igualdade) ~~das~~ de dois elétrons faz com que cada um tenha sua própria identidade.

Considere duas partículas denotadas por 1 e 2. Seja $|u\rangle_1$ o ket da partícula 1 onde u simboliza um conjunto completo de observáveis. ~~Então~~ Analogamente $|u''\rangle_2$ é o ket da partícula 2. O ket das duas é

$$|u\rangle_1 |u''\rangle_2$$

De maneira análoga poderíamos ter

$$|u''\rangle_2 |u\rangle_1$$

Apesar das partículas serem indistinguíveis os dois kets são matematicamente diferentes. Eles são na verdade ortogonais.

Suponha que façamos uma medida do sistema de duas partículas e obtemos k' para uma e k'' para outra. No entanto, não sabemos qual dos estados temos $|k'>|k''>$ ou $|k''>|k'>$.

Na verdade todos os estados da forma

$$c_1 |k'>|k''> + c_2 |k''>|k'>$$

fornecem o mesmo resultado quando a medida é feita.

Isto é chamado de "degenerescência da troca".

Isto acarreta um problema: ~~os~~ os autovalores de um conjunto completo de observáveis não são suficientes para especificar o estado!!

^{definimos}
Nós ~~definimos~~ o op. de permutação como

$$P_{12} |k'>|k''> = |k''>|k'>$$

$$\text{Temos } P_{12} = P_{21} \quad \text{e} \quad P_{12}^2 = 1$$

Sob a troca: $\left\{ \begin{array}{l} \text{partícula 1 com } k' \text{ vai para partícula 1 com } k'' \\ \text{" 2 " } k'' \text{ " " " 2 " } k' \end{array} \right.$

ou então $\left\{ \begin{array}{l} \text{partícula 1 com } k' \text{ vai " " 2 com } k' \\ \text{" 2 " } k'' \text{ " " " 1 " } k'' \end{array} \right.$

Considere o caso de um sistema de duas partículas onde o ket é completamente especificado por uma observável A .

$$A_1 |a'>|a''> = a' |a'>|a''>$$

$$A_2 |a'>|a''> = a'' |a'>|a''>$$

Aplicando P_{12} nos dois lados

$$\begin{aligned} P_{12} A_1 P_{12}^{-1} P_{12} |a'\rangle |a''\rangle &= a' P_{12} |a' b' |a''\rangle = \\ &= P_{12} A_1 P_{12}^{-1} |a''\rangle |a'\rangle = a' |a''\rangle |a'\rangle \end{aligned}$$

Mas isto implica que

$$A_2 = P_{12} A_1 P_{12}^{-1}$$

Considere a Hamiltoniana de um sistema de 2 part. ident.

Os op. devem aparecer simetricamente, por exemplo

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V_{\text{par}}(|x_1 - x_2|) + V_{\text{ext}}(x_1) + V_{\text{ext}}(x_2)$$

A Hamiltoniana é invariante pela troca e daí

$$P_{12} H P_{12}^{-1} = H \Rightarrow P_{12} H = H P_{12}$$

Logo P_{12} é uma const. de movimento. Os autovalores são ± 1 .

Portanto os estados ~~são~~ ^{são} simétricos (ou ~~se~~ antisimétricos) pela troca. e são para qualquer tempo.

Os autoestados de P_{12} são

$$|k'k''\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle)$$

$$|k'k''\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle |k''\rangle - |k''\rangle |k'\rangle)$$

Definimos o simetrizador e antisimetrizador

$$S_{12} = \frac{1}{2} (1 + P_{12})$$

$$A_{12} = \frac{1}{2} (1 - P_{12})$$

Quando aplicado no estado o resultado é simétrico ou anti-simétrico:

$$\begin{aligned} & \begin{Bmatrix} S_{12} \\ A_{12} \end{Bmatrix} [c_1 |k^1\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k^1\rangle] = \\ &= \frac{1}{2} [c_1 |k^1\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k^1\rangle] \pm \frac{1}{2} [c_1 |k''\rangle |k^1\rangle + c_2 |k^1\rangle |k''\rangle] \\ &= \frac{c_1 \pm c_2}{2} |k^1\rangle |k''\rangle \pm \frac{c_1 \pm c_2}{2} |k''\rangle |k^1\rangle \end{aligned}$$

Podemos estender a definição da P_{12} para qualquer número de partículas:

$$\begin{aligned} P_{ij} |k^1\rangle |k^2\rangle \dots |k^i\rangle |k^{i+1}\rangle \dots |k^j\rangle \dots &= \\ &= |k^1\rangle |k^2\rangle \dots |k^j\rangle |k^{i+1}\rangle \dots |k^i\rangle \dots \end{aligned}$$

$$P_{ij}^2 = 1$$

No entanto, em geral $[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0$

Ex:

$$P_{23} P_{12} |k^1\rangle |k^2\rangle |k^3\rangle = |k^2\rangle |k^3\rangle |k^1\rangle$$

$$P_{12} P_{23} |k^1\rangle |k^2\rangle |k^3\rangle = |k^3\rangle |k^1\rangle |k^2\rangle$$

No caso de 3 part. existem $3! = 6$ pos. possíveis.

On sejo uma degenerescência de dim 6. No entanto existe somente um estado totalmente simétrico e outro totalmente anti-simétrico

$$\begin{aligned} |k^1 k^2 k^3\rangle_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ |k^1\rangle |k^2\rangle |k^3\rangle \pm |k^2\rangle |k^1\rangle |k^3\rangle + \right. \\ &\quad + |k^2\rangle |k^3\rangle |k^1\rangle \pm |k^3\rangle |k^1\rangle |k^2\rangle + \\ &\quad \left. + |k^3\rangle |k^2\rangle |k^1\rangle \pm |k^1\rangle |k^3\rangle |k^2\rangle \right\} \end{aligned}$$

Elas são auto-estados simultâneos de P_{12} , P_{23} e P_{13} , apesar destes não comutarem entre si. A rigor diz-se que:

O comutador de dois deles é a diferença de duas permutações cíclicas. Os estados $|k'k''k'''\rangle_{\pm}$ são aniquilados por tal permutação.

Definimos o operador

$$P_{\begin{pmatrix} 123 \\ 231 \end{pmatrix}} |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle = |k''\rangle |k'''\rangle |k'\rangle$$

Temos $P_{123} = P_{12} P_{13}$

Podemos definir $P_{\begin{pmatrix} 123 \\ 312 \end{pmatrix}} = P_{13} P_{12}$

$$P_{13} P_{12} |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle = |k'''\rangle |k'\rangle |k''\rangle$$

E então

$$[P_{12}, P_{13}] = P_{\begin{pmatrix} 123 \\ 231 \end{pmatrix}} - P_{\begin{pmatrix} 123 \\ 312 \end{pmatrix}} \quad (\text{esta op. aniquila } |k'k''k'''\rangle_{\pm})$$

Quando dois conjuntos de autovalores se iguam temos

$$|k'k'k''\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|k'k'k''\rangle + |k'k''k'\rangle + |k''k'k'\rangle \right)$$

A normalização é $\sqrt{\frac{2!}{3!}} = \frac{1}{\sqrt{3}}$

Em geral temos

$$\sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots N_m!}{N!}}$$

onde N - total de part

N_i - " de vezes $|k_i\rangle$ aparece.

Postulado da simetria

(9)

Na natureza sistemas contendo N partículas ou são totalmente simétricos ou totalmente antisimétricos pela troca de qualquer par.

No caso simétrico as partículas são chamadas bósons e satisfazem a estatística de Bose-Einstein.

No caso antisimétrico as partículas são chamadas férmions e satisfazem a estatística de Fermi-Dirac.

$$P_{ij} |N \text{ bósons idênticos}\rangle = + |N \text{ bósons idênticos}\rangle$$

$$P_{ij} |N \text{ férmions idênticos}\rangle = - |N \text{ férmions idênticos}\rangle$$

É um fato empírico que a uma simetria mista nos ocorre na natureza.

Existe uma conexão entre spin e estatística.

Spin semi-inteiro $\Rightarrow$ férmions

Spin inteiro $\Rightarrow$ bósons.

Ex:

$\left. \begin{matrix} {}^3\text{He} \\ e^- \\ p \end{matrix} \right\}$ férmions

$\left. \begin{matrix} {}^4\text{He} \\ \pi^\pm \\ \pi^0 \end{matrix} \right\}$ bósons.

Na Mcl relativística a regra spin/estatística é uma lei empírica. Em Mcl relativística isto pode ser deduzido dos postulados da teoria.

No entanto esta é uma lei exata da Natureza (até agora) e não há conhecidas exceções.

Uma consequência imediata do fato ser uma fermião é o Princípio de exclusão de Pauli: dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado, ou seja não podem ter os mesmos autovalores de um conjunto completo de observáveis.

Isto porque $|k'\rangle |k'\rangle$ é simétrico.

A Tabela Periódica dos elementos é construída na verdade em cima desta princípio.

Para um sistema de 2 elétrons temos que no caso fermiônico existe somente um estado.

$$\frac{1}{2} (|k'\rangle |k''\rangle - |k''\rangle |k'\rangle)$$

Para bosões existe 3

$$|k'\rangle |k'\rangle, |k''\rangle |k''\rangle, \text{ e } \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle)$$

No caso da estatística de Maxwell-Boltzmann temos 4 estados,

$$|k'\rangle |k'\rangle, |k''\rangle |k''\rangle, |k'\rangle |k''\rangle, |k''\rangle |k'\rangle$$

Para temperaturas baixas, a diferença entre férmions e bósons é mais dramática

^4He tende a ficar no mesmo estado para temp. baixas, isto é a chamada condensação de Bose-Einstein.

Quimicamente ^3He é análogo a ^4He mas estes não ~~tem~~ sofrem condensação a baixas temperaturas.

Sistema de dois elétrons

O estado do sistema tem que ser antissimétrico pela troca dos elétrons uma vez que eles são férmions.

$$P_{12}|\alpha\rangle = -|\alpha\rangle$$

Os fatos podem ser especificados por $\vec{x}_1, \vec{x}_2, m_{s_1}$ e m_{s_2} que são os vetores posição e componente z do spin dos elétrons 1 e 2. A função de onda pode ser escrita como:

$$\psi_{s_1 s_2}(x_1, x_2) = \sum_{m_{s_1}, m_{s_2}} C(m_{s_1}, m_{s_2}) \langle x_1, m_{s_1}, x_2, m_{s_2} | \alpha \rangle$$

Se a Hamiltoniana comuta com S_{Tot}^2 (spin total quadrado) então esperamos que as autofunções de H sejam autofunções de S_{Tot}^2 e daí

$$\psi = \phi(x_1, x_2) \chi$$

A função de onda de spin pode ser

$$\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) = \begin{cases} \chi_{++} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{+-} + \chi_{-+}) \\ \chi_{--} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{+-} - \chi_{-+}) \end{cases} \begin{matrix} \text{triplete (simétrico)} \\ \\ \\ \text{singlete (antisimétrico)} \end{matrix}$$

A razão do tripleto ser simétrico é

$$P_{12} (S_{1-} + S_{2-}) P_{12}^{-1} = (S_{1-} + S_{2-})$$

onde $S_{-}|+\rangle = |-\rangle$, $S_{-}|-\rangle = 0$ e o op. step que diminui a componente z de uma unidade.

Então se $|\alpha\rangle$ tem autovalor λ sob P_{12}

$$P_{12}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle \quad (\lambda = \pm 1)$$

segue que

$$(S_{1-} + S_{2-})P_{12}|\alpha\rangle = P_{12}(S_{1-} + S_{2-})|\alpha\rangle$$

$$|\alpha'\rangle = (S_{1-} + S_{2-})|\alpha\rangle$$

tem o mesmo autovalor

$$P_{12}|\alpha'\rangle = (S_{1-} + S_{2-})P_{12}|\alpha\rangle = \lambda(S_{1-} + S_{2-})|\alpha\rangle = \lambda|\alpha'\rangle$$

Começando com $|+\rangle|+\rangle$ obtemos

$$(S_{1-} + S_{2-})|+\rangle|+\rangle = |-\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle$$

$$(S_{1-} + S_{2-})^2|+\rangle|+\rangle = 2|-\rangle|-\rangle$$

Note que

$$\langle x_1, m_{s_1}; x_2, m_{s_2} | P_{12} | \alpha \rangle = \langle x_2, m_{s_2}; x_1, m_{s_1} | \alpha \rangle$$

e o fato de estarmos tratando com férmions implica

$$\langle x_1, m_{s_1}; x_2, m_{s_2} | \alpha \rangle = - \langle x_2, m_{s_2}; x_1, m_{s_1} | \alpha \rangle$$

Podemos escrever P_{12} como

$$P_{12} = P_{12}^{(espacial)} P_{12}^{(spin)}$$

$\uparrow \qquad \qquad \uparrow$
troca $\uparrow$ troca
coordenadas spin

No caso do spin podemos escrever

$$P_{12}^{(spin)} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{4}{\hbar^2} S_1 \cdot S_2 \right\}$$

Uma vez que

$$\begin{aligned} S_1 \cdot S_2 &= \frac{1}{2} S_{TOT}^2 - \left(\frac{S_1^2 + S_2^2}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} S_{TOT}^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \end{aligned}$$

$S_{1\pm}, S_{2\pm}$ e $S_{2\pm}, S_{2\pm}$ formam dois $SU(2)$ que comutam entre si ($SU(2) \times SU(2)$)

O $SU(2)$ diagonal e' uma subalgebra ~~em~~ $(S_{1\pm} + S_{2\pm}), (S_{1z} + S_{2z})$

Os estados simetricos formam um tripleto sob o $SU(2)$ diagonal e o estado antisimetrico forma um singlete

$$(S_{1+} + S_{2+}) (|1+\rangle |1-\rangle - |1-\rangle |1+\rangle) = |1+\rangle |1+\rangle - |1+\rangle |1+\rangle = 0$$

$$(S_{1-} + S_{2-}) (|1+\rangle |1-\rangle - |1-\rangle |1+\rangle) = |1-\rangle |1-\rangle - |1-\rangle |1-\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} (S_{1z} + S_{2z}) (|1+\rangle |1-\rangle - |1-\rangle |1+\rangle) &= \frac{1}{2} |1+\rangle |1-\rangle - \frac{1}{2} |1+\rangle |1-\rangle - \left(-\frac{1}{2} |1+\rangle |1+\rangle - \left(\frac{1}{2} \right) |1-\rangle |1-\rangle \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Logo $S_{TOT}^2 = S(S+1)\hbar^2$ e

$$\begin{cases} 2\hbar^2 & \text{tripleto } (S=1) \\ 0 & \text{singlete } (S=0) \end{cases}$$

e dai $S_1 \cdot S_2 = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{4} & \text{tripleto} \\ -\frac{3}{4}\hbar^2 & \text{singlete} \end{cases}$

Portanto

$$P_{12}^{(\text{spin})} |\text{tripleta}\rangle = \frac{1}{2} (1 + 1) |\text{tripleta}\rangle = |\text{tripleta}\rangle$$

$$P_{12}^{(\text{spin})} |\text{singleta}\rangle = \frac{1}{2} (1 - 3) |\text{singleta}\rangle = -|\text{singleta}\rangle$$

É claro que o efeito de P_{12} em ψ é $\begin{cases} \phi(x_1, x_2) \rightarrow \phi(x_2, x_1) \\ \chi(m_{s1}, m_{s2}) \rightarrow \chi(m_{s2}, m_{s1}) \end{cases}$

Portanto

Se ϕ é antisimétrica $\Rightarrow \chi$ é simétrica

" ϕ " simétrica $\Rightarrow \chi$ é antisimétrica

De qualquer maneira $\phi(x_1, x_2)$ dá a probabilidade de encontrar os elétrons no espaço

$$|\phi(x_1, x_2)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \equiv \text{Probabilidade de encontrar o elétron 1 no volume } d^3x_1 \text{ e o elétron 2 em } d^3x_2$$

$\uparrow$ $\uparrow$
 centrado em x_1 centrado em x_2

Considere dois elétrons que não interagem entre si, e que mas têm interação de spin com potencial externo. Então

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V_{\text{ext}}(x_1) + V_{\text{ext}}(x_2) \right] \psi = E \psi$$

Esta equação é separável

$$\psi = \phi \chi \quad \text{onde} \quad \phi(x_1, x_2) = \omega_A(x_1) \omega_B(x_2)$$

Como $[S_{\text{tot}}^2, H] = 0$ a parte de spin deve ser um tripleto ou antitripleto. Daí a parte espacial deve ter simetria da finida

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \underbrace{w_A(x_1) w_B(x_2) \pm w_A(x_2) w_B(x_1)}_{\substack{+ \text{ spin singlet} \\ - \text{ spin tripleto}}} \right\}$$

Daí

$$\begin{aligned} \phi(x_1, x_2) d^3x_1 d^3x_2 &= \frac{1}{2} \left\{ |w_A(x_1)|^2 |w_B(x_2)|^2 + |w_A(x_2)|^2 |w_B(x_1)|^2 \right. \\ &\quad \left. \pm 2 \operatorname{Re} [w_A(x_1) w_B(x_2) w_A(x_2)^* w_B(x_1)^*] \right\} d^3x_1 d^3x_2 \\ &\quad \uparrow \\ &\quad \text{chamado densidade de troca.} \end{aligned}$$

Se os elétrons estão

tripleto de spin $\Rightarrow$ probabilidade de encontrá-los muito próximos é bastante baixa
elétrons se repelem

singlet de spin $\Rightarrow$ probabilidade de ~~se~~ encontrá-los muito próximos aumenta devido densidade de troca
elétrons se atraem

~~Porta~~ Por esta razão diz-se que existe uma interação de troca (exchange interaction) entre os elétrons devido a sua indistingüibilidade.

A questão da identidade dos elétrons sempre é importante quando a densidade de troca é não desprezível. Ou seja quando existe uma superposição ~~dos~~ espacial dos estados w_A e w_B

Suponha que $\left\{ \begin{array}{l} \psi_A \sim 0 \text{ na região } B \\ \psi_B \sim 0 \text{ " " } A \end{array} \right\}$ de tal forma que as regiões A e B não tenham interseção.

Tomando $d^3x_1 \in A$ e $d^3x_2 \in B$ vemos que o único termo importante é

$$|\psi_A(x_1)|^2 |\psi_B(x_2)|^2$$

que é a probabilidade das partículas distinguíveis.

Portanto não há necessidade de antisimetrizar a função de onda quando os elétrons estão bastante separados.

A acrescentar página 103. a aqui

Átomo de Hélio

A hamiltoniana é

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

onde $r_1 = |\vec{x}_1|$ e $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$

Se a interação Coulombiana entre os elétrons $(\frac{e^2}{r_{12}})$ for desprezada a função de onda será o produto de duas funções de onda do átomo de H com $Z=2$ (ao invés de $Z=1$). Isto é, claro se a identidade das partículas for desprezada.

O spin total é conservado e a paridade o estado será singlete ou tripleto

No caso de um dos elétrons estar no estado fundamental
Segue que a função de onda espacial é dada por

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{100}(x_1) \psi_{n\ell m}(x_2) \pm \psi_{n\ell m}(x_1) \psi_{100}(x_2) \right\}$$

↑
estado tripleto de spin
" singlete " "

~~At~~

O estado fundamental corresponde aos dois elétrons no estado $n=1, \ell=0$, ou seja $1s^2$. Naturalmente a função de onda espacial não pode ser anti-simétrica. Portanto o estado fundamental é singlete de spin.

Daí

$$\psi_{100}(x_1) \psi_{100}(x_2) \chi_{\text{singlete}} = \frac{z^3}{\pi a_0^3} e^{-2(r_1+r_2)/a_0} \chi \quad (6.4.3) \quad (z=2)$$

A energia deste estado é ($2 \times$ energia est. fund. átomo H $(z=2)$)
(desprezando int. Coulombiana entre elétrons)

$$E = 2 \times 4 \left(\frac{-e^2}{2a_0} \right)$$

Isto é 30% maior que o valor experimental

Vamos agora considerar o termo $V = \frac{e^2}{r_{12}}$ como uma perturbação e aplicar teoria das perturbações usando (6.4.3) como função de onda não perturbada

Mais sobre a interação de troca

Consideremos um sistema consistindo de duas partículas idênticas.

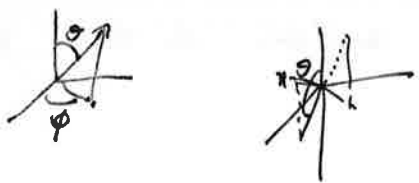
Resolvendo a eq. de Schrodinger nós encontramos uma série de níveis de energia, cada um correspondendo a uma dada função de onda de coordenada $\phi(r_1, r_2)$. Estas funções devem ser simétricas ou antisimétricas.

Caso de spin zero. A função de onda de spin destas partículas não existe, ou seja $s=1$. Portanto $\phi(r_1, r_2)$ deve ser simétrica uma vez que eles são bósons.

Logo nem todas ~~as~~ as soluções da eq. de Schrodinger são permitidas. Ou seja as soluções antisimétricas são excluídas.

Por outro lado a troca das duas partículas corresponde à inversão de coordenadas. Uma vez que a origem pode ser tomada como o ponto médio da linha passando pelas duas.

Sob uma inversa $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$ temos em coord. esféricas $r \rightarrow r$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\phi \rightarrow \pi + \phi$



A dependência angular da função de onda é

$$\begin{aligned} Y_l^m &\sim P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \rightarrow P_l^m(-\cos\theta) e^{im(\pi+\phi)} = \\ &= (-1)^{l-m} P_l^m(\cos\theta) (-1)^m e^{im\phi} \\ &= (-1)^l Y_l^m \end{aligned}$$

Portanto a função de onda transforma como

$$\phi(r_1, r_2) = (-1)^L \phi(r_2, r_1)$$

Logo o sistema de duas partículas idênticas de spin zero deve ter momento angular orbital par

Caso de spin $\frac{1}{2}$

A função de onda como vimos é

$$\phi(r_1, r_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$$

e deve ser antisimétrica com respeito a troca das partículas.

Como vimos a função de spin χ simétrica corresponde a um triplete e portanto tem spin total igual a 1. e a

A função de spin antisimétrica corresponde ao $\uparrow$ spin total igual a zero uma vez que é um singlete.

Logo a função de onda espacial somente pode ser simétrica quando o spin total é nulo e antisimétrica quando o spin total é 1.

Portanto dado o valor do spin total, nem todas as soluções da eq. de Schrödinger são permitidas.

Ou seja o valor da energia do sistema de duas partículas depende do spin total.

Por isso chamamos esta dependência da energia no spin como interação de troca.

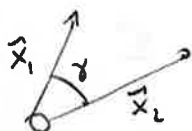
Temos

$$\Delta_{1s^2} = \langle 0 | V | 0 \rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \frac{z^6}{\pi^2 a_0^6} e^{-2z(r_1+r_2)/a_0} \frac{e^2}{r_{12}}$$

Escrevemos

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos \gamma)$$

onde $r_>$ ($r_<$) é o maior (menor) de r_1 e r_2 , γ é o ângulo entre $\vec{x}_1$ e $\vec{x}_2$.



Usamos o fato que

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2)$$

$$\int Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} 4\pi \delta_{l0} \delta_{m0}$$

$$\Delta_{1s^2} = \int r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \frac{z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} e^{-2z(r_1+r_2)/a_0} *$$

$$* \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi}} 4\pi \right)^2 \delta_{l0} \delta_{m0}$$

$$= \int r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \frac{z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} e^{-2z(r_1+r_2)/a_0} \frac{1}{r_>} (4\pi)^2$$

Temos

$$\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \frac{1}{r_2} e^{-2z(r_1+r_2)/a_0} =$$

$$= \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} \frac{r_2^2}{r_1} e^{-2z(r_1+r_2)/a_0} + \int_{r_1}^\infty r_2^2 dr_2 \frac{1}{r_2} e^{-2z(r_1+r_2)/a_0} \right\} =$$

$$= \frac{5}{128} \frac{a_0^5}{z^5}$$

e então

$$\Delta_{1s^2} = \frac{z^4 a_0 e^2}{\pi^2 a_0^4} (4\pi)^2 \frac{5}{128} \frac{a_0^5}{z^5} = \frac{z \cdot 16 \cdot 5}{128} \frac{e^2}{a_0}$$

$$\Delta_{1s^2} = \frac{5}{4} \frac{e^2}{a_0}$$

Daí

$$E = E^{(0)} + \Delta_{1s^2} = \left(-8 + \frac{5}{2}\right) \left(\frac{e^2}{2a_0}\right) \sim -74.8 \text{ eV}$$

O valor experimental é

$$E_{\text{exp}} = -78.8 \text{ eV.}$$

Uso do método Variacional

Usamos z como parâmetro Variacional

A razão é que o valor efetivo de z é menor ^{que z} uma vez que um electron faz o "screening" para o outro

Como "trial function" usamos

$$\langle x_1, x_2 | \tilde{0} \rangle = \frac{(Z_{eff})^3}{\pi a_0^3} e^{-Z_{eff}(r_1 + r_2)/a_0}$$

e daí

$$\langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle \equiv H = \langle \tilde{0} | \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} | \tilde{0} \rangle - \langle \tilde{0} | \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} | \tilde{0} \rangle + \langle \tilde{0} | \frac{e^2}{r_{12}} | \tilde{0} \rangle$$

↑ este cálculo é idêntico ao anterior
e fornece $(Z_{eff} \frac{5}{8} \frac{e^2}{a_0})$

$$= Z \left(Z_{eff}^2 - 2Z Z_{eff} + \frac{5}{8} Z_{eff} \right) \left(\frac{e^2}{a_0} \right)$$

$$\frac{dH}{dZ_{eff}} = 2Z_{eff} - 2Z + \frac{5}{8} = 0 \Rightarrow Z_{eff} = 2 - \frac{5}{16} = 1,6875$$

Daí

$$H_{min} = -77,5 \text{ eV}$$

E portanto obtemos um valor melhor que o da perturbação em 1ª ordem.

Estados excitados

Considere um elétron $1(0)$ e outro $(n\ell)$ a mesma distância a energia como

$$E = E_{100} + E_{n\ell m} + \Delta E$$

onde ΔE é a contribuição do termo $\frac{e^2}{r_{12}}$

Usando teoria de perturbação em 1ª ordem com as funções perturbadas

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{100}(x_1) \psi_{n1m}(x_2) + \psi_{n1m}(x_1) \psi_{100}(x_2) \} \chi_{\text{singleto}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(x_1) \psi_{n1m}(x_2) - \psi_{n1m}(x_1) \psi_{100}(x_2)] \chi_{\text{triplete}}$$

Daí

$$\Delta E = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 [\psi_{100}(x_1) \psi_{n1m}(x_2) \pm \psi_{n1m}(x_1) \psi_{100}(x_2)]^2 \frac{e^2}{r_{12}}$$

$$= I \pm J \quad \begin{cases} \text{Simbol} + \Rightarrow \text{singleto} \\ \text{"} - \Rightarrow \text{triplete} \end{cases}$$

onde

$$I = \int d^3x_1 d^3x_2 |\psi_{100}(x_1)|^2 |\psi_{n1m}(x_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}}$$

$$J = \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_{100}(x_1)^* \psi_{n1m}^*(x_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{n1m}(x_1) \psi_{100}(x_2)$$

Tanto I como J são positivos

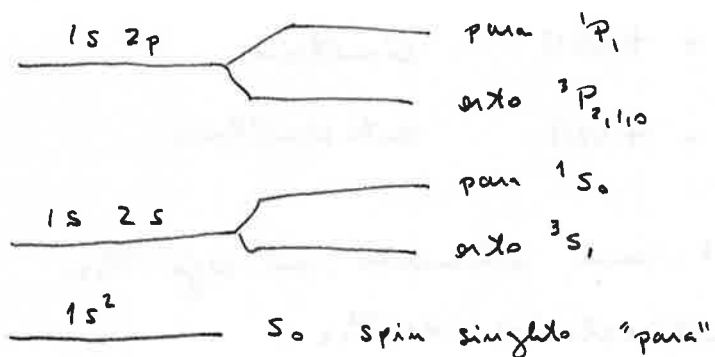
Portanto o estado singleto tem energia mais alta.

A razão é:

Singleto $\Rightarrow$ função de onda simétrica $\Rightarrow$ elétrons tendem a ficar próximo.
 $\Rightarrow$ repulsão eletrostática é maior.

Triplete $\Rightarrow$ ocorre o oposto.

Hélio singleto é chamado para Hélio
" triplete " " orto Hélio



Nota que apesar da Hamiltoniana não conter termos de interação de spin a energia depende da configuração dos spins. Isto se deve à identidade das partículas.

Os spins paralelos correspondem ao estado de menor energia e portanto têm energia mais baixa. Os spins antiparalelos ocorrem nos dois ~~casos~~ casos orto e para.

Acredita-se que a origem do ferromagnetismo seja da mesma natureza apesar de ser difícil de explicar a partir de primeiros princípios. (ferromagnetismo $\equiv$ tendência dos spins em alinharem-se paralelamente)

Simetria de permutação e Tableaux de Young

(A. Young 1901)

No estudo de partículas idênticas nós sempre estaremos usando o grupo de permutações. Denotaremos tal grupo por S_n (grupo de permutações de n elementos)

Existem uma ~~muitas~~ notações para os estados de uma dada representação do S_n em termos de diagramas.

Estes são os diagramas ou tableaux de Young.

Considere o caso de duas partículas. Temos duas funções de onda:

$$\psi_S = \psi(12) + \psi(21) \quad \text{simétrica}$$

$$\psi_A = \psi(12) - \psi(21) \quad \text{antisimétrica}$$

O grupo S_2 tem apenas um elemento, ou seja P_{12} .

Tanto ψ_S como ψ_A são autoestados de P_{12}

$$P_{12} \psi_S = \psi_S, \quad P_{12} \psi_A = -\psi_A$$

~~Portanto~~ Como ψ_A e ψ_S não se misturam sob a ação de P_{12} eles pertencem a representações irreduzíveis distintas de S_2 .

Na verdade ψ_A e ψ_S ~~se~~ formam a base da rep. irred. unidimensional de S_2 .

Denotaremos ψ_A e ψ_S por ~~dois~~ dois "quadrados" da seguinte maneira

$$\psi_S \equiv \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array}$$

$$\psi_A = \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}$$

Cada quadrado corresponde a uma partícula

No caso de apenas uma partícula temos apenas um quadrado $\square$.

~~Estes são os~~

Ao passarmos para o caso de mais partículas adotaremos a convenção que "quadrados" ~~se~~ em uma linha representam estados totalmente simétricos e em uma coluna estados totalmente antisimétricos.

No caso de 3 partículas temos

$\psi_S = \begin{bmatrix} \square & \square & \square \end{bmatrix}$ estado totalmente simétrico;

$\psi_A = \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix}$ " " antisimétrico

Temos ainda estados de simetria mista, ou seja, simétrico nas partículas 1 e 2, por exemplo, e antisimétrico nas partículas 1 e 3.

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{bmatrix} &\equiv \frac{(1 - P_{13})}{2} \frac{(1 + P_{12})}{2} \psi(123) = \\ &= \frac{(1 - P_{13})}{2} \{ \psi(123) + \psi(213) \} \\ &= \frac{1}{4} \{ \psi(123) - \psi(321) + \psi(213) - \psi(312) \} \end{aligned}$$

Adotaremos a convenção que as simetrizações são feitas antes das antisimetrizações.

Adotaremos também a convenção que uma linha nunca é mais longa que a linha acima dela.

Nota. A notação que estamos usando, ou seja $\psi(12\dots n)$ pode ser interpretada de várias maneiras.

Se a partícula 1 está no estado a , 2 no b etc então

$$\psi(1,2,3) = a(1)b(2)c(3)$$

$$\text{e daí } \psi(2,1,3) = a(2)b(1)c(3)$$

Note que se tentarmos antisimetrizar com relação a 23 obtemos

$$(1-P_{23})(1-P_{13})(1+P_{12})\psi(123) =$$
$$= \psi(123) - \psi(132) - \cancel{\psi(321)} + \cancel{\psi(312)} + \psi(213) - \psi(231)$$
$$- \cancel{\psi(312)} + \cancel{\psi(321)}$$

On seja a simetria em 1-2 ainda existe mas a antisimetria em 1-3 e 2-3 deixaram de existir.

Isto está relacionado com o seguinte fato

~~$P_{12}P_{13} = P_{13}P_{23} = P_{12}P_{23} = P_{123}$~~

$$P_{12}P_{13} = P_{13}P_{23} = P_{123}$$

$\begin{pmatrix} 123 \\ 231 \end{pmatrix}$

$\begin{matrix} 123 \rightarrow 321 \rightarrow 231 \\ 123 \rightarrow 132 \rightarrow 231 \end{matrix}$

Daí se tivermos

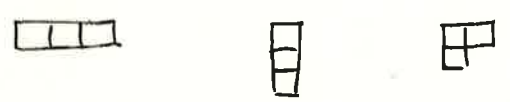
$$P_{12}\psi = \psi \quad P_{13}\psi = -\psi \quad P_{23}\psi = -\psi$$

obtemos

$$P_{12}P_{13}\psi = -\psi \quad P_{13}P_{23}\psi = \psi$$

o que é um absurdo.

Isto dá uma idéia de que para três partículas os únicos estados que podemos ter são



e portanto a justaposição de "quadrados" forma todas as configurações possíveis. (Se a simetria em 12 e antisimetria em 13 e 23 fosse possível construiríamos uma forma de diagrama que não é possível pela justaposição de quadrados)

Note que ao simetrizarmos as linhas e depois antisimetrizarmos as colunas nós, em geral, perdemos a simetria das linhas.

Exemplo: Considere o diagrama

1	2
3	4

Simetrizando a 1ª linha

$$+(1234) + (2134)$$

Simetrizando a 2ª linha

$$+(1234) + (1243) + (2134) + (2143)$$

Antisim. 1ª coluna

$$\begin{aligned} &+(1234) - (3214) + (1324) - (3241) \\ &+ (2134) - (2314) + (2143) - (2341) \end{aligned}$$

Antisim 2ª coluna

$$\begin{aligned} &+(1234) - (1432) - (3214) + (3412) \\ &+ (1243) - (1423) - (3241) + (3421) \\ &+ (2134) - (4132) - (2314) + (4312) \\ &+ (2143) - (4123) - (2341) + (4321) \end{aligned}$$

A simetria em 122 desapareceu (já existe o parêntese de $+(1432)$ por exemplo)
e também a simetria em 324 (" " " " " " " ")

Os ~~anexos~~ estados totalmente simétricos ou antisimétricos de S_n são base de representações irreduzíveis unidimensionais de S_n .

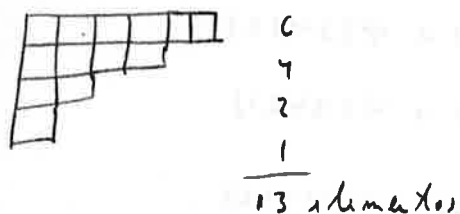
No entanto as outras rep. irred. são em geral multidimensionais.

Por representações nós queremos dizer de um conjunto de estados com uma dada simetria que não pode ser aumentada, ou seja fazê-lo com uma permutação em um dos estados obtém uma combinação linear dos demais ou outro zero.

Para construir tais simetrias mistas nós usamos o diagrama de Young.

Dado N partículas ou N variáveis, nós dividimos elas em conjuntos de $N_1, N_2, \dots$ ~~de~~ elementos tal que $N_1 + N_2 + \dots = N$.

Representamos cada um desses conjuntos por um linho de N_i quadradinhos.



Os números $1, 2, 3, \dots, N$ são então colocados nestes quadradinhos.

As linhas são colocadas de tal forma que ~~uma~~ ^{uma linha} não contenha mais quadradinhos que a linha de cima.

Simetrizamos então os estados com relação às variáveis de cada linho. Daí antisimetrizamos com relação às variáveis de cada coluna.

Se fizermos o contrário, anti-sim. e depois sim, obtemos estados que poderiam ser escritos como comb. lineares dos anteriores.

Variando a distribuição dos números no diagrama obtemos na série de estados que transformam um nos outros sob a ação de qualquer permutação.

No entanto nem todas estas funções são linearmente independentes.

A cada diagrama temos então associado um tipo de simetria com respeito as permutações.

Construindo todos os diagramas possíveis, construímos todos os tipos de simetria.

Isto é equivalente a encontrar todos os modos de escrever n como a soma de inteiros.

Ex: $n=4$ $4, 3+1, 2+2, 2+1+1, 1+1+1+1$ (5 modos)

Consideremos a função de onda de spin $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$

Os tipos de simetria são dados pelos diagramas de Young também.

Questão: Dado o diagrama de função de onda espacial qual o diagrama da função de onda de spin?

Spin inteiro funções completas dadas por ^{totalmente} simetria

Portanto simetria de ϕ e χ deve ser dada pelo mesmo diagrama

Spin semi inteiro funções completas ^{totalmente} anti-simétricas

Daí simetria de ϕ dada por diagrama que corresponde a troca de linhas por colunas no diagrama de χ .

Caso spin $1/2$ $\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n$ tem valores $\pm 1/2$

Para ~~esta~~ função χ pode ser antisimétrica com relação a permutação de spins, uma vez que antisimetrizar conjunto com variáveis repetidas dá zero.

Logo o diagrama de χ para elétrons pode conter colunas com 2 quadradinhos no máximo. Consequentemente o diagrama de ϕ pode ter linhas de no máximo 2 quadradinhos.

Logo o n.º de simetrias possíveis para um conjunto de N elétrons é o n.º de modos de escrever N como a soma de 1's e 2's

Ex: 4 $\Rightarrow$ $1+1+1+1$, $2+1+1$, $2+2$

No caso de N ser par seja n : $\frac{1}{2} N + 1$

" " " " " ímpar " " " $\frac{1}{2} (N + 1)$

Cálculo da dimensão da representação

~~Para saber~~

Para cada diagrama de Young com n "quadradinhos" nós temos associado uma representação irreduzível do grupo S_n .

Para calcular a dimensão desta representação nós usamos o conceito de "arranjo standard".

Neste arranjo colocamos números inteiros positivos nos quadradinhos tal que ~~os números~~

i) os números não diminuem quando vamos da esquerda para a direita em uma linha.

ii) os n.ºs ~~se~~ crescem quando vamos da cima para baixo em uma coluna.

Estes n:ls ~~de~~ podem por exemplo denotar estados que uma partícula pode ocupar

Ex: Considerem diagramas para ~~três~~ duas partículas com três estados permitidos. Os arranjos standard para o diagrama simétrico são:

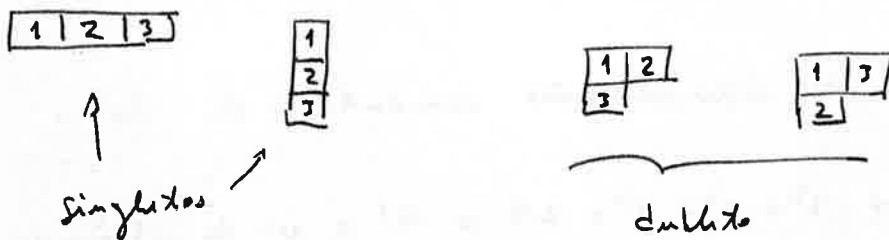
$\boxed{1\ 1}$ $\boxed{1\ 2}$ $\boxed{1\ 3}$ $\boxed{2\ 2}$ $\boxed{2\ 3}$ $\boxed{3\ 3}$

Para o anti simétrico

$\boxed{1\ 2}$ $\boxed{1\ 3}$ $\boxed{2\ 3}$

Para calcular a dimensão da representação associada a um dado diagrama nós contamos o nº possível de arranjos standard.

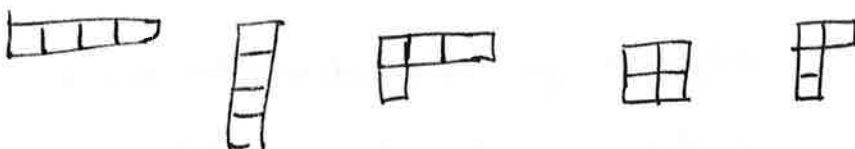
Ex: três partículas idênticas com três estados possíveis.



Pode-se mostrar que se uma $\ast$ representação irreductível de S_n tem dimensão N , então existem N representações destas (ou seja de n dimensão N) No entanto tais representações são equivalentes.

Exemplo de S_4

Os diagramas de Young são:



Os arranjos standard s₄:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \dim = 1$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & & \end{array} \quad \dim = 3$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \dim = 2$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline 2 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline 3 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline 4 \\ \hline \end{array} \quad \dim = 3$$

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array} \quad \dim = 1$$

Portanto o n.º de representações irredundantes de S_4 é

$$1 + 1 + 3^2 + 3^2 + 2^2 = 24 = 4! = \text{n.º de elementos de } S_4$$

No entanto o n.º de representações irredundantes inequivalentes é igual ao n.º de diagramas de Young

Para um grupo finito o n.º de representações irredundantes inequivalentes é igual ao n.º de classes de equivalência.

Classe de equivalência -

que são conjugados,

conjunto de ~~átomos~~ elementos do grupo

elementos conjugados -

digamos, que dois elementos a e b

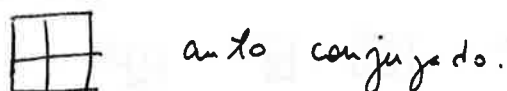
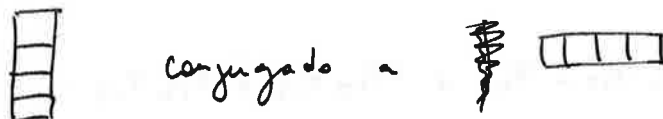
são conjugados se existir um elemento u tal que

$$u^{-1} a u = b$$

Diagramas conjugados

O diagrama conjugado a um dado diagrama é aquele obtido ~~trocando~~ trocando-se as linhas pelas colunas.

Ex:



Diagramas conjugados correspondem a representações inequivalentes da mesma dimensão

Bases das representações de S_3 (exemplo)

1)

Neste caso temos apenas uma função na base. A totalmente simétrica. Ou seja

$$\psi_3 = \boxed{1 \ 2 \ 3} = S_{123} abc$$

onde $S_{123} = 1 + P_{12} + P_{13} + P_{23} + P_{13}P_{12} + P_{12}P_{23}$

e então

$$\psi_3 = abc + bac + cba + acb + \cancel{cab} + bca$$

- 2) $\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$ Neste caso também temos apenas uma função, e totalmente antisimétrica.

$$\psi_a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = A_{123} abc$$

onde

$$A_{123} = 1 - P_{12} - P_{13} - P_{23} + P_{13}P_{12} + P_{12}P_{13}$$

e então

$$\psi_a = abc - bac - cba - acb + cab + bca$$

- 3) $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$ Neste caso a rep. tem dimensão 2 pois existem dois arranjos standard $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$

No entanto podemos construir 4 funções linearmente independentes. Estas são ($S_{ij} = 1 + P_{ij}$ e $A_{ij} = 1 - P_{ij}$)

$$\psi_1 = A_{13} S_{12} abc = abc + bac - cba - cab$$

$$\psi_2 = A_{23} S_{12} abc = abc + bac - acb - bca$$

$$\psi_3 = A_{12} S_{13} abc = abc + cba - bac - bca$$

$$\psi_4 = A_{23} S_{13} abc = abc + cba - acb - cab$$

Podemos construir funções usando S_{23} mas estas seriam linearmente dependentes destas.

Estas quatro funções não são ortogonais. Considere

$$\psi = \psi_1 - 2\psi_2 = 2acb + 2bca - abc - bac - cba - cab$$

Pode-se verificar que atuando-se com qualquer combinação das permutações P_{ij} em ψ_1 e ψ_2 obtemos funções que podem ser escritas como ~~combinações~~ combinação linear delas.

Logo ψ_1 e ψ_2 formam uma rep. dublêta de S_3 .

Construímos outras duas funções

$$\phi = 2\psi_3 + \frac{1}{2}\psi_1 + \frac{1}{2}\psi_2$$

$$= 2abc - 2bac + cba - cab + acb - bca$$

$$\chi = \frac{1}{3}(4\psi_4 - \psi_1 + \psi_2 - \phi)$$

$$= -acb + bca - cab + cba$$

ϕ e χ também formam um dublêta de simetria mista.

Temos então duas representações singletos inequivalentes e dois dubletos equivalentes. Portanto temos $1+1+2+2=6$ funções linearmente independentes.

Construção de funções de onda para bósons e férmions com funções de onda espacial e de spin com simetria mista

Como dissemos anteriormente se a função de onda espacial está associada a um dado diagrama de Young então a função de onda de spin deve estar

a) associada ao mesmo diagrama no caso de bósons

b) " " diagrama conjugado no caso de férmions.

Consideremos o caso de três partículas (S_3).

Os elementos de S_3 são

$$1, P_{12}, P_{13}, P_{23}, P_{12}P_{13} \text{ e } P_{13}P_{12}$$

e temos ainda

$$P_{12}P_{23} = P_{13}P_{12} = P_{23}P_{13}$$

$$P_{23}P_{12} = P_{12}P_{13} = P_{13}P_{23}$$

Tomemos a base de rep. duplto

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\psi_1 = A_{12} S_{12} abc = abc + bac - cba - cab$$

$$\psi_2 = A_{23} S_{12} abc = abc + bac - acb - bcc$$

Pode verificar que:

$$\cancel{\psi_1}$$

$$P_{12} \psi_1 = \psi_2$$

$$P_{13} \psi_1 = -\psi_1$$

$$P_{23} \psi_1 = \psi_1 - \psi_2$$

$$P_{12} \psi_2 = \psi_1$$

$$P_{13} \psi_2 = \psi_2 - \psi_1$$

$$P_{23} \psi_2 = -\psi_2$$

Tomemos agora uma cópia desta representação como base χ_1 e χ_2 para a função de onda de spin.

Usando o ~~operador~~ simetrizador

$$S_{123} = 1 + P_{12} + P_{13} + P_{23} + P_{12}P_{13} + P_{13}P_{12}$$

Vemos que a função de onda.

$$\psi = (S_{123} \otimes S_{123}) \psi_1 \chi_1 =$$

$$= \psi_1 \chi_1 + \psi_2 \chi_2 + \psi_1 \chi_1 + (\psi_1 - \psi_2)(\chi_1 - \chi_2) + (\psi_2 - \psi_1)(\chi_2 - \chi_1) + \psi_2 \chi_2$$

$$= 4\psi_1 \chi_1 + 4\psi_2 \chi_2 - 2\psi_1 \chi_2 - 2\psi_2 \chi_1$$

é totalmente simétrica pela troca de quaisquer duas partículas.

Por outro lado se considerarmos o antisimetrizador

$$A_{123} = 1 - P_{12} - P_{13} - P_{23} + P_{12}P_{13} + P_{13}P_{12}$$

obtemos que a função de onda

$$\phi = (A_{123} \otimes A_{123}) \psi_1 \chi_1 =$$

$$= \cancel{\psi_1 \chi_1} - \cancel{\psi_2 \chi_2} - \cancel{\psi_1 \chi_1} - (\cancel{\psi_1 - \psi_2})(\cancel{\chi_1 - \chi_2}) + (\cancel{\psi_2 - \psi_1})(\cancel{\chi_2 - \chi_1}) + \cancel{\psi_2 \chi_2} = 0$$

é nula.

Para obter a função de onda totalmente antisimétrica

precisamos tomar a função de onda espacial na

up doublet

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

e a função de onda de spin na

up doublet

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Segunda quantização

O caso da estatística de Bose

Este é um método para tratar um sistema de muitas partículas idênticas interagindo de alguma maneira.

Em teoria quântica relativística isto é usado uma vez que o n.º de partículas varia.

Denotamos por $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi) \dots$ um conjunto completo ortogonal e normalizado de funções de onda. Estas podem ser por exemplo estados estacionários de uma única partícula em um campo externo. (ξ denota as coordenadas e spin)

Este campo externo é arbitrário, ele não precisa ser o ~~campo~~ campo a que as partículas estão submetidas na realidade. Incluiremos apenas um conjunto completo de funções.

Considere um sistema de N partículas não interagentes neste campo. Cada partícula vai estar em um dado estado.

Seja N_i o n.º de partículas no estado ψ_i

Então
$$\sum_i N_i = N.$$

Se os inteiros $N_1, N_2 \dots$ são dados o estado do sistema como um todo está determinado.

Indicaremos estas n.º. n.º. funções de onda total como $\Psi_{N_1, N_2, \dots}$

Incluiremos construir um formalismo matemático onde o n.º de ocupação tem o papel de variáveis independentes.

No caso de bósons a função de onda é:

$$\Psi_{N_1, N_2, \dots} = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}} \sum \psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N)$$

Onde $p_1, p_2, \dots, p_N$ são n.ºs que indicam em que estado as partículas estão. A soma é sobre todas as permutações destes n.ºs que são diferentes. Nós temos N_i índices $p_1, p_2, \dots, p_N$ que têm o mesmo valor i .

O n.º ^{total} de termos ~~total~~ na soma é

$$\frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_N!}$$

Portanto a função $\Psi_{N_1, \dots, N_N}$ está normalizada devido ao fator numérico e a ortogonalidade dos ψ_i 's.

Considere um operador $f_a^{(1)}$ associado a uma grandeza física da partícula a . Isto é, ele atua somente em funções de ξ_a . Introduzimos o operador

$$F^{(1)} = \sum_a f_a^{(1)}$$

que é simétrico com relação à troca de partículas. ~~total~~
 Note ~~que~~ $f^{(1)}$ descreve a mesma grandeza física para todas as partículas. ~~total~~

Denotaremos

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(\xi) f^{(1)} \psi_k(\xi) d\xi$$

que é independente de a , uma vez que estamos integrando em ξ .
 (integrando nas coordenadas e soma nos spins).

~~unphysical~~

$$\langle 3, 0, 0 \dots | F''' | 2, 1, 0 \dots \rangle = \int d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \star \frac{1}{\sqrt{3}} \star$$

$$\begin{aligned} & \star \left\{ \psi_1^*(\xi_1) f_1''' \psi_1(\xi_1) \psi_1^*(\xi_2) \psi_1(\xi_2) \cancel{\psi_1^*(\xi_3) \psi_2(\xi_3)} + \right. \\ & + \psi_1^*(\xi_1) f_1''' \psi_2(\xi_1) \cancel{\psi_1^*(\xi_2) \psi_2(\xi_2)} \psi_1^*(\xi_3) \psi_1(\xi_3) + \\ & + \psi_1^*(\xi_1) f_1''' \psi_2(\xi_1) \psi_1^*(\xi_2) \psi_1(\xi_2) \psi_1^*(\xi_3) \psi_1(\xi_3) + \\ & + \psi_1^*(\xi_1) \psi_1^*(\xi_1) \psi_1^*(\xi_2) f_2''' \psi_1(\xi_2) \cancel{\psi_1^*(\xi_3) \psi_2(\xi_3)} + \\ & + \psi_1^*(\xi_1) \psi_1(\xi_1) \psi_1^*(\xi_2) f_2''' \psi_2(\xi_2) \psi_1^*(\xi_3) \psi_1(\xi_3) + \\ & + \cancel{\psi_1^*(\xi_1) \psi_2(\xi_1)} \psi_1^*(\xi_2) f_2''' \psi_1(\xi_2) \psi_1^*(\xi_3) \psi_1(\xi_3) + \\ & + \psi_1^*(\xi_1) \psi_1(\xi_1) \psi_1^*(\xi_2) \psi_1(\xi_2) \psi_1^*(\xi_3) f_3''' \psi_2(\xi_3) + \\ & + \psi_1^*(\xi_1) \psi_1(\xi_1) \psi_1^*(\xi_2) \cancel{\psi_2(\xi_2)} \psi_1^*(\xi_3) f_3''' \psi_1(\xi_3) + \\ & \left. + \psi_1^*(\xi_1) \cancel{\psi_2(\xi_1)} \psi_1^*(\xi_2) \psi_1(\xi_2) \psi_1^*(\xi_3) f_3''' \psi_1(\xi_3) \right\} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} \{ f_{12} + f_{12} + f_{12} \} = \sqrt{3} f_{12}$$

Em geral temos

$$\langle \dots N_i \dots (N_{k-1}-1) \dots | F''' | \dots (N_i-1) \dots N_k \dots \rangle = f_{i,k}''' \sqrt{N_i N_k} \quad (*)$$

Os elementos diagonais são

$$\langle N_1 \dots N_N | F''' | N_1 \dots N_N \rangle = \sum_i f'''_{ii} N_i \quad (**)$$

Introduzimos operadores A_i que têm um papel fundamental na 2ª quantização. Eles atuam nas funções de coordenadas mas nas variáveis $N_1, N_2, \dots$ e são definidos como:

A_i diminui N_i de uma unidade quando atua em $\Psi_{N_1 \dots N_N}$ e multiplica por $\sqrt{N_i}$.
ou seja:

$$A_i \Psi_{N_1, N_2, \dots, N_N} = \sqrt{N_i} \Psi_{N_1, \dots, (N_i-1), \dots, N_N}$$

A_i diminui o n_i de partículas no estado N_i de uma unidade (operador de destruição)

Em notação matricial temos

$$(A_i)_{N_i}^{N_i-1} = \sqrt{N_i}$$

O operador A_i^+ é o conjugado hermitiano de A_i e portanto

$$(A_i^+)_{N_i}^{N_i+1} = [(A_i)_{N_i}^{N_i-1}]^*$$

ou seja

$$(A_i^+)_{N_i}^{N_i+1} = \sqrt{N_i+1}$$

Dai

$$A_i^+ \Psi_{N_1, \dots, N_N} = \sqrt{N_i+1} \Psi_{N_1, N_2, \dots, N_i+1, \dots}$$

A_i^+ é operador de criação. Ele cria uma partícula no estado N_i .

O produto $A_i^+ A_i$ atuando em $\psi_{N_1 \dots N_N}$ multiplica por uma constante simplesmente com altera N_i . Temos:

$$\begin{aligned} A_i^+ A_i \psi_{N_1 \dots N_N} &= A_i^+ \sqrt{N_i} \psi_{N_1 \dots (N_i-1) \dots} \\ &= N_i \psi_{N_1 \dots N_N} \end{aligned}$$

De maneira análoga

$$\begin{aligned} A_i A_i^+ \psi_{N_1 \dots N_N} &= A_i \sqrt{N_i+1} \psi_{N_1 \dots (N_i+1) \dots} \\ &= (N_i+1) \psi_{N_1 \dots N_N} \end{aligned}$$

Podemos então escrever

$$A_i^+ A_i = N_i \quad , \quad A_i A_i^+ = N_i + 1$$

Portanto

$$[A_i, A_i^+] = A_i A_i^+ - A_i^+ A_i = 1$$

Para índices diferentes os operadores A_i e A_i^+ comutam

$$[A_i, A_j] = [A_i^+, A_j^+] = [A_i, A_j^+] = 0 \quad i \neq j$$

Pois

$$A_i A_j^+ \psi_{N_1 \dots N_N} = \sqrt{N_j+1} \sqrt{N_i} \psi_{N_1 \dots (N_j+1) \dots (N_i-1) \dots}$$

$$A_j^+ A_i \psi_{N_1 \dots N_N} = \sqrt{N_i} \sqrt{N_j+1} \psi_{N_1 \dots (N_j+1) \dots (N_i-1) \dots}$$

Note que se $N_i = 0$ temos.

$$A_i \psi_{N_1 \dots N_N} = \sqrt{0} \psi_{N_1 \dots (N_i-1) \dots N_N} = 0$$

ou seja a amplitude $\psi_{N_1 \dots N_N}$.

Das eqs (*) e (**) vemos que podemos escrever:

$$F''' = \sum_{i,k} f'''_{ik} A_i^+ A_k$$

Pois

$$\begin{aligned} (A_i)_N^{N'} &= \sqrt{N_i} \delta_{N', N_i-1} \delta_{N, N_i} \\ (A_i^+)_N^{N'} &= \sqrt{N_i} \delta_{N', N_i} \delta_{N, N_i-1} \\ (A_i^+)_N^{N'} (A_j)_N^{N''} &= \sqrt{N_i} \delta_{N', N_i} \delta_{N, N_i-1} \sqrt{N_j} \delta_{N'', N_j-1} \delta_{N, N_j} \end{aligned}$$

$$\langle N'_1 N'_2 \dots | F''' | N_1 N_2 \dots N_N \rangle = \sum_{i,j} f'''_{ik} \langle N'_1 \dots | A_i^+ A_k | N_1 \dots \rangle$$

$$= \sum_{\substack{i,k \\ i \neq k}} f'''_{ik} \sqrt{N_k} \sqrt{N_{i+1}} \langle N'_1 \dots | N_1 \dots \hat{N}_k (N_k-1) \dots (N_{i+1}) \dots \rangle + \dots$$

~~onde~~ ~~obtemos~~

$$+ \sum_{i \neq k} f'''_{ii} N_i \langle N'_1 \dots | N_1 \dots \rangle$$

e obtemos então os mesmos elementos da matriz que em (*) e (**).

Este resultado é muito importante pois

- a) fin são simplesmente números
- b) conseguimos escrever um operador que atua nas coordenadas em termos de operadores que atuam no n.º de ocupação.

Este resultado pode ser generalizado para operadores que tenham outra forma. Por exemplo, considerem

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a>b} f^{(2)}_{ab}$$

Onde $f^{(2)}_{ab}$ é um operador que está associado a uma grandeza física que relacionada a duas partículas. Ou seja ele atua em funções de ξ_a e ξ_b .

Fazendo cálculos semelhantes vemos que este operador pode ser escrito como:

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq k \neq l \neq m} (f^{(2)})^{ik}_{lm} A_i^* A_k^+ A_m A_l$$

onde

$$(f^{(2)})^{ik}_{lm} = \iint \psi_i^*(\xi_1) \psi_k^*(\xi_2) f^{(2)} \psi_l(\xi_1) \psi_m(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2$$

Da maneira análoga podemos generalizar isto para operadores que dependam de 3 ou mais partículas.

Vamos escrever a Hamiltoniana em termos dos operadores A e A^+ . Na aproximação não relativística a Hamiltoniana de N part. idênticas é independente dos spins e pode

Se representada na forma geral

$$H = \sum_a H_a^{(1)} + \sum_{a>b} U^{(2)}(r_a, r_b) + \sum_{a>b>c} U^{(3)}(r_a, r_b, r_c) \dots$$

Onde $H_a^{(1)}$ é a parte que depende das coordenadas da partícula a somente.

$$H_a^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_a + U_a^{(1)}(r_a)$$

↑
potencial externo de uma partícula.

Os demais termos correspondem a interações entre as partículas.

Temos então que

$$H = \sum_{i,k} H_{ik}^{(1)} A_i^+ A_k + \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} (U^{(2)})_{iklm} A_i^+ A_k^+ A_l A_m + \dots$$

Se não existir interações entre as partículas temos

$$H = \sum_{i,k} H_{ik}^{(1)} A_i^+ A_k$$

Tomando ψ_i como autoestados de $H^{(1)}$ a matriz

$H_{ik}^{(1)}$ fica diagonal e daí

$$H = \sum_i \epsilon_i A_i^+ A_i$$

↑
energia da partícula no estado ψ_i

e consequentemente

$$H = \sum_i \epsilon_i N_i$$

que é um resultado um tanto quanto óbvio.

Introduzimos as operações

$$\Phi(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi) A_i, \quad \Phi^+(\xi) = \sum_i \psi_i^*(\xi) A_i^+$$

onde ξ é considerado como parâmetro.

Φ diminui o número total de partículas ~~em~~ 1 unidade
 Φ^+ aumenta " " " " " " " "

É fácil ver que o operador $\Phi^+(\xi_0)$ cria uma partícula no ponto ξ_0 . A razão é que o operador A_i^+ cria uma

~~$$\Phi^+(\xi_0) \Phi(\xi) = \sum_i \psi_i^*(\xi_0) \psi_i(\xi) A_i^+ A_i$$~~

partícula em um estado com função de onda $\psi_i(\xi)$. Por $\Phi^+(\xi_0)$ cria uma partícula com função de onda

$$\sum_i \psi_i^*(\xi_0) \psi_i(\xi) = \delta(\xi - \xi_0)$$

↑
som. sobre
conjunto completo.

Ou seja Φ^+ cria partícula com função de onda que é uma função delta e daí vive em um ponto definido.

Regras de comutação.

$$\Phi(\xi) \Phi(\xi') - \Phi(\xi') \Phi(\xi) = 0$$

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{r}) \Phi^\dagger(\mathbf{r}') - \Phi^\dagger(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}) &= \sum_{i,j} \psi_i(\mathbf{r}) \psi_j^*(\mathbf{r}') (A_i A_j^\dagger - A_j^\dagger A_i) \\ &= \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\end{aligned}$$

$$[\Phi(\mathbf{r}), \Phi(\mathbf{r}')] = [\Phi^\dagger(\mathbf{r}), \Phi^\dagger(\mathbf{r}')] = 0$$

$$[\Phi(\mathbf{r}), \Phi^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

A expressão para F''' fica:

$$F''' = \int d\mathbf{r} \Phi^\dagger(\mathbf{r}) f''' \Phi(\mathbf{r}) \quad (***)$$

pois

$$\begin{aligned}&= \int d\mathbf{r} \sum_{i,j} \psi_i^*(\mathbf{r}) f''' \psi_j(\mathbf{r}) A_i^\dagger A_j \\ &= \sum_{i,j} f_{i,j}''' A_i^\dagger A_j\end{aligned}$$

Da mesma maneira

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \iint \Phi^\dagger(\mathbf{r}) \Phi^\dagger(\mathbf{r}') f^{(2)} \Phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

Para uma grande física que é simplesmente uma função de $\mathbf{r}$, $f(\mathbf{r})$ temos que (***) fica

$$F = \int f(\mathbf{r}) \Phi^\dagger(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Portanto $\Phi^\dagger(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ é o n.º de partículas no intervalo $\mathbf{r}$ e $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$.

A Hamiltoniana em termos de Φ e $\Phi^\dagger$ fica:

$$H = \int \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Phi^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \Phi(\mathbf{r}) + U''(\mathbf{r}) \Phi^\dagger \Phi + \quad (6.25)$$
$$+ \frac{1}{2} \iint \Phi^\dagger(\mathbf{r}) \Phi^\dagger(\mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \dots$$

Onde foi feita uma integração por partes e usou-se

$$H'' = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U''.$$

Interpretação de (6.25):

Suponha que tenhamos um sistema de partículas onde todos estão no estado $\psi(\mathbf{r})$ ($\int |\psi|^2 d\mathbf{r} = N$)

Se substituirmos Φ por ψ em (6.25) obtemos a energia média do sistema.

Portanto obtemos a seguinte regra para obter a Hamiltoniana na 2ª quantização:

A expressão para a energia média é escrita em termos de funções de onda de uma partícula cometa. Para substituímos, estas funções pelo operador Φ .

O hermitiano conjugado $\Phi^\dagger$ é colocado à esquerda de Φ .

O caso da estatística de Fermi

No caso de férmions a função de onda total é totalmente antisimétrica

$$\psi_{N_1, N_2, \dots} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{P_1}(\epsilon_1) & \psi_{P_2}(\epsilon_2) & \dots & \psi_{P_N}(\epsilon_N) \\ \psi_{P_2}(\epsilon_1) & \psi_{P_2}(\epsilon_2) & \dots & \psi_{P_2}(\epsilon_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{P_N}(\epsilon_1) & \psi_{P_N}(\epsilon_2) & \dots & \psi_{P_N}(\epsilon_N) \end{vmatrix}$$

Neste caso temos um problema de sinal na definição de $\psi_{N_1, N_2, \dots}$. Para isto numeramos os estados ψ_i , de uma dada maneira (e não mudamos mais esta escolha) e completamos as linhas do determinante de tal modo que

$$P_1 < P_2 < P_3 < \dots < P_N$$

Nas colunas temos funções de variáveis diferentes, na ordem $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_N$. É claro que dois números P_i 's não podem ser iguais, pois a função (determinante) se anula.

Desta forma temos que N_i pode ser 0 ou 1.

Analogamente ao caso bósons definimos

$$F''' = \sum_a f'''_a$$

Novamente os únicos elementos da matriz ~~matricial~~ ^{matricial} deste operador são os diagonais, e aqueles onde o nº de ocupação é diminuído ou aumentado de uma unidade.

Consideremos o caso de 3 partículas no estado

$$\psi_{101001} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \psi_1(\xi_3) \\ \psi_3(\xi_1) & \psi_3(\xi_2) & \psi_3(\xi_3) \\ \psi_6(\xi_1) & \psi_6(\xi_2) & \psi_6(\xi_3) \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ \psi_1(\xi_1) \psi_3(\xi_2) \psi_6(\xi_3) + \psi_3(\xi_1) \psi_6(\xi_2) \psi_1(\xi_3) + \psi_6(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \psi_3(\xi_3) \right. \\ \left. - \psi_6(\xi_1) \psi_3(\xi_2) \psi_1(\xi_3) - \psi_1(\xi_1) \psi_6(\xi_2) \psi_3(\xi_3) - \psi_3(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \psi_6(\xi_3) \right\}$$

Calculamos o ~~val~~ valor esperado de F'''

$$\overline{F'''} = \langle 101001... | F''' | 101001... \rangle =$$

$$= \frac{1}{6} \left\{ \underbrace{f_{11}'''' + f_{33}'''' + f_{66}'''' + f_{66}'''' + f_{11}'''' + f_{33}''''}_{\text{estes vêm de } \langle f_i'''' \rangle} + 2 \text{ vezes a mesma coisa} \right\}$$

estes de $\langle f_2'''' \rangle$ e $\langle f_3'''' \rangle$

$$= f_{11}'''' + f_{33}'''' + f_{66}''''$$

É fácil ver que no caso geral temos

$$\overline{F'''} = \sum_i f_{ii}'''' N_i$$

onde $N_i = 0$ ou 1

Vejam os agora os elementos fora da diagonal. Como dissemos eles somente serão não nulos quando os n.ºs de ocupação diferirem de ± 1

Para isso consideremos a função

$$\psi_{001011\dots} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_3(x_1) & \psi_3(x_2) & \psi_3(x_3) \\ \psi_5(x_1) & \psi_5(x_2) & \psi_5(x_3) \\ \psi_6(x_1) & \psi_6(x_2) & \psi_6(x_3) \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ \psi_3(x_1) \psi_5(x_2) \psi_6(x_3) + \psi_5(x_1) \psi_6(x_2) \psi_3(x_3) + \psi_6(x_1) \psi_3(x_2) \psi_5(x_3) \right.$$

$$\left. - \psi_6(x_1) \psi_5(x_2) \psi_3(x_3) - \psi_3(x_1) \psi_6(x_2) \psi_5(x_3) - \psi_5(x_1) \psi_3(x_2) \psi_6(x_3) \right\}$$

Calculamos

$$\langle 101001\dots | F''' | 001011\dots \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$= \frac{1}{6} f_{15}''' \left\{ -1 + 1 - 1 - 1 - 1 - 1 \right\} = -f_{15}'''$$

Nota que quando trocamos duas linhas no determinante ele troca de sinal. Portanto para colocar a linha $\psi_5(x_i)$ onde estava a linha $\psi_1(x_i)$ precisamos fazer uma troca, somente e daí o sinal $(-)$. Se houvesse n linhas para trocar obteríamos um sinal $(-1)^n$.

Feito isto é fácil ver que somente os termos "diagonais" contribuem e daí temos $N!$ termos contribuindo. Logo o resultado geral é, (para $i < h$)

$$(F''')_{0_i 1_h}^{1_i 0_h} = f_{ih}''' (-1)^{\sum_{i=1}^{h-1} (i+1, h-1)}$$

onde $0_i = 1_i$ significa que $N_i = 0$ e $N_i = 1$ respectivamente

e onde

$$\Sigma(i+1, k-1) = \sum_{l=i+1}^{k-1} N_l$$

onde N_l é o nº de estados ocupados entre i e k

Para representarmos o operador $F^{(1)}$ em termos de operadores de criação e destruição precisamos que estes tenham o seguinte elemento da matriz

$$(A_i)_{1_i}^{0_i} = (A_i^+)_{0_i}^{1_i} = (-1)^{\Sigma(1, i-1)}$$

onde

$$A_i | \dots \underset{\uparrow}{0} \dots \rangle = (-1)^{\Sigma(1, i-1)} | \dots \underset{\uparrow}{1} \dots \rangle$$

onde $\Sigma(1, i-1)$ é o nº de estados ocupados até i .

Analogamente

$$A_i^+ | \dots \underset{\uparrow}{0} \dots \rangle = (-1)^{\Sigma(1, i-1)} | \dots \underset{\uparrow}{1} \dots \rangle$$

Calculamos o produto destes operadores ($i \neq k$)

$$\begin{aligned} (A_i^+ A_k)_{0_i 1_k}^{1_i 0_k} &= (A_i^+)_{0_i 0_k}^{1_i 0_k} (A_k)_{0_i 1_k}^{0_i 0_k} \\ &= (-1)^{\Sigma(1, i-1)} (-1)^{\Sigma(1, i-1) + \Sigma(i+1, k-1)} \\ &= (-1)^{\Sigma(i+1, k-1)} \end{aligned}$$

No caso $i \neq k$ temos que $A_i^+ A_i$ ~~é diferente de zero~~ é diagonal e só é diferente de zero se o estado i estiver ocupado. Daí

$$A_i^+ A_i = N_i$$

Escrevendo F''' como

$$F''' = \sum_{i,k} f_{i,k}^{(4)} A_i^+ A_k$$

Vemos que obtemos os elementos de matriz com os de F''' .

~~Logo F''' é escrito em termos de operadores de criação e aniquilação da mesma forma no caso bósonico.~~

Consideremos o produto na ordem inversa. ($k > i$)

$$\begin{aligned} (A_k A_i^+)_{0,1k}^{1,0k} &= (A_k)_{1,1k}^{1,0k} (A_i^+)_{0,1k}^{1,1k} = \\ &= (-1)^{\sum(1,k-1)+1+\sum(i+1,k-1)} (-1)^{\sum(1,i-1)} \\ &= -(-1)^{\sum(i+1,k-1)} \end{aligned}$$

Vemos então que

$$A_i^+ A_k + A_k A_i^+ = 0 \quad (i \neq k)$$

No caso $i = k$ temos que $A_i A_i^+$ é diagonal e só é diferente de zero se o estado i estiver ocupado.

Logo

$$A_i A_i^+ = 1 - N_i$$

Portanto

$$A_i^+ A_i + A_i A_i^+ = 1$$

Podemos então escrever

$$A_i^+ A_k + A_k A_i^+ = \delta_{ik}$$

Pode-se verificar que

$$A_i A_k + A_k A_i = 0$$

$$A_i^+ A_k^+ + A_k^+ A_i^+ = 0$$

Vemos então que ao contrário do caso bosônico os operadores de criação e destruição de férmions satisfazem relações de anticomutação.

No caso bosônico os operadores A_i e A_k eram independentes pois atuavam na variável N_i ~~onde~~ e o resultado não depende dos outros n_i 's de ocupação. No caso fermiônico, ao contrário, a atuação de A_i depende da ocupação dos outros estados.

Desta forma A_i e A_k não são independentes.

Uma vez obtido este formalismo podemos escrever ~~os~~ operadores em termos dos operadores de criação e aniquilação da mesma maneira que no caso bosônico. Ou seja

$$F''' = \sum_i f_i''' = \sum_{ik} f_{ik}''' A_i^+ A_k$$

$$F^{(2)} = \sum_{a>b} f_{ab}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,h,l,m} (f^{(2)})_{lm}^{ih} A_i^+ A_h^+ A_m A_l$$

etc.

No caso bosônico a ordem ~~dos~~ operadores ~~em~~ $A_i^+ A_h^+ A_m A_l$ e $A_l A_m A_h^+ A_i^+$ não importava pois eles comutavam. No entanto no caso fermiônico isto é relevante. A ordem ~~dos~~ nas expressões acima já é a correta.

Analogamente ao caso bosônico definimos

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r}) A_i \quad \Phi^+(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) A_i^+$$

e eles satisfazem

$$\Phi^+(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}) + \Phi(\mathbf{r}) \Phi^+(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

$$\Phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}') + \Phi(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}) = 0$$

Teoria do espalhamento

A equação de Lippman-Schwinger

Consideramos primeiramente a formulação independente do tempo do processo de espalhamento. Suponha que a Hamiltoniana seja

$$H = H_0 + V$$

onde

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}$$

No caso de não haver o agente espalhador temos $V=0$

Na presença de V o autoestado de energia difere daquele de partícula livre.

No caso elástico, a energia não muda, e faremos a solução da eq. de Schrödinger para a mesma energia.

Seja $|\phi\rangle$ o autoestado de H_0

$$H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (\text{ou seja } |\phi\rangle \text{ pode ser } |\vec{p}\rangle)$$

A eq. que queremos resolver é

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (\text{mesmo } E)$$

Tanto H_0 como $H_0 + V$ têm espectro contínuo.

Procuramos uma solução tal que

$$|\psi\rangle \xrightarrow{V \rightarrow 0} |\phi\rangle$$

A menos de singularidades poderíamos dizer que a solução é:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle$$

O termo ~~em~~ $|\phi\rangle$ aparece para satisfazer a condição de contorno $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ qdo $V \rightarrow 0$.

No caso da teoria de perturbações nós usamos um operador de project complementar. No entanto isto não funciona aqui pois temos um espectro contínuo de autovalores.

A saída para isto é complexificar a energia (apenas um truque!)

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\psi^\pm\rangle$$

Os sinais $\pm$ são disjuntos mais tarde.

Esta é a eq. de Lippman-Schwinger.

No caso da representação de posições temos

$$\langle \vec{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle + \int d^3x' \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | V | \psi^\pm \rangle$$

Obtemos então uma equação integral.

Se $|\phi\rangle$ for uma onda plana de momento $\vec{p}$ temos

$$\langle \vec{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad \text{ou} \quad \langle \vec{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar}}{L^{3/2}}$$

↑
normalização da
caixa.

Na representação de momento a eq. da L-5 fica:

$$\langle \vec{p} | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\epsilon} \langle \vec{p} | V | \psi^\pm \rangle$$

Para resolver a eq. integral acima nós precisamos conhecer o kernel:

$$G_\pm(\vec{x}, \vec{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle$$

Calculando

$$G_\pm(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' d^3p'' \underbrace{\langle x | p' \rangle}_{\frac{e^{i\vec{p}' \cdot \vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}} \underbrace{\langle p' | \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon} | p'' \rangle}_{\frac{\delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p}'')}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon}} \underbrace{\langle p'' | x' \rangle}_{\frac{e^{-i\vec{p}'' \cdot \vec{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}$$

Daí

$$G_\pm(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\vec{p}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')/\hbar}}{\left(E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon\right)}$$

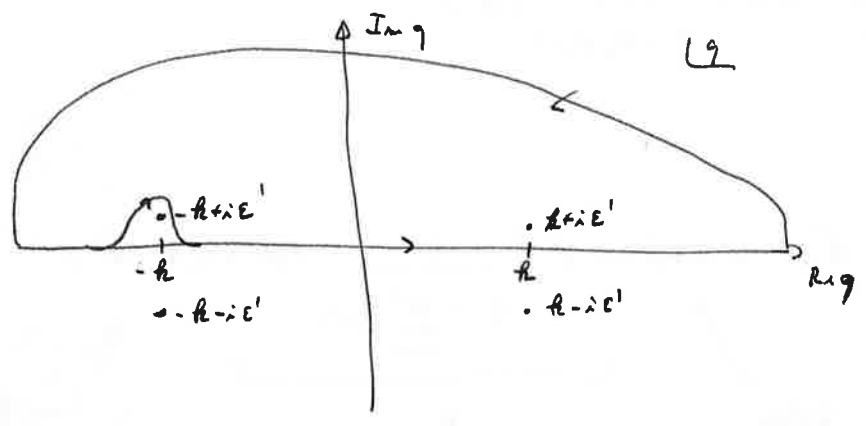
Introduzindo $\vec{p} \equiv \hbar \vec{q}$ e usando $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ temos

$$\begin{aligned} G_\pm(x, x') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{e^{i q |\vec{x} - \vec{x}'| \cos\theta}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2 dq \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \left. \frac{e^{i q |\vec{x} - \vec{x}'| \cos\theta}}{i q |\vec{x} - \vec{x}'|} \right|_{-1}^1 \end{aligned}$$

$$G_{\pm}(x, x') = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, q \frac{e^{i q(x-x')} - e^{-i q(x-x')}}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon}$$

O integrando tem polos em

$$q^2 = k^2 \pm i\epsilon \Rightarrow q = \pm k \sqrt{1 \pm \frac{i\epsilon}{k^2}} \approx \pm k \pm i\epsilon'$$



Usando Teorema de Cauchy

$$\oint \frac{dz}{2\pi i} \frac{f(z)}{z-w} = f(w)$$

$$q^2 - k^2 \mp i\epsilon = (q - k \sqrt{1 \pm \frac{i\epsilon}{k^2}})(q + k \sqrt{1 \pm \frac{i\epsilon}{k^2}})$$

Então

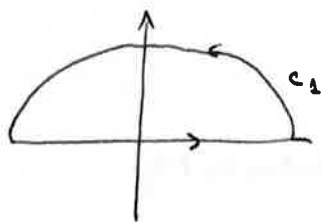
$$\approx (q - (k \pm i\epsilon'))(q + (k \pm i\epsilon'))$$

~~detalhado~~

~~$$G_{\pm}(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x-x'|} \left\{ \frac{1}{2(k \pm i\epsilon')} \left(e^{i(k \pm i\epsilon')(x-x')} - e^{-i(k \pm i\epsilon')(x-x')} \right) + \frac{1}{2(-k \pm i\epsilon')} \left(e^{i(-k \pm i\epsilon')(x-x')} - e^{-i(-k \pm i\epsilon')(x-x')} \right) \right\}$$~~

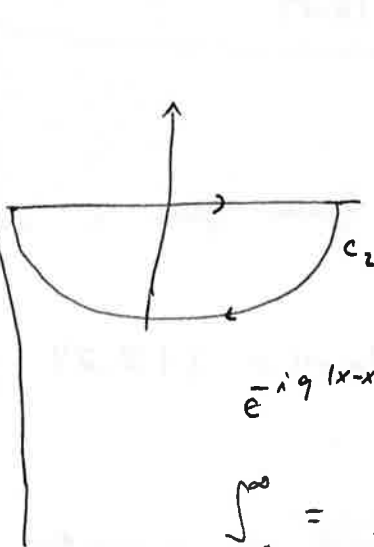
$$G_{\pm}(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x-x'|} \left\{ \int_{c_1} \frac{dq}{2\pi i} \frac{q e^{i q |x-x'|}}{[q - (k \pm i\epsilon')][q + (k \pm i\epsilon')]} + \int_{c_2} \frac{dq}{2\pi i} \frac{q e^{-i q |x-x'|}}{[q - (k \pm i\epsilon')][q + (k \pm i\epsilon')]} \right\}$$

onde



$$e^{i q |x-x'|} = e^{i \operatorname{Re} q |x-x'|} e^{-\operatorname{Im} q |x-x'|}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{c_1}$$



$$e^{-i q |x-x'|} = e^{-i \operatorname{Re} q |x-x'|} e^{\operatorname{Im} q |x-x'|}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{c_2}$$

No caso de G_+ o polo faz contribuiç~o

$$\left\{ \begin{array}{l} q = k + i\epsilon' \text{ em } c_1 \\ q = -(k + i\epsilon') \text{ em } c_2 \end{array} \right.$$

" " " G_- " " " " " "

$$\left\{ \begin{array}{l} q = -(k + i\epsilon') \text{ em } c_1 \\ q = k - i\epsilon' \text{ em } c_2 \end{array} \right.$$

Logo

$$G_+(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x-x'|} \left\{ (k + i\epsilon') \frac{e^{i(k+i\epsilon')|x-x'|}}{2(k+i\epsilon')} + -(k + i\epsilon') \frac{e^{i(k+i\epsilon')|x-x'|}}{-2(k+i\epsilon')} \right\}$$

$$G_-(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x-x'|} \left\{ -(k + i\epsilon') \frac{e^{i(-k+i\epsilon')|x-x'|}}{-2(k+i\epsilon')} + (k - i\epsilon') \frac{e^{-i(k-i\epsilon')|x-x'|}}{2(k-i\epsilon')} \right\}$$

Ona seja

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} e^{\pm i k |\vec{x} - \vec{x}'|}$$

$G_{\pm}$ é a função de Green para a equação de Helmholtz

$$(\nabla^2 + k^2) G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

Substituindo na expressão de $\langle x | \psi^{\pm} \rangle$ temos

$$\langle \vec{x} | \psi^{\pm} \rangle = \underbrace{\langle \vec{x} | \phi \rangle}_{\text{onda incidente}} - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \underbrace{\frac{e^{\pm i k |\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|}}_{\text{este termo dá o efeito do espalhamento}} \langle \vec{x}' | V | \psi^{\pm} \rangle$$

este termo dá o efeito do espalhamento



Vemos mais tarde que a dependência espacial deste termo é $\frac{e^{\pm i k r}}{r}$ desde que o potencial tenha alcance finito.
(isto é uma onda esférica)

simetria $\rightarrow$ outgoing wave $\leftarrow$ estamos interessados nesta.
simetria $\rightarrow$ incoming "

Dizemos que um potencial é local se ele for diagonal na representação de coordenada, ou seja

$$\langle x' | V | x'' \rangle = V(x') \delta^3(x' - x'')$$

É claro que potenciais que dependam somente da posição são potenciais locais.

Neste caso temos então:

$$\begin{aligned}\langle x' | V | \psi^\pm \rangle &= \int d^3x'' \langle x' | V | x'' \rangle \langle x'' | \psi^\pm \rangle \\ &= V(x') \langle x' | \psi^\pm \rangle\end{aligned}$$

Portanto

$$\langle x | \psi^\pm \rangle = \langle x | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm i k |x-x'|}}{4\pi |x-x'|} V(x') \langle x' | \psi^\pm \rangle$$

interpretação desta eq.

O vetor x está na direção do ponto de observação onde a função de onda é calculada.

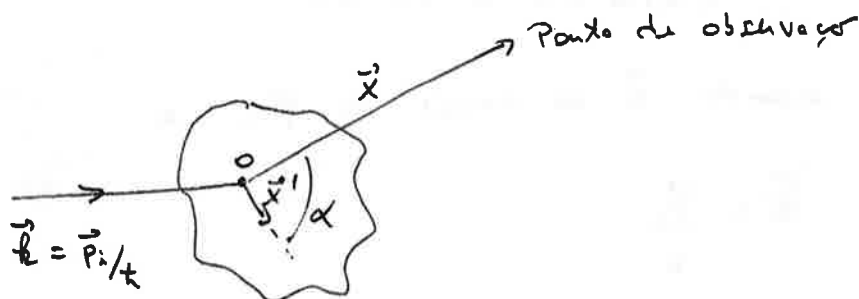
Se o potencial tem algum infinito a região ~~na integral~~ que contribui para a integral é limitada.

No processo de espalhamento estamos interessados em ver o efeito do espalhador em pontos x longe do alcance do potencial.

Na prática é isto que ocorre.

Temos então

$$|x| \gg |x'|$$



Demostamos

$$r = |x|, \quad r' = |x'| \quad \alpha = \text{ângulo entre } x \text{ e } x'$$

Para $r \gg r'$ $((1+x)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}x + O(x^2) \dots)$

$$|x - x'| = \sqrt{r^2 - 2rr' \cos \alpha + r'^2} = r \sqrt{1 - 2\frac{r'}{r} \cos \alpha + \frac{r'^2}{r^2}}$$

~~$$r \sqrt{1 - 2\frac{r'}{r} \cos \alpha + \frac{r'^2}{r^2}}$$~~

$$\approx r \left(1 - \frac{r'}{r} \cos \alpha + \frac{1}{2} \left(\frac{r'}{r} \right)^2 + \dots \right)$$

onde

~~$$\frac{r'}{r} \cos \alpha$$~~

$$\approx r - \hat{r} \cdot \vec{x}'$$

onde

$$\hat{r} = \frac{\vec{x}}{|x|}$$

Definimos também

$$\vec{k}' = k \hat{r}$$

que representa o vetor de propagação das ondas chegando em $\vec{x}$.

Dai

$$e^{\pm i k |x - x'|} \approx e^{\pm i k r} e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{x}'} \quad (r \gg r')$$

A onda plana incidente é normalizada como

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}}$$

uma vez que $\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}')$

onde estamos usando $\vec{k}$ ao invés de $\vec{p}$, i.e.

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

Isso elimina $\hbar$ nas expressões $\frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}}$

Dentro da aproximação que estamos fazendo, podemos escrever

$$\frac{1}{|x-x'|} \approx \frac{1}{r}$$

Uma vez que

$$\begin{aligned} \frac{1}{|x-x'|} &= \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{r'}{r} \cos \alpha + \frac{r'^2}{r^2}}} = \frac{1}{r} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[-2\frac{r'}{r} \cos \alpha + \frac{r'^2}{r^2} \right] + \dots \right\} \\ &= \frac{1}{r} + \frac{r' \cos \alpha}{r^2} + \dots \end{aligned}$$

Estamos desprezando termos $O(\frac{r'}{r})$. No argumento da exponencial $e^{\pm i\vec{k} \cdot (x-x')}$ desprezamos termos $O(\frac{r'^2}{r^2})$.

Daí

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi^+ \rangle &\xrightarrow{r \gg r'} \langle x | \psi \rangle = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \int d^3x' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(x') \langle x' | \psi^+ \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} f(\vec{k}', \vec{k}) \right] \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} f(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \frac{e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^+ \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \psi^+ \rangle \end{aligned}$$

Portanto a grandes distâncias a função de onda $\frac{\langle x | \psi^+ \rangle}{r}$ a onda plana incidente mais uma onda esférica com amplitude $f(\vec{k}', \vec{k})$. ~~propagando~~ ^{afastando} do centro espalhador.

Da maneira análoga podemos mostrar que $\langle x | \psi^- \rangle$ é a onda plana original mais uma onda esférica aproximando do espalhador $\left(\frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}\right)$ e amplitude dada por:

$$-\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle -k | V | \psi \rangle.$$

Para obter a eqn de choque diferencial nós consideramos um n.º grande de partículas idênticas ~~preparadas~~ ^{todas} caracterizadas pela função de onda:

$$\langle x | k \rangle = \frac{e^{ik \cdot x}}{(2\pi)^{3/2}}$$

Questão: Qual o n.º de partículas incidentes cruzando o plano perpendicular ao direção incidente por unidade de área e unidade de tempo?

Isto é proporcional ao fluxo de probabilidade devido ao 2.º termo no lado direito de ~~(7.1.33)~~ (7.1.33) ou seja

$$\frac{e^{ik \cdot x}}{(2\pi)^{3/2}}$$

Questão: Qual o n.º de partículas espalhadas em um ângulo sólido $d\Omega$ por unidade de tempo?

~~Interpret.~~

Isto é proporcional ao fluxo de probabilidade devido ao 2.º

termo no lado direito de (7.1.33) ou seja $\frac{e^{ik \cdot r}}{r} f(k', k)$

Temos então

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{n.º de partículas espalhadas em } d\Omega \text{ por unidade de tempo}}{\text{n.º de partículas incidentes por unidade de área e por unid. de tempo}}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 |\vec{j}_{esp.}|}{|\vec{j}_{inc.}|} = |f(k', k)|^2 d\Omega$$

Dar

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k', k)|^2$$

$d\sigma$ é a área no plano perpendicular ao feixe incidente por onde passam as partículas espalhadas em $d\Omega$.

Descrição do pacote de onda

Na experiência real temos um pacote de onda que incide no centro ~~do espalhador e se espalha para todos os lados~~ ~~de tempo em tempo~~ ~~justificando para~~ espalhador.

~~mas~~ ~~estamos~~ ~~com~~ Depois de um grande tempo, temos o pacote de onda ^{original} movendo na direção original mais uma onda esférica que ~~move~~ se afasta do centro espalhador.

O uso de onda plana é satisfatório quando o tamanho do pacote de onda (usado na experiência real) é muito maior que o tamanho da região onde o potencial atua.

A aproximação de Born

A expressão (7.1.34) para $f(k, k')$ não é de muita utilidade pois ela contém o ψ desconhecido (ψ^+).

No caso do potencial não ser muito forte nós podemos aproximar $\langle x | \psi^+ \rangle$ por $\langle x | \phi \rangle$, i.e.

$$\langle x' | \psi^+ \rangle \rightarrow \langle x' | \phi \rangle = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}$$

Obtemos então uma aproximação para $f(k, k')$ que é linear em V . Por esta razão ~~é~~ a amplitude obtida é chamada de amplitude de Born de 1ª ordem. e

é denotada por $f^{(1)}$.

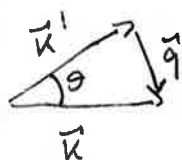
Temos

154

$$f'''(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}')$$

A menos do fator $-\frac{2m}{4\pi\hbar^2}$ vemos que $f'''(\vec{k}, \vec{k}')$ é a transformada de Fourier do potencial. com respeito ao momento transferido $\vec{q} \equiv \vec{k} - \vec{k}'$

Para um potencial esfericamente simétrico $f'''(\vec{k}, \vec{k}')$ é uma função de $|\vec{k} - \vec{k}'|$. Como $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k$ por conservação da energia temos



$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}' \Rightarrow q = |\vec{k} - \vec{k}'| = \sqrt{k^2 - 2k^2 \cos \theta + k^2} = k \sqrt{2 - 2 \cos \theta}$$

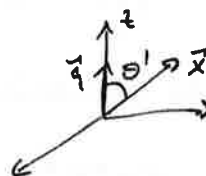
$$\cos(A+B) = \cos A \cos B - \sin A \sin B$$

$$\cos \theta = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} = 1 - 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$$2 - 2 \cos \theta = 2 - 2 + 4 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 4 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Daí $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$

Fazendo a integração angular



$$f'''(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta') e^{iqr \cos \theta'} V(r)$$

$$= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 dr V(r) \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr}$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r dr V(r) \frac{\sin qr}{q}$$

On seja

$$f'''(\theta) = - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^{\infty} dr \, r V(r) \sin qr \quad (q = 2k \sin \frac{\theta}{2})$$

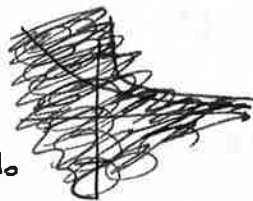
Aproximações de Born de 1ª ordem para potenciais centrais.

Exemplo: Potencial de Yukawa

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$$

V_0 independente de r

μ - é o alcance do potencial
uma vez que $V \rightarrow 0$ bem rápido
para $r \gg 1/\mu$.



Daí

$$f'''(\theta) = - \frac{2mV_0}{\mu \hbar^2} \frac{1}{q} \underbrace{\int_0^{\infty} dr \, e^{-\mu r} \sin qr}_I$$

$$I = \int_0^{\infty} dr \, e^{-\mu r} \left(\frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i} \right) = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} dr \left(e^{(iq-\mu)r} - e^{-(iq+\mu)r} \right)$$

$$= \frac{1}{2i} \left\{ \left. \frac{e^{(iq-\mu)r}}{iq-\mu} \right|_0^{\infty} - \left. \frac{e^{-(iq+\mu)r}}{-(iq+\mu)} \right|_0^{\infty} \right\} = -\frac{1}{2i} \left\{ \frac{1}{iq-\mu} + \frac{1}{iq+\mu} \right\}$$

$$= -\frac{1}{2i} \frac{iq+\mu + iq-\mu}{(iq-\mu)(iq+\mu)} = \frac{q}{q^2 + \mu^2}$$

Logo

$$f'''(\theta) = - \frac{2mV_0}{\mu \hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2}$$

Usando $q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\Theta}{2} = 2k^2(1 - \cos \Theta)$ temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx |f(\Theta)|^2 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(2k^2(1 - \cos \Theta) + \mu^2)^2}$$

No caso $\mu \rightarrow 0$ mantendo a razão $\frac{V_0}{\mu}$ fixa obtemos um potencial Coulombiano. Denotando $\frac{V_0}{\mu} \equiv Z Z' e^2$ temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{(2m)^2 (Z Z' e^2)^2}{\hbar^4} \frac{1}{16 k^4 \sin^4 \frac{\Theta}{2}}$$

Denotando $|q| \equiv \hbar k$ e $E = \frac{|p|^2}{2m}$ temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{Z Z' e^2}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}}$$

que é a eqn de choque de Rutherford obtida classicamente.

Observe a aproximação de Born em 1ª ordem coincide com o resultado clássico.

Para um potencial esfericamente simétrico (central) e para uma amplitude $f(k, k')$ que pode ser aproximada por amplitude de Born em 1ª ordem podemos dizer:

1) $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ ou $f(\Theta)$ é uma função de γ somente.
Observe $f(\Theta)$ depende da energia $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e Θ na combinação $2k^2(1 - \cos \Theta)$

2) $f(\Theta)$ é sempre real

3) $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ é independente do sinal do potencial V

¶

4) Para $\hbar$ pequeno (portanto q pequeno) temos

$$f''(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int V(r) d^3x \quad (\text{independente de } \theta)$$

pois $\sin qr \sim qr$ e daí

$$\begin{aligned} -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \sin qr dr &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 V(r) dr = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^\infty r^2 V(r) dr = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int V(r) d^3x \end{aligned}$$

5) Para q ~~pequeno~~ grande $f(\theta)$ é pequeno devido a um integrando ~~oscilante~~ que oscila rapidamente. (é devido a $\frac{1}{q}$)

Validade da aproximação de Born

É claro que a aproximação deve ser válida sempre que $\langle x|\psi^+ \rangle$ não for muito diferente $\langle x|\phi \rangle$ na região onde o potencial não é desprezível. Ou seja, a onda incidente não pode ser muito distorcida.

De (7.1.22) vemos que a condição para que $\langle x|\psi^+ \rangle$ não seja tão diferente de $\langle x|\phi \rangle$ no centro do potencial $\psi^-(\vec{x}=0)$

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(\vec{x}')}{r'} \right| \ll 1$$

Verifiquemos o que ocorre no caso do potencial de Yukawa.

Para energias baixas ($\hbar$ pequeno) é razoável substituir

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \text{ por } 1$$

Portanto devemos ter

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu^2} \ll 1$$

uma vez que

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{r} \frac{V_0}{\mu r} e^{-\mu r} \right| \ll 1$$

$$\frac{V_0}{\mu} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} = -\frac{1}{\mu^2} e^{-\mu r} \Big|_0^\infty = \frac{1}{\mu^2}$$

e dar

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu^2} \ll 1$$

A condição para o potencial de Yukawa ter um estado ligado (portanto V_0 negativo) é

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu^2} \geq 2.7$$

Portanto se o potencial de Yukawa é forte o suficiente para ter um estado ligado então certamente a aproximação de 1ª ordem de Born será válida.

No caso de alta energia (k grande) temos

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int_0^\infty r^2 dr \frac{e^{ikr}}{r} \frac{V_0}{\mu r} e^{-\mu r} \right| \ll 1$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu} \left| \int_0^\infty dr e^{(ik-\mu)r} \right| \ll 1$$

$$\left(\frac{e^{i(k-\mu)r}}{(ik-\mu)} \Big|_0^\infty \right)$$

e dar

~~$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu} \frac{1}{\sqrt{k^2 + \mu^2}} \ll 1$$~~

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu} \frac{1}{\sqrt{k^2 + \mu^2}} \ll 1$$

$$\left| \frac{-1}{ik-\mu} \right|$$

$$\frac{1}{(ik-\mu)(-ik-\mu)} = \frac{1}{k^2 + \mu^2}$$

Portanto para $k \gg \mu$ temos que ter

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu k} \ll 1$$

É claro que quanto maior for k mais fácil será satisfazer esta condição. Na verdade, a aproximação de Born em geral tende a ser melhor para altas energias.

Sakurai apresenta a condição acima como

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu k} \ln\left(\frac{k}{\mu}\right) \ll 1$$

Acreditamos que o $\ln$ aparece quando somamos sobre todas as ordens da aproximação de Born.

A aproximação de Born de ordens mais altas

Nós definimos o operador transição T como

$$V|\psi^+\rangle = T|\phi\rangle$$

Desta forma a amplitude (7.1.34) ~~é~~

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$$

fica

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

Uma vez que $|\phi\rangle \equiv |\vec{k}\rangle$.

Portanto precisamos conhecer T para encontrar f .

Multiplicando a eq. de Lippmann-Schwinger por V obtemos

$$T|\phi\rangle = V|\phi\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T|\phi\rangle$$

Isto deve ser verdade para qualquer ~~to~~ estado de onda plana $|\phi\rangle$. Como estas formam um conjunto completo, obtemos a relação operacional

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T$$

Podemos então obter uma solução iterativa para T

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots$$

Isto implica em uma expansão para f da forma

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\vec{k}', \vec{k})$$

onde n é o número de vezes V entra, ou seja

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$$

$$f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V | \vec{k} \rangle$$

Note que $f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k})$ é o mesmo definido anteriormente uma vez que

$$\langle x | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (\text{veja. 7.2.2})$$

ou seja

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}')$$

No caso de $f^{(2)}$ temos

$$f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x d^3x' \overset{\vec{x}''}{\overset{\vec{x}'''}{\langle \vec{k}' | \vec{x} \rangle}} \langle \vec{x} | V | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \vec{x}'' \rangle \langle \vec{x}'' | V | \vec{x}''' \rangle \langle \vec{x}''' | \vec{k} \rangle$$

No caso de V ser local temos

$$\langle \vec{x} | V | \vec{x}' \rangle = V(x) \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

usando

$$\langle \vec{x}' | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \vec{x} \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} G_+(\vec{x}', \vec{x})$$

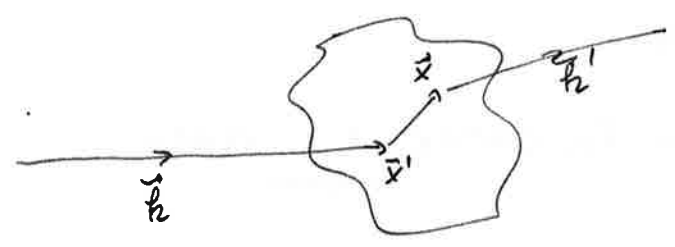
obtemos

$$f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \int d^3x d^3x' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}) G_+(\vec{x}, \vec{x}') V(\vec{x}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

Esta eq. pode ser interpretada da seguinte maneira:

A onda incidente $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ interage em $\vec{x}'$ através de $V(\vec{x}')$, daí ela propaga até $\vec{x}$ através da função de Green $G(\vec{x}, \vec{x}')$ da eq. de Helmholtz $((\nabla^2 + k^2) G = \delta(\vec{x} - \vec{x}'))$. Daí interage novamente em $\vec{x}$ através de $V(\vec{x})$ e se propaga finalmente na direção de $\vec{k}'$.

No caso de $f^{(3)}$ teríamos $\checkmark$ mais passos de interação.



Teorema Óptico

"Teorema": É verdade que

$$\text{Im } f(\theta=0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{Tot}}$$

onde

$$f(\theta=0) \equiv f(\vec{k}, \vec{k})$$

$$\text{e } \sigma_{\text{Tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

Colocando $\vec{k}' = \vec{k}$ temos espalhamento na direção "para frente", isto é, em $\theta=0$.

Este teorema é devido a Bohr, Peierls, e Placzek.

Prova:

De (3.2.19)

$$f(\theta=0) = f(\vec{k}, \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle$$

Da eq. de Lippmann-Schwinger

$$\langle \vec{k}^+ | = \langle \vec{k}^+ | V \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} \quad \text{e} \quad \langle \vec{k}^+ | = \langle \vec{k}^+ | V \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} \langle \vec{k}^+ |$$

usando

$$V | \vec{k}^+ \rangle = T | \vec{k} \rangle$$

obtemos

$$\text{Im } \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle = \text{Im } \langle \vec{k} | V | \vec{k}^+ \rangle =$$

$$= \text{Im } \langle \vec{k}^+ | V | \vec{k}^+ \rangle - \text{Im } \langle \vec{k}^+ | V \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} V | \vec{k}^+ \rangle$$

Usando a relação (veja nota sobre valor principal)

$$\frac{1}{E - H_0 - i\varepsilon} = P.V. \left(\frac{1}{E - H_0} \right) + i\pi \delta(E - H_0)$$

Ver pág 61 seção 15
do livro de Dirac
(The Principles of
Quantum Mechanics
3rd edition)

obtemos

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle k | T | k \rangle &= \text{Im} \langle \psi^+ | V | \psi^+ \rangle - \text{Im} \langle \psi^+ | V P.V. \left(\frac{1}{E - H_0} \right) V | \psi^+ \rangle - \\ &\quad - \text{Im} \langle \psi^+ | V i\pi \delta(E - H_0) V | \psi^+ \rangle \end{aligned}$$

Os dois primeiros termos são nulos ~~por~~ devido à
hermiticidade de V e $V P.V. \frac{1}{E - H_0} V$. Daí usando que

$$V | \psi^+ \rangle = T | k \rangle$$

temos

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle k | T | k \rangle &= - \text{Im} \langle \psi^+ | V i\pi \delta(E - H_0) V | \psi^+ \rangle \\ &= -\pi \langle k | T^\dagger \delta(E - H_0) T | k \rangle \\ &= -\pi \int d^3 k' \langle k | T^\dagger | k' \rangle \langle k' | T | k \rangle \delta(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}) \\ &= -\pi \int d\Omega' \int k'^2 dk' \langle k | T^\dagger | k' \rangle \langle k' | T | k \rangle \delta(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}) \end{aligned}$$

Como $dk' = dE \frac{dk'}{dE} = dE \frac{m}{\hbar^2 k'}$ e $k'^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\text{Im} \langle k | T | k \rangle = -\pi \int d\Omega' \frac{m}{\hbar^2} |\langle k' | T | k \rangle|^2$$

onde usamos $|k'| = |k|$

~~Como~~ $\frac{d\Omega}{d\Omega'} = \frac{d\Omega}{d\Omega'}$

~~$\frac{d\Omega}{d\Omega'} = \frac{d\Omega}{d\Omega'}$~~

$$\frac{dE \frac{m}{\hbar^2 k'^2}}{\hbar^2 k'} = \frac{dE m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 E}}$$

Dar

$$\text{Im } f(0) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 (-\pi) \int d\Omega' \frac{m\hbar}{\hbar^2} |\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle|^2$$

Como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}', \vec{k})|^2$$

$$\sigma_{\text{Tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

temos

$$\text{Im } f(0) = \frac{\pi}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \hbar \int d\Omega' \left[\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \right]^2 |\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle|^2$$

$$= \frac{\pi}{2} \frac{4\pi}{8\pi^3} \hbar \int d\Omega' |f(\vec{k}', \vec{k})|^2$$

$$= \frac{\hbar}{4\pi} \sigma_{\text{Tot}}$$

$$\sigma_{\text{Tot}} = \frac{4\pi}{\hbar} \text{Im } f(\vec{k}, \vec{k})$$

Aproximação Eikonal

Esta aproximação funciona quando o potencial varia muito pouco em uma distância da ordem do comprimento de onda da partícula incidente.

Como veremos ela difere da aproximação de Born uma vez que o potencial não precisa ser realmente fraco. Basta que $E \gg |V|$.

Ela é na verdade uma aproximação semi-clássica, pois podemos usar o conceito de trajetória. Como $\hbar$ é pequeno

Comparado com as dimensões da região onde o potencial atua, temos que $p \sim \frac{1}{\lambda}$ é muito grande. Logo a incerteza no momento é grande comparado com a incerteza na posição. Desta forma tomamos a função da onda semiclássica

$$\psi^{(+)} \sim e^{iS(x)/\hbar}$$

Dar a equação

$$(H_0 + V)\psi^+ = E\psi^+ = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi^+$$

fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla \cdot \left(\frac{i}{\hbar} \nabla S e^{iS/\hbar} \right) + V\psi^+ = E\psi^+ \right.$$

$$\left. -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{i}{\hbar} \nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \right\} e^{iS/\hbar} + V\psi^+ = E\psi^+ \right.$$

Vamos assumir que

$$\hbar \nabla^2 S \ll (\nabla S)^2$$

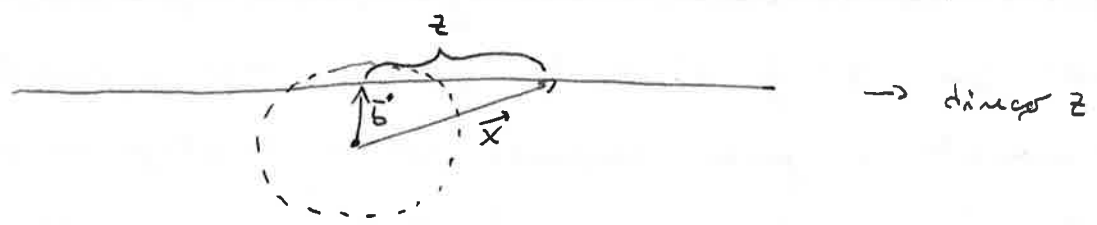
que equivale ao dizer que $S \gg \hbar$ (aprox. semiclássica)

Obtemos então a eq. da Hamilton-Jacobi

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Para calcular S a partir desta equação faremos uma outra aproximação ainda. Vamos supor que para altas energias a deflexão é pequena e dar a trajetória

podé ser aproximada por uma linha reta.



Tomaremos esta reta na direção do eixo z , como mostrado na figura, acima. Daí fazendo a integral obtemos

$$\frac{S}{\hbar} = \int_{-\infty}^z \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\underbrace{\sqrt{b^2 + z'^2}}_{|\vec{z}|}) \right]^{\frac{1}{2}} dz' + \text{constante}$$

A constante aditiva é escolhida da tal modo que

$$\frac{S}{\hbar} \rightarrow k z \quad \text{quando } V \rightarrow 0$$

pois daí obtemos a onda plana $\psi \rightarrow e^{i k z}$ (pois esta é a função da onda quando não temos potencial)

Desta forma podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{S}{\hbar} &= k z + \int_{-\infty}^z \left[\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} - k \right] dz' \\ &\approx k z - \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V(\sqrt{b^2 + z'^2}) dz' \end{aligned}$$

Pois

$$\begin{aligned} \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} &= k \sqrt{1 - \frac{2m}{\hbar^2 k^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} \\ &\approx k \left(1 - \frac{m}{\hbar^2 k^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) \right) \end{aligned}$$

uma vez que $E \gg |V|$

Desta forma

$$\psi^+(\vec{x}) = \psi^+(\vec{b} + z \hat{e}_z) \simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i k z} \exp \left\{ -\frac{i m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V(\sqrt{b^2 + z'^2}) dz' \right\}$$

Nota que ψ^+ não tem a forma de uma onda plana mais uma onda esférica $e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta) \frac{e^{i k r}}{r}$

No entanto podemos usá-la como uma função aproximada para calcular a amplitude $f(k, k')$ dada por (2.1.34)

$$f(k', k) = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \psi^+ \rangle$$

Como $\vec{k}$ está na direção z podemos escrever

$$kz = \vec{k} \cdot \vec{x}$$

e daí

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{-i \vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}'} \times$$

$$\times \exp \left\{ -\frac{i m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z'} V(\sqrt{b^2 + z''^2}) dz'' \right\}$$

↑

a menos desta exponencial seja a aproximação de Born de 1ª ordem para $f(k', k)$.

Vamos usar coordenadas cilíndricas na integração. Temos então

$$d^3x' = b db d\phi dz'$$

Temos ainda

$$(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}' = (\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{b} + z \hat{e}_z) = -\vec{k}' \cdot \vec{b} + z(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \hat{e}_z$$

pois $\vec{k} \perp \vec{b}$. Mas

$$(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \hat{e}_z = k - k \cos \theta = k(1 - \cos \theta) = k \left(-\frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} + \dots \right)$$

Como estamos assumindo que o ângulo de espalhamento é muito pequeno podemos escrever

$$(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}' \approx -\vec{k}' \cdot \vec{b}$$

uma vez que $\vec{k}' \cdot \vec{b} = kb \sin \theta \approx kb \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots \right)$

e portanto é de uma ordem mais baixa em perturbações que $(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \hat{e}_z$.

Por outro lado, tomando o espalhamento no plano xz (sem perda da generalidade),

$$\begin{aligned} \vec{k}' \cdot \vec{b} &= (k \sin \theta \hat{e}_x + k \cos \theta \hat{e}_z) (b \cos \phi_b \hat{e}_x + b \sin \phi_b \hat{e}_y) = \\ &= k \sin \theta b \cos \phi_b \approx kb \theta \cos \phi_b \end{aligned}$$

Obtemos então para $f(\vec{k}, \vec{k}')$

$$\begin{aligned} f(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty b db \int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-i k b \cos \phi_b \theta} \times \\ &\times \int_{-\infty}^\infty dz V \exp \left\{ -\frac{i m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz' \right\} \end{aligned}$$

Usamos agora a identidade (ou definição)

$$\int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-ikb\theta \cos \phi_b} = 2\pi J_0(kb\theta)$$

↑
função de Bessel

e ainda

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz V e^{-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz'} &= i \frac{\hbar^2 k}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d}{dz} e^{-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz'} = \\ &= i \frac{\hbar^2 k}{m} \exp\left(-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz'\right) \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= i \frac{\hbar^2 k}{m} \left[\exp\left(-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} V dz'\right) - 1 \right] \end{aligned}$$

Portanto

$$f(\tilde{k}', \tilde{k}) = -ik \int_0^{\infty} b db J_0(kb\theta) \left[e^{2i\Delta(b)} - 1 \right]$$

onde $\Delta(b) = -\frac{m}{2\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} V dz' \quad \left(V = V(\sqrt{b^2 + z'^2}) \right)$

Em seguida, fixamos o parâmetro de impacto b e calculamos

$\Delta(b)$. É claro que $\Delta(b)$ é nulo se b for maior que

o alcance do potencial. Consequentemente o termo

$[e^{2i\Delta(b)} - 1]$ também é nulo neste caso. Logo a integral

em b é não nula somente para valores de b

menor que o alcance do potencial.

Estados de partícula livre: onda plana x onda esférica

Temos que

$$[H_0, \vec{p}] = [H_0, L^2] = [H_0, L_z] = 0$$

ou seja $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

Portanto podemos tomar os autoestados de H_0 como

autoestados de $\vec{p} \rightarrow$ onda plana.

ou autoestados de $L^2, L_z \rightarrow$ onda esférica

Ignorando spin denotaremos estes últimos por $|E, l, m\rangle$.

Podemos escrever ~~qualquer~~ qualquer estado de partícula livre como uma superposição de ondas planas ou ondas esféricas.

Vamos ver como estas duas bases são conectadas.

Queremos então calcular

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle$$

$\nwarrow$ função de onda da onda esférica no espaço de momento.

Usaremos a normalização

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \delta(E-E')$$

Em analogia ao caso da função de onda no espaço de coordenada, nós podemos esperar que

$$\langle \vec{r} | E, l, m \rangle = g_{lE}(r) Y_l^m(\vec{r})$$

Vamos ver como obter este resultado.

Considere o auto estado de momento $|k \hat{e}_z\rangle$. Ou seja uma onda plana propagando na direção z .

A componente z de seu momento angular é nula, pois

$$L_z |k \hat{e}_z\rangle = (x p_y - y p_x) |k_x=0, k_y=0, k_z=k\rangle = 0$$

Análogo ao caso clássico $\vec{L} \cdot \vec{p} = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{p} = 0$.

Portanto

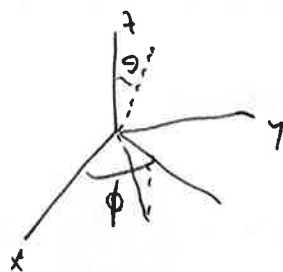
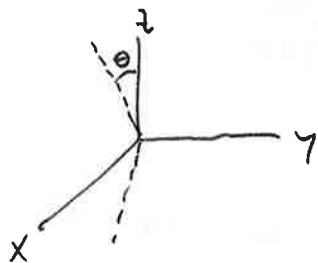
$$\langle E', l', m' | k \hat{e}_z \rangle = 0 \quad \text{para } m' \neq 0$$

Daí

$$|k \hat{e}_z\rangle = \sum_{l'} \int dE |E', l', m'=0\rangle \langle E', l', m'=0 | k \hat{e}_z \rangle$$

Nós podemos agora obter um $|k \hat{r}\rangle$ com $\vec{r}$ em qualquer direção fazendo uma rotação de $k \hat{e}_z$.

Rotamos de um ângulo θ em torno do eixo y e daí de um ângulo ϕ em torno do eixo z .



ou seja

$$|\vec{k}\rangle = \mathcal{D}(\alpha=\phi, \beta=\Theta, \gamma=0) |\hbar \hat{e}_z\rangle$$

Dai'

$$\begin{aligned} \langle E, l, m | \vec{k} \rangle &= \sum_{l'} \int dE' \langle E, l, m | \mathcal{D}(\alpha=\phi, \beta=\Theta, \gamma=0) | E', l', m'=0 \rangle \times \\ &\times \langle E', l', m'=0 | \hbar \hat{e}_z \rangle. \end{aligned}$$

O operador de rotação não muda o ~~momento~~ autovalor de L^2 , ou seja l , pois

$$[L^2, \mathcal{D}] = 0$$

~~Dai'~~ Também não muda a energia pois

↖

$$[H_0, \mathcal{D}] = 0$$

Dai'

$$\begin{aligned} \langle E, l, m | \vec{k} \rangle &= \sum_{l'} \int dE' \mathcal{D}_{m0}^{l'}(\alpha=\phi, \beta=\Theta, \gamma=0) \delta_{ll'} \delta(E-E') \times \\ &\times \langle E', l', m'=0 | \hbar \hat{e}_z \rangle. \end{aligned}$$

$$= \mathcal{D}_{m0}^{l0}(\alpha=\phi, \beta=\Theta, \gamma=0) \langle E, l, m'=0 | \hbar \hat{e}_z \rangle$$

↑

isto é independente de orientações de $\vec{k}$ e portanto de Θ e ϕ .

Por isso denotamos

$$g_{lE}(\hbar) \equiv \langle E, l, m'=0 | \hbar \hat{e}_z \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}$$

Usando (3.6.51) obtemos

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \cancel{Y_l^m(\hat{k})} Y_l^m(\hat{k}) g_{lE}(\hbar) \quad (7.5.7)$$

Determinação de $g_{RE}(R)$: Nós temos que

$$(H_0 - E) |E, l, m\rangle = 0$$

De maneira análoga

$$\langle \vec{r} | (H_0 - E) = \left(\frac{\hbar^2 \vec{r}^2}{2m} - E \right) \langle \vec{r} |$$

uma vez que $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$.

Portanto

$$\left(\frac{\hbar^2 \vec{r}^2}{2m} - E \right) \langle \vec{r} | E, l, m \rangle = 0$$

Daí da (7.5.7)

$$g_{RE}(R) = N \delta \left(E - \frac{\hbar^2 R^2}{2m} \right)$$

~~onde N é determinado pela normalização de $|E, l, m\rangle$~~

onde N é determinado pela normalização de $|E, l, m\rangle$
dada em (7.5.1), ou seja

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(E - E')$$

Daí

$$\begin{aligned} \langle E', l', m' | E, l, m \rangle &= \int d^3 R'' \langle E', l', m' | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | E, l, m \rangle = \\ &= \int R''^2 dR'' \int d\Omega_{R''} |N|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2 R''^2}{2m} - E' \right) \delta \left(\frac{\hbar^2 R''^2}{2m} - E \right) * \\ &\quad * Y_{l', m'}^*(\hat{R}'') Y_{l, m}(\hat{R}'') \end{aligned}$$

Definindo

(174)

$$E'' = \frac{\hbar^2 k''^2}{2m}$$

temos

$$k''^2 dk'' = \frac{k''^2 dE''}{\frac{dE''}{dk''}} = \frac{m}{\hbar^2 k''} k''^2 dE'' = \frac{m k''}{\hbar^2} dE''$$

Portanto

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \int \frac{m k''}{\hbar^2} dE'' \int d\Omega_{k''} |N|^2 \delta(E'' - E') \delta(E'' - E) * \\ Y_{l'}^{m'*}(\hat{k}'') Y_l^m(\hat{k})$$

Usando o fato que ((3.6.30))

$$\int d\Omega Y_{l'}^{m'*} Y_l^m = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

obtemos

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = |N|^2 \frac{m k'}{\hbar^2} \delta(E - E') \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Logo

$$N = \frac{\hbar}{\sqrt{m k}}$$

^

$$g_{lE}(k) = \frac{\hbar}{\sqrt{m k}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$$

$$\langle \hat{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{m k}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_l^m(\hat{k})$$

Nós podemos agora escrever o ket $|\vec{k}\rangle$ em termos das ondas esféricas. Temos

$$|\vec{k}\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \int dE |Elm\rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |El, m\rangle \Big|_{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar}} Y_l^{m*}(\hat{k})$$

Vemos que a onda plana contém em sua expansão ondas esféricas para todos os valores possíveis de l . Isto está relacionado com o fato de a onda plana ter uma extensão transversal infinita. Logo ela contém todos os valores possíveis de parâmetro de impacto e daí todos os valores de l , pois $b \approx \frac{l\hbar}{p}$ (aprox. semi-clássica $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow L = bp$)

A onda esférica na representação de coordenadas

A eq. de Schrödinger para uma partícula livre em coordenadas esféricas é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] = E \psi$$

Usando separação de variáveis

$$\psi = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

onda

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_l^m = -l(l+1) Y_l^m$$

onde Y_l^m sã os esféricos harmônicos, que satisfazem

$$-i \frac{\partial Y_l^m}{\partial \phi} = m Y_l^m$$

e

$$Y_l^m = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

↑ funções de Legendre associadas.

A equação radial fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_E}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} u_E = E u_E$$

onde

$$u_E(r) = r R(r)$$

$$u_E(r)|_{r=0} = 0,$$

A solução é dada por

$$R(r) = c_1 j_l(kr) + c_2 n_l(kr) \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Para satisfazer a condição de contorno acima temos que ter

$$c_2 = 0 \quad \text{qdo a origem é incluída}$$

j_l - funções de Bessel esféricas

O comportamento assintótico é

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \cos\left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2}\right] \quad n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin\left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2}\right]$$

$$(2l+1)!! = (2l+1)(2l-1)\dots 5.3.1$$

Desta forma a onda esférica livre na representação da coordenada de $\vec{r}$ e forma

$$\langle \vec{r} | E, l, m \rangle = c_l j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi)$$

as funções $n_l(kr)$ não aparecem pois são singulares na origem

Para encontrar c_l usamos a normalização da onda plana:

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_l \sum_m \int dE \langle \vec{r} | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle =$$

$$= \sum_l \sum_m \int dE c_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) \frac{k}{\sqrt{m\hbar}} \delta(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) Y_l^{m*}(\hat{k})$$

$$= \sum_l \frac{k}{\sqrt{m\hbar}} c_l j_l(kr) \underbrace{\sum_m Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k})}_{\equiv}$$

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{k} \cdot \hat{r}) \quad \Leftarrow \text{Teorema da adição}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{k}{\sqrt{m\hbar}} \frac{2l+1}{4\pi} c_l j_l(kr) P_l(\hat{k} \cdot \hat{r})$$

Como $\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos\theta$ e $\hat{k} \cdot \hat{r} = \cos\theta$ temos

$$\frac{e^{i kr \cos\theta}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{k}{\sqrt{m\hbar}} \frac{(2l+1)}{4\pi} c_l j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

Multiplicamos ambos os lados por $P_{l'}(\cos\theta)$ e integramos em $\cos\theta$ ~~obtemos~~ a relação de ortogonalidade dos Y_l^m

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) Y_{l'}^{m'} Y_l^m = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

para $m=m'=0$ e ndm a

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) Y_{l'}^{0*} Y_l^0 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_{l'}^0 P_l^0 = \delta_{ll'}$$

Mas $P_l^0(\cos\theta) \equiv P_l(\cos\theta)$ e dar

$$\int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_{l'}^* P_l = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Obtemos entao

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{e^{ikr \cos\theta}}{(2\pi)^{3/2}} P_{l'}(\cos\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{(2l+1)}{4\pi} c_l j_l(kr) * \\ &\quad * \int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) P_l(\cos\theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{1}{2\pi} \delta_{ll'} c_l j_l \\ &= \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{1}{2\pi} c_{l'} j_{l'}(kr) \end{aligned}$$

Mas $j_l(kr)$ tem a representacao integral

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) e^{ikr \cos\theta} P_l(\cos\theta)$$

Obtemos entao

$$\frac{2i^l}{(2\pi)^{3/2}} j_l(kr) = \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{1}{2\pi} c_l j_l(kr)$$

Logo

$$c_l = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} i^l \frac{\sqrt{m\hbar}}{\hbar} = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar}{\pi}}$$

e dar

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (7.5.18)$$

$\hat{k} \cdot \hat{r}$

Vemos então que a eq. de coordenada de onda esférica é:

$$\langle \vec{x} | E, l, m \rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar}{\pi}} j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) \quad (*) \quad (7.5.20)$$

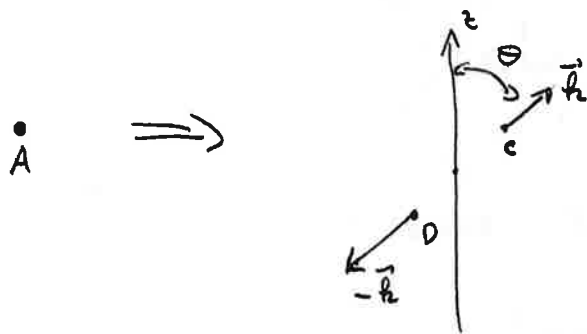
e na eq. de momento nós tínhamos obtido

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_l^m(\hat{k}) \quad (***) \quad (7.5.21)$$

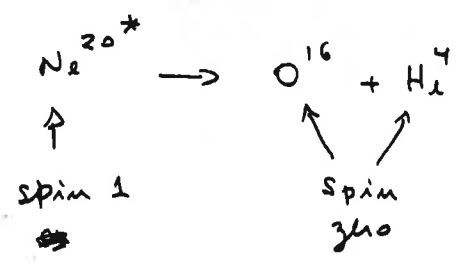
Estas fórmulas serão úteis na expansão em ondas parciais.

Aplicações para o processo de decaimento

Suponha que uma partícula de spin J decaia em duas partículas de spin zero. A Hamiltoniana para este processo é complicada mas nós podemos obter a distribuição angular usando somente a conservação do momento angular.



Um exemplo concreto disto é



Desta forma a função de onda do estado final deve ser da forma $(**)$ com l sendo o spin da partícula que decaiu. Pois como os produtos têm spin nulo, o momento angular orbital tem que ser igual ao spin da partícula que decaiu. (Na verdade cada partícula vai ter momentos l e l' tal que $l+l'=j$)

No caso do Ne^{20*} temos $j=1$ e daí $l=0$ e $l'=1$ ou $l=1$ e $l'=0$.

Se o núcleo "pai" tem um n. quântico magnético (m_z) igual ± 1 então a distribuição angular será dada por $\boxed{\frac{3}{8\pi}}^2$

$$|Y_1^{\pm 1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \Theta$$

~~Para o outro lado se $m_z = 0$ a distribuição angular será dada por $\frac{3}{4\pi} \cos^2 \Theta$~~

Por outro lado se $m_z = 0$ a distribuição angular será

$$|Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \Theta$$

Para uma orientação geral temos

$$\sum_{m=-1}^1 w(m) |Y_1^m|^2$$

No caso do feixe não ser polarizado (do núcleo pai) todos os $W(m)$ são iguais e daí

$$|Y_1^1|^2 + |Y_1^{-1}|^2 + |Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = \frac{3}{4\pi}$$

e não há direção preferida.

No caso de spins mais altos (do núcleo pai) a distribuição angular é mais complexa. No entanto em geral é possível determinar o spin do núcleo pai através da distribuição angular dos produtos do decaimento.

Método das ondas parciais

Tomemos agora o caso em que $V \neq 0$. Vamos assumir que o potencial é esfericamente simétrico, ou seja invariante por rotações.

O operador de transição T ~~constante~~

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots$$

Comuta com L e L^2 .

$$\{T, L\} = 0$$

Logo T é um operador escalar.

Usaremos então a base de ondas esféricas, pois pelo Teorema de Wigner-Eckart diz que

$$\langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle = T_l(E) \delta_{l l'} \delta_{m m'}$$

T - diagonal em l e m

- elementos da diagonal dependem de E e l mas não de m .

Dai a amplitude de espalhamento fica:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_{l l'} \sum_{m m'} \int dE \int dE'$$

$$\times \langle \vec{k}' | E' l' m' \rangle \langle E' l' m' | T | E l m \rangle \langle E l m | \vec{k} \rangle$$

usando (7.524)

~~$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_{l l'} \sum_{m m'} \int dE \int dE' \frac{1}{\sqrt{m k'}} \frac{1}{\sqrt{m k}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$$~~

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_{l l'} \sum_{m m'} \int dE \int dE' \frac{1}{\sqrt{m k'}} \frac{1}{\sqrt{m k}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$$

$$\langle E' l' m' | T | E l m \rangle Y_{l'}^{m'}(\hat{k}') Y_{l m}^*(\hat{k})$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_{l m} \frac{\hbar^2}{m k} T_l(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} Y_l^m(\hat{k}') Y_l^m(\hat{k})$$

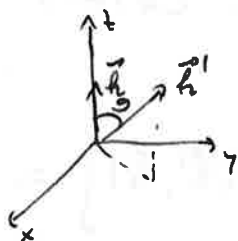
$$= -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{l m} T_l(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} Y_l^m(\hat{k}') Y_l^m(\hat{k})$$

Vamos escolher o eixo z na direção do momento incidente $\vec{k}$
 Nós temos da (3.6.50)

$$Y_l^m(\hat{k}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} \quad \hat{k} \equiv \hat{e}_z \quad (*)$$

Tomando θ como sendo o ângulo entre $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ temos

$$P_l^0(\hat{k}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$



Consideramos somente P_l^0 pois somente termos com $m=0$ vão aparecer
 na expressão de $f(\vec{k}', \vec{k})$ devido a (*)

Temos então

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2}{h} \sum_l T_l(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

Definimos a amplitude da onda parcial como

$$f_l(k) = -\frac{\pi T_l(\frac{\hbar^2 k^2}{2m})}{h}$$

e daí

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta)$$

Significado físico de f_l



(181)

Do apêndice A temos (A.5.15) on página 176.

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{kr} \cos\left(kr - \left(l + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right) = \frac{+1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right) =$$
$$= + \frac{\left(e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}\right)}{2i kr}$$

Usando a expansão p/ distâncias grandes de $\langle \vec{x} | \psi^+ \rangle$ dada em (7.1.33) temos

$$\langle \vec{x} | \psi^+ \rangle \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}', \vec{k}) \right] =$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) e^{i\frac{\pi}{2}l} \left(\frac{e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}}{2i kr} \right) + \right.$$
$$\left. + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\}$$

Onde usamos a expansão da onda plana em ondas esféricas, dada por (7.5.18) e a expansão da amplitude (7.6.6)

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l(\cos\theta)}{2i k} \left\{ \frac{2i k e^{ikr}}{r} f_l + \frac{(e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)})}{r} \right\}$$

$$\langle \vec{x} | \psi^+ \rangle \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l(\cos\theta)}{2i k} \left[(1 + 2i k f_l) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr - l\pi)}}{r} \right]$$

(7.6.8)

Vemos então que: se o potencial V nulo nós analisamos a onda plana como a soma de uma onda esférica emergente $\frac{e^{ikr}}{r}$ e uma onda esférica "incominda" $= \frac{e^{-i(kr - \ell\pi)}}{r}$ para cada ℓ

Na presença do potencial a mudança V acontece devido ao coeficiente

$$(1 + 2i\ell f_\ell)$$

na onda emergente. A onda "incominda" não muda.

Phase shifts e unitariedade

Em uma formulação independente do tempo a densidade de corrente deve satisfazer

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = - \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = 0$$

Consideremos uma esfera S de raio muito grande. Pelo teorema de Gauss

$$\int_S \vec{j} \cdot d\vec{S} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \cdot dV = 0$$

Isto significa que não há fonte ou absorção de partículas.

Ou seja o fluxo incidente deve ser igual ao fluxo emergente.

Pelo conservação do momento angular isto deve ser verdade para cada onda parcial separadamente. Ou seja o

coeficiente de $\frac{e^{ikr}}{r}$ deve ser igual ao de $\frac{e^{-ikr}}{r}$.

Definindo

$$S_L(k) = 1 + 2ik f_L(k)$$

(181)

temos que (da 7.6.8)

$$|S_L(k)| = 1$$

Logo a mudança na onda emergente deve ser no máximo uma fase. É de aí chamado de relação de unitariedade.

Definimos δ_L como sendo esta fase

$$S_L = e^{2i\delta_L}$$

δ_L - $\left\{ \begin{array}{l} \text{real} \\ \text{função de } k \end{array} \right.$ e o fator 2 por conveniência.

Temos então

$$f_L = \frac{S_L - 1}{2ik}$$

ou ainda

$$f_L = \frac{e^{2i\delta_L} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_L} \sin \delta_L}{k} = \frac{1}{k \cot \delta_L - i}$$

A amplitude ψ então dada por

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_L} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_L} \sin \delta_L P_l(\cos \theta) \quad (7.6.17)$$

A expressão de $f(\theta)$ é obtida de dois princípios: o de invariância por rotações e o de conservação da probabilidade

A seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ é obtida tomando-se o módulo quadrado de $f(\theta)$.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

E a seção de choque total é:

$$\sigma_{TOT} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega =$$

$$= \frac{1}{k^2} \sum_l \sum_{l'} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l e^{-i\delta_{l'}} \sin\delta_{l'} P_l P_{l'}$$

Usando $\int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_l P_{l'} = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$

$$\boxed{\sigma_{TOT} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l} \quad (7.6.18)$$

Usando o teorema óptico

$$\text{Im} f(\theta=0) = \sum_l \frac{(2l+1)}{k} \text{Im} (e^{i\delta_l} \sin\delta_l) P_l(\cos\theta) \Big|_{\theta=0}$$

Usando $P_l(1) = 1$

$$e^{i\delta_l} = \cos\delta_l + i \sin\delta_l$$

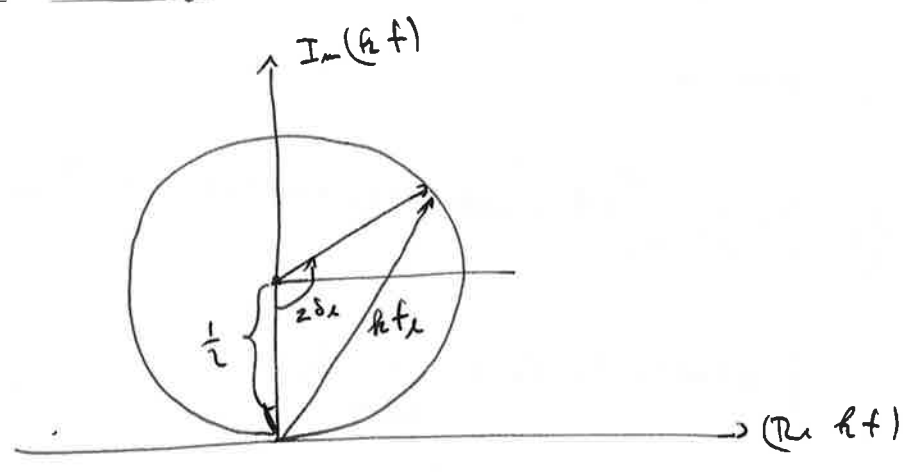
$$\text{Im} f(\theta=0) = \sum_l \frac{(2l+1)}{k} \sin^2 \delta_l = \frac{k}{4\pi} \sigma_{TOT}$$

E portanto verificamos a validade do teorema óptico

Variação de δ_1 com a energia

A relação de unitariedade coloca restrições na forma como f_1 e portanto δ_1 pode variar com k . (energia)

Diagrama de Argand



De $f_1 = \frac{e^{2i\delta_1} - 1}{2ik}$ temos

$$k f_1 = \frac{i}{2} + \frac{1}{2} e^{-i\pi/2 + 2i\delta_1}$$

~~Temos que~~

~~$|k f_1|^2 = 1 + 4|k f_1|^2 + \frac{2i(k f_1 - (k f_1)^*)}{2i \text{Im} k f_1}$~~

Vemos então que $k f_1$ tem que ficar dentro do círculo de raio $\frac{1}{2}$, conhecido como o círculo unitário.

Supondo que f_1 é pequeno. Então f_1 deve estar na parte inferior do círculo. δ_1 pode ser negativo ou positivo mas f_1 é praticamente real.

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} \approx \frac{(1+i\delta_l) \delta_l}{k} \sim \frac{\delta_l}{k}$$

Se $\delta_l \sim \frac{\pi}{2}$ temos que hf_l é praticamente imaginário puro e a magnitude de hf_l é máxima. Neste caso a onda parcial associada a l está em ressonância com o potencial adiante.

Nota que o máximo da contribuição a σ_{tot} de cada ordem total da onda parcial é ($\delta_l \sim \frac{\pi}{2}$)

$$\sigma_{tot}^{(l)} \sim 4\pi \lambda^2 (2l+1) \quad \left(\lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k} \right)$$

Conexão com a aproximação Eikonal

Como vimos a aprox. Eikonal é válida p/ altas energias, isto é, $\lambda \ll$ alcance potencial, Desta forma muitas ondas parciais vão contribuir e podemos ainda considerar l como uma variável contínua.

Semiclassicamente temos $l = b k$ uma vez que

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = b p \text{ e daí } l \hbar = b p = b \hbar k \Rightarrow l = b k$$

Tomamos

$$l_{max} = k R$$

e fazemos a substituição

$$\sum_l^{l_{max} = kR} \rightarrow k \int db$$

$$P_l(\cos \theta) \xrightarrow[\text{aprox.}]{\text{Legendre}} J_0(l\theta) = J_0(kb\theta)$$

$$\delta_l \rightarrow \Delta(b) |_{b=l/k}$$

onde usamos (Gradshteyn pag 1003)

$$\lim_{l \rightarrow \infty} l^m P_l^{-m}(\cos \frac{x}{l}) = J_m(x)$$

Temos que $\Delta(l) \propto \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{b^2 + z^2}) dz \neq 0$

para $l > l_{\max} = kR$ pois $V \xrightarrow{r \gg R} 0$

Daí $e^{2i\Delta l} - 1 = e^{2i\Delta(l)} - 1 = 0$ p/ $l > l_{\max}$

Daí de (7.6.17)

$$\begin{aligned} f(\theta) &\rightarrow k \int db \, 2kb \frac{(e^{2i\Delta(b)} - 1)}{2i k} J_0(kb\theta) = \\ &= -i k \int db \, b J_0(kb\theta) (e^{2i\Delta(b)} - 1) \end{aligned}$$

~~Nesta aprox~~ a isto é a expressão para $f(\theta)$ na aprox. Eikonal. (7.4.13)

Nesta aprox. S_1 pode ser calculada usando a fórmula explícita de $\Delta(b)$ dada por (7.4.14).

Determinação do "phase shift"

Vamos ver agora como determinar o "phase shift" para um dado potencial. Vamos supor que V é nulo para $r > R$ onde R é o alcance do potencial.

Fora do alcance do potencial a função de onda é a mesma de uma partícula livre. (onda esférica).

Como a origem está excluída desta região podemos

Considerar também as funções $m_l(r)$ que são singulares em $r=0$

Usamos as funções esféricas de Hankel

$$h_l^{(1)} = j_l + i m_l \quad h_l^{(2)} = j_l - i m_l$$

Usando o comportamento a grandes distâncias de j_l e m_l dados na página 176, temos

$$h_l^{(1)} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \left\{ \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + i \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \right\} =$$

$$= \frac{1}{2\rho} \left\{ 2 e^{i(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2})} \right\} = \frac{1}{\rho} e^{i(\rho - l\frac{\pi}{2})} e^{-i\frac{\pi}{2}}$$

$$\cancel{= \frac{e^{i(\rho - l\frac{\pi}{2})}}{i\rho}} = \frac{e^{i(\rho - l\frac{\pi}{2})}}{i\rho} \quad (7.6.28a)$$

e analogamente (note sinal (-) que está embaixo no denominador)

$$h_l^{(2)} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} - \frac{e^{-i(\rho - l\frac{\pi}{2})}}{i\rho} \quad (7.6.28b)$$

A função da onda fora do alcance do potencial é então:

$$\langle \vec{x} | \psi^+ \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l A_l(r) P_l(\cos\theta) \quad r > R \quad (7.6.29)$$

onde

$$A_l(r) = c_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr) \quad (7.6.30)$$

A_l é escolhido de tal forma que $A_l = j_l$ quando $V=0$.

Como vimos anteriormente (pag 184) a função de onda para $r \rightarrow \infty$ que é solução do problema de espalhamento é dada por:

$$\langle x | \psi^+ \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l}{2ikr} \left[e^{i2\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)} \right]$$

Comparando com (7.6.29) e (7.6.30) e usando o comportamento a grandes distâncias (7.6.28)

$$\langle x | \psi^+ \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l}{i kr} e^{i1\pi/2} \left[e_l^{(1)} e^{i(kr-l\pi/2)} + c_l^{(2)} e^{-i(kr-l\pi/2)} \right]$$

obtemos

$$c_l^{(1)} = \frac{1}{2} e^{2i\delta_l} \quad c_l^{(2)} = +\frac{1}{2}$$

Daí

$$\begin{aligned} A_l(r) &= \frac{e^{i\delta_l}}{2} \left[e^{i\delta_l} h_l^{(1)} + e^{-i\delta_l} h_l^{(2)} \right] = \\ &= \frac{e^{i\delta_l}}{2} \left[(\cos \delta_l + i \sin \delta_l) (j_l + i n_l) + (\cos \delta_l - i \sin \delta_l) (j_l - i n_l) \right] \\ &= e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l - \sin \delta_l n_l] \end{aligned} \quad (7.6.33)$$

Considere a derivada logarítmica

$$\beta_l = \left(\frac{kr}{A_l} \frac{dA_l}{dr} \right)_{r=R} = \frac{kr}{A_l} e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j'_l - \sin \delta_l n'_l] \Big|_{r=R}$$

$$\beta_l = kR \frac{\cos \delta_l j'_l(kR) - \sin \delta_l n'_l(kR)}{\cos \delta_l j_l(kR) - \sin \delta_l n_l(kR)} \quad (7.6.34)$$

onde a linha ''' representa derivada com relação ao argumento kR

Invertendo a relação

$$\beta_l (j_l(kR) - \tan \delta_l n_l(kR)) = kR (j'_l(kR) - \tan \delta_l n'_l(kR))$$

$$\tan \delta_l (kR n'_l - \beta_l n_l) = kR j'_l - \beta_l j_l$$

e dar

$$\tan \delta_l = \frac{kR j'_l(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kR n'_l(kR) - \beta_l n_l(kR)} \quad (7.6.35)$$

Portanto se conhecermos a derivada logarítmica da função radial $A_l(r)$ nós determinamos o phase shift δ_l .

Consideremos agora a solução da eq. de Schrodinger para a região onde o potencial V não nulo $r < R$.

Para o caso de V ser esfericamente simétrico temos que resolver a eq. radial (unidimensional)

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0$$

onde $u_l = r A_l(r)$

e com a condição de contorno

$$u_l|_{r=0} = 0$$

Resolvemos então esta equação (se necessário numericamente). Obtemos então a derivada logarítmica em $r=R$.

Pela continuidade da função de onda devemos ter em $r=R$

$$\beta_e \Big|_{\text{solu\c{c}\~{o}es interior}} = \beta_e \Big|_{\text{solu\c{c}\~{o}es exterior}}$$

Portanto o phase shift δ obtido substituindo-se β_e p/ a solu\c{c}\~{o}es interior em $r=R$ na eq (7.6.35)

Exemplo da esfera dura

Temos o potencial

$$V = \begin{cases} \infty & \text{p/ } r \leq R \\ 0 & \text{p/ } r > R \end{cases}$$

Neste caso n\~{o} precisamos calcular β_e . ~~Por\c{e}m~~ A fun\c{c}\~{o}es de onda deve se anular em $r=R$ e dar de (7.6.33)

$$\cos \delta_e j_l(kR) - \sin \delta_e n_l(kR) = 0$$

$$\text{e} \quad \tan \delta_e = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}$$

Nota que n\~{o} fizemos aproxima\c{c}\~{o}es para obter esta express\~{a}o. Tomemos o caso $l=0$. Dar (veja ap\~{e}ndice A)

$$\tan \delta_0 = \frac{\sin kR/kR}{-\cos kR/kR} = -\tan kR \quad \Bigg| \quad \begin{aligned} j_0(p) &= \frac{\sin p}{p} \\ n_0(p) &= -\frac{\cos p}{p} \end{aligned}$$

e dar

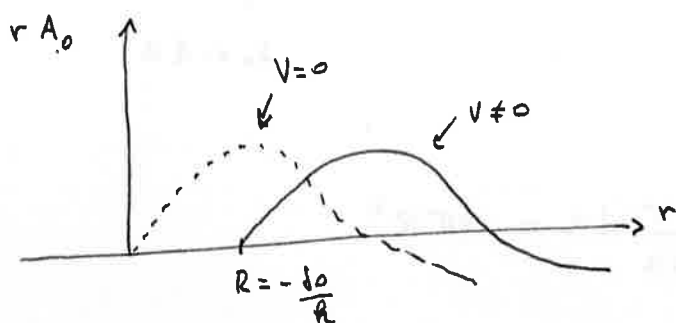
$$\delta_0 = -kR$$

Da (7.6.37) temos então

$$A_{l=0}(r) = e^{i\delta_0} \left[\frac{\sin kr}{kr} \cos \frac{-\delta_0}{kr} + \frac{\cos kr}{kr} \sin \frac{-\delta_0}{kr} \right]$$

$$\begin{aligned} &= e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr - kR)}{kr} \\ &= e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr} \end{aligned} \quad (7.6.45)$$

Portanto $A_{l=0}$ tem o mesmo comportamento que a onda livre mas deslocada de δ_0 :



Vejamos agora o comportamento de δ_l p/ altas e baixas energias.

Energia baixa

Neste caso temos k pequeno ou seja $kR \ll 1$. ($\frac{R}{\lambda} \ll 1$)

Usando

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

obtemos

$$\tan \delta_l = - \frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+1)!! (2l-1)!!} = - \frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+1) [(2l-1)!!]^2}$$

Portanto

$$\frac{\tan \delta_l}{\tan \delta_0} \sim (kR)^2 \ll 1$$

Desta forma podemos desprezar δ_l para $l \neq 0$. Temos então um espalhamento de onda S_0 , que é o que geralmente ocorre a baixas energias para potências de alcance finito. Portanto de (7.6.17)

$$f(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 P_0$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \approx \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \sim \frac{\delta_0^2}{k^2} = R^2 \quad \text{for } kR \ll 1$$

$\uparrow$
 $\delta_0 \approx -kR$

Integrando

$$\sigma_{\text{TOT}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 4\pi R^2$$

A seção de choque geométrica (que é a seção da esfera que a onda incidente "vê") é πR^2 . Portanto σ_{TOT} é 4 vezes maior e igual à área da esfera. Como a energia é baixa mas é de se esperar resultados clássicos.

Altas energias

Nesta limite vale a aprox. semiclássica e esperamos que todos valores de l até $l_{\text{max}} = kR$ contribuam.
 $(\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow l = kb)$

De (7.6.18) temos então

$$\sigma_{\text{TOT}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Usando

$$j_l(kr) \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \sin(kr - l\frac{\pi}{2})$$

$$n_l(kr) \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} -\frac{1}{kr} \cos(kr - l\frac{\pi}{2})$$

temos

$$\tan \delta_l \cong -\tan(kR - l\frac{\pi}{2})$$

e daí $\sin^2 \delta_l \cong \sin^2(kR - l\frac{\pi}{2})$

Quando l aumenta de uma unidade δ_l diminui de $\frac{\pi}{2}$.

Então

$$\sin^2 \delta_l + \sin^2 \delta_{l+1} = \sin^2 \delta_l + \sin^2(\delta_l - \frac{\pi}{2})$$



Como $\sin(\delta_l - \frac{\pi}{2}) = -\cos \delta_l$

e daí $\sin^2 \delta_l + \sin^2 \delta_{l+1} = 1$.

Escrevemos

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{l_{max}} (2l+1) \sin^2 \delta_l &= \sin^2 \delta_0 + 3 \sin^2 \delta_1 + 5 \sin^2 \delta_2 + 7 \sin^2 \delta_3 + \dots \\ &= (\sin^2 \delta_0 + \sin^2 \delta_1) + 2(\sin^2 \delta_1 + \sin^2 \delta_2) + \\ &\quad + 3(\sin^2 \delta_2 + \sin^2 \delta_3) + 4(\sin^2 \delta_3 + \sin^2 \delta_4) + \dots \\ &\cong \sum_{l=1}^{l_{max}} l = \frac{l_{max}(l_{max}+1)}{2} = \frac{(kR)^2 + kR}{2} \end{aligned}$$

Como $kR \gg 1$ desprezamos o termo linear e daí

$$\sigma_{TOT} = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(kR)^2}{2} = 2\pi R^2$$

Isto é duas vezes a seção de choque geométrica.

A partir do fator 2 e a seguinte:

de (A.6.17) temos

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) e^{i\delta_l} \text{ sendo } P_l = \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l + \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) P_l \\ &= f_{\text{reflex}} + f_{\text{sombra}} \end{aligned}$$

Daí

$$\begin{aligned} \int |f_{\text{reflex}}|^2 dR &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \sum_{l,l'} \frac{1}{4k^2} (2l+1)(2l'+1) \times \\ &\quad \times e^{2i\delta_l} e^{-2i\delta_{l'}} P_l P_{l'} \end{aligned}$$

Como $\int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_l P_{l'} = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'}$

$$\begin{aligned} \int |f_{\text{ref}}|^2 dR &= \frac{2\pi}{4k^2} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) 2 \\ &= \frac{\pi}{k^2} \left\{ 2 \sum_{l=0}^{kR} l + \sum_{l=0}^{kR} 1 \right\} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \left\{ 2 \frac{kR(kR+1)}{2} + (kR+1) \right\} \\ &\cong \pi R^2 + O(kR) \end{aligned}$$

onde desprezamos o termo linear em kR frente ao termo quadrático, uma vez que $kR \gg 1$.

Quanto a f_{sombra} , nós vimos que ele é puramente imaginário:

$$f_{\text{sombra}} = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) P_l(\cos\theta)$$

Ele tem um valor mais alto na direção $\theta=0$ onde $P_l(1)=1$, e ainda as contribuições de vários l adicionam-se coerentemente.

Usando a o comportamento ~~esta~~ de P_l para θ pequeno e a grande dada na página (190) temos

$$P_l(\cos\theta) \underset{\substack{\theta \text{ peg.} \\ l \text{ grande}}}{\sim} J_0(l\theta)$$

e daí

$$\begin{aligned} f_{\text{sombra}} &\approx \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) J_0(l\theta) \\ &\sim \frac{i}{2k} k \int_0^R db \, 2kb J_0(kb\theta) \quad (l \sim kb) \\ &= iR \frac{J_1(kR\theta)}{\theta} \quad (?) \end{aligned}$$

Esta é a fórmula ~~da~~ para a ~~da~~ difração de Fraunhofer com um pico forte em $\theta=0$.

Vejam agora a contribuição à seção de choque:

$$\begin{aligned} \int |f_{\text{shadow}}|^2 d\Omega &= \frac{1}{4k^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) P_l P_{l'} \\ &= \frac{2\pi}{4k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) \frac{1}{(2l+1)} \delta_{ll'} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) \cong \pi R^2 + O(kR) \end{aligned}$$

onde fizemos os mesmos cálculos que na página anterior.

Por outro lado temos que

$$f_{\text{sombra}}^* f_{\text{ref}} + f_{\text{sombra}} f_{\text{ref}}^* = -\frac{1}{4k^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) \underbrace{(e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}})}_{2 \cos 2\delta_l} P_l P_{l'}$$

Como $2\delta_{l+1} = 2\delta_l - \pi$

Vemos que isto oscila e no limite o resultado é nulo

Daí

$$\text{Re}(f_{\text{sombra}}^* f_{\text{ref}}) \approx 0$$

e portanto

$$\sigma_{\text{TOT}} = \underbrace{\pi R^2}_{\sigma_{\text{ref}}} + \underbrace{\pi R^2}_{\sigma_{\text{sombra}}}$$

O 2º termo é dito sombra porque para o espalhamento da esfera dura ~~onde~~ a altas energias as ondas com parâmetro de impacto menor que R devem ser ~~as~~ defletidas. Logo atrás da esfera existe probabilidade nula de encontrar a partícula e daí temos sombra. Em M.D. esta sombra é devido a interferência destrutiva entre a onda incidente e a onda espalhada. Desta forma precisamos de espalhamento para criar a sombra. De 7.6.8 temos que o coeficiente de $\frac{e^{ikr}}{r}$ é $(1 + 2ikf_l)$, onde 1 é devido a onda incidente. Desta forma precisamos f_l positivo e imaginário p/ cancelar o 1.

Na verdade isto dá uma interpretação física ao termo óptico.

Notamos que

$$\frac{4\pi}{h} \operatorname{Im} f(0) = \frac{4\pi}{h} \operatorname{Im} (f_{\text{somb.}}(0))$$

uma vez que $\operatorname{Im} (f_{\text{ref}}(0))$ é nulo devido a fase oscilante.

De (7.6.54)

$$\begin{aligned} \frac{4\pi}{h} \operatorname{Im} f_{\text{somb.}}(0) &= \frac{4\pi}{h} \operatorname{Im} \left[\frac{i}{2h} \sum_{l=0}^{hR} (2l+1) P_l(1) \right] = \\ &= \frac{2\pi}{h^2} \sum_{l=0}^{hR} (2l+1) \simeq 2\pi R^2 \quad (\text{mesmo cálculo pag 198}) \end{aligned}$$

e daí verificamos o teorema óptico

Espalhamento a baixas energias e estados ligados

Para energias baixas, ou seja $\lambda = \frac{2\pi}{h} > R$ as ondas parciais para l grande ^{não} são em geral ~~mas~~ importantes.

Classicamente isto quer dizer que a partícula não pode vencer a barreira centrífuga e portanto o potencial não tem efeito.

Em MQ o potencial efetivo para a onda de momento angular l é

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

A menos que o potencial seja forte o suficiente para ter estados ligados p/ $l \neq 0$ e $E \approx 0$, o comportamento da função de onda radial é determinada pela barreira

Centrifuga, o que implica que ela deve ser parâvida a $f_l(kr)$.

É possível estimar o comportamento do phase shift usando a equação integral para a onda parcial (Veja Problema 8)

$$\frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = - \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr f_l(kr) V(r) A_l(r) r^2 \quad (*)$$

Se A_l não é muito diferente de f_l e $\frac{1}{k}$ é muito maior que o alcance do potencial, temos

$$f_l(kr) \xrightarrow{kr \gg 0} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}$$

e daí

$$\int_0^\infty dr r^2 f_l V(r) A_l \rightarrow \int_0^R dr r^2 V(r) \left[\frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \right]^2 \approx k^{2l} F(R)$$

Logo o lado direito de (*) contribui comprido com k^{2l} .

Para δ_l pequeno o lado esquerdo varia como

$$\frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} \rightarrow \frac{(1+i\delta_l) \delta_l}{k} \sim \frac{\delta_l}{k}$$

Portanto de (*) temos

$$\delta_l \sim k^{2l+1} \quad \text{para } k \text{ e } \delta_l \text{ pequenos.}$$

Logo para um potencial de alcance finito e a baixas energias o espalhamento da onda S é mais importante.

Pozo ou barreira retangular

Vamos considerar o espalhamento de onda δ pelo potencial

$$V = \begin{cases} V_0 = \text{cte} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad \begin{cases} V_0 > 0 & \text{repulsivo} \\ V_0 < 0 & \text{atractivo} \end{cases}$$

A função de onda fora do alcance do potencial, como vimos, em (7.6.33) ^(7.6.45) deve se comportar como

$$\begin{aligned} e^{i\delta_0} [\cos \delta_0 f_0(kr) - \sin \delta_0 u_0(kr)] &= e^{i\delta_0} \\ &= e^{i\delta_0} \left[\cos \delta_0 \frac{\sin kr}{kr} + \sin \delta_0 \frac{\cos kr}{kr} \right] = e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr} \end{aligned}$$

A solução dentro do potencial deve satisfazer $p/l=0$

$$\frac{d^2 u_0}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) u_0 = 0 \quad u_0|_{r=0} = 0$$

e portanto u

$$u_0 \approx \sin k'r$$

onde

$$k'^2 = k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \Rightarrow E - V_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$$

Portanto para $E > V_0$ a função de onda ^{interior e também} é sinusoidal.

No caso $V_0 > E$ temos

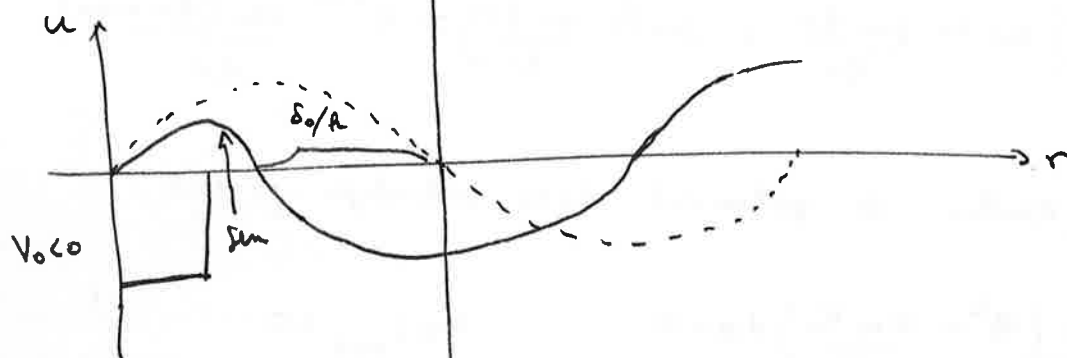
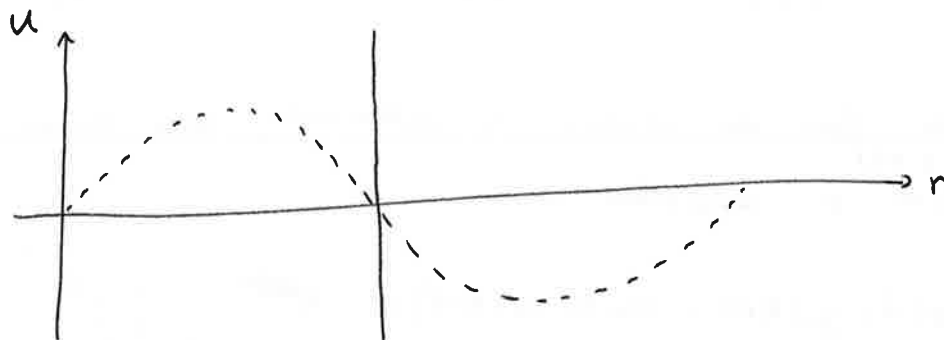
$$u_0 \approx \sinh Kr$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad \text{e} \quad K \equiv i k'$$

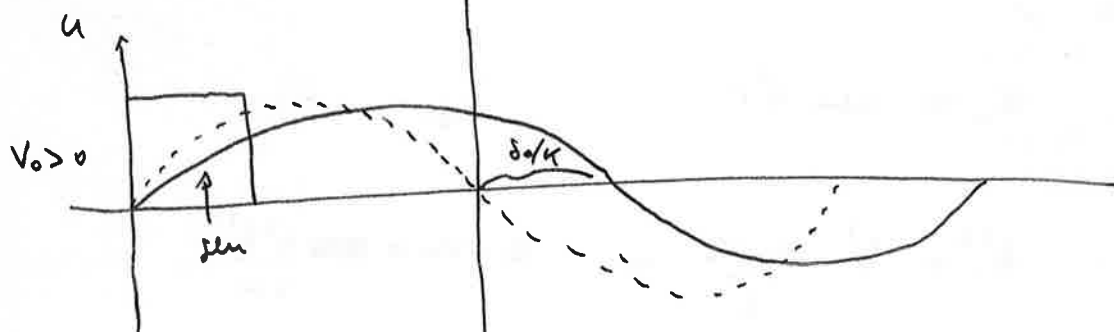
Nota que para $E > V_0$ temos

se $V_0 < 0$ então $k' > k$ ou $\lambda' < \lambda$

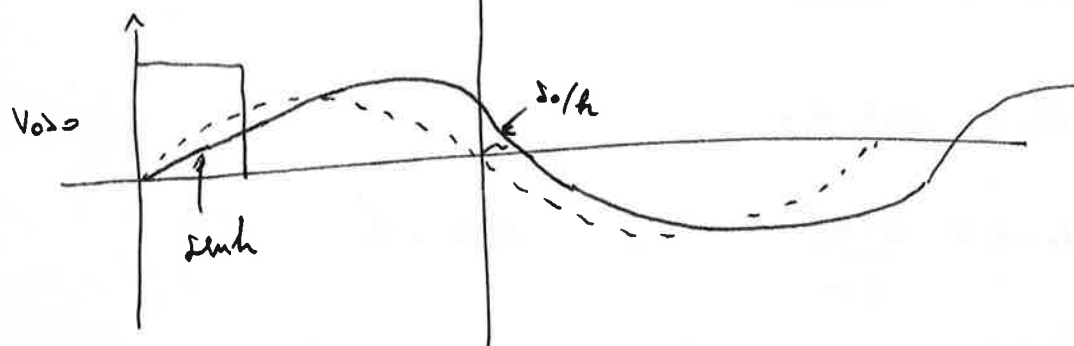
se $V_0 > 0$ então $k' < k$ ou $\lambda' > \lambda$



$E > V_0$



$E > V_0$



$E < V_0$

Notemos então que $\delta > 0$ se $V_0 < 0$
 $\delta < 0$ se $V_0 > 0$

Consideremos o caso atrativo. e vamos aumentar a magnitude de V_0 . Conforme $|V_0|$ aumenta a curvatura da onda aumenta.

Sugere-se que $1/4$ do ciclo esteja no intervalo $[0, R]$.

O phase shift é então $\frac{\pi}{2}$ e isto implica uma seq. de choques ^{máximo} para a onda δ pois $\sin^2 \delta_0 \sim 1$. Se aumentarmos $|V_0|$

ainda mais vamos atingir o ponto onde $1/2$ ciclo está no intervalo $[0, R]$. Dono $\delta_0 = \pi$ e consequentemente $\sin^2 \delta_0 = 0$

Logo

$$\sigma_{l=0} = 0$$

apesar da forte atração do potencial. Se a energia é baixa o ~~da~~ ~~insuficiente~~ ~~para~~ ~~isto~~ de tal forma que ondas de $l \neq 0$ não são importantes nós temos uma transmissão da onda incidente quase que perfeita. Isto é conhecido como efeito Ramsauer-Townsend e foi observado no espalhamento de elétrons por gases nobres. (Argônio, Criptônio, Xenônio). Ele foi observado primeiramente em 1923 antes da mecânica ondulatória e era considerado um grande mistério.

Espalhamento a energia nula e estados ligados

Vamos considerar o espalhamento a energias extremamente baixas ($E \sim 0$). Para $r > R$ e $l = 0$ a eq. radial ^{exterior} ~~interior~~ é

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = 0$$

A solução é então

$$u(r) = cte (r-a)$$

Isto pode ser entendido como um limite de comprimento da onda infinitamente longo. da expressão usual q/ a função de onda exterior. ($u \sim r A_e$ e A_e dado por 7.6.45)

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sin(kr + \delta_0) = \lim_{k \rightarrow 0} \sin\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right)$$

$$u_{l=0} = r A_{l=0} = e^{i\delta_0} r \left[\frac{\sin kr}{kr} \cos \delta_0 + \frac{\cos kr}{kr} \sin \delta_0 \right] = e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{k}$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} u_{l=0} = e^{i\delta_0} r \left[\cos \delta_0 + \frac{1}{kr} \sin \delta_0 \right] =$$

$$= e^{i\delta_0} \left(\cos \delta_0 r + \frac{\sin \delta_0}{k} \right) = e^{i\delta_0} \cos \delta_0 \left(r + \frac{t_0 \delta_0}{k} \right)$$

e portanto tem a mesma forma acima com $a = -\frac{t_0 \delta_0}{k}$

Temos então

$$\frac{u'}{u} = \frac{k \cos(kr + \delta_0)}{\frac{\sin(kr + \delta_0)}{k}} = k \cot(kr + \delta_0)$$

$$\text{ou então } u' = e^{i\delta_0} \cos(kr + \delta_0) \xrightarrow{k \rightarrow 0} e^{i\delta_0} \cos \delta_0$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{u'}{u} = \frac{e^{i\delta_0} \cos \delta_0}{e^{i\delta_0} \cos \delta_0 \left(r + \frac{t_0 \delta_0}{k} \right)} = \frac{1}{r + \frac{t_0 \delta_0}{k}}$$

A quantidade $a = -\frac{t_0 \delta_0}{k}$ é chamado de comprimento de espalhamento.

De (7.6.6) e (7.6.16) temos,

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta)$$

$$\frac{\sin \delta_l}{k(\cos \delta_l - i \sin \delta_l)} =$$

$$\text{onde } f_l = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = \frac{1}{k \cot \delta_l - i} = \frac{1}{k(\cos \delta_l - i \sin \delta_l) / \sin \delta_l}$$

No limite de $k \rightarrow 0$ somente a ordem $l=0$ contribui e daí

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{TOT}} = \sigma_{l=0} &= \int d\Omega |f_0|^2 = 4\pi \left| \frac{1}{k \cot \delta_0 - i} \right|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2 \cot^2 \delta_0 + 1} \end{aligned}$$

Uma vez que $P_0(\cos \theta) = 1$

De (7.7.3) temos, $\delta_l \sim k^{2l+1}$ p/ $k \rightarrow 0$

Daí

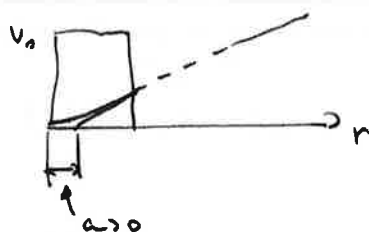
~~$$\frac{1}{k \cot \delta_0} \approx \frac{1}{k} \left(1 + O(k^2) \right)$$~~

$$\frac{1}{k \cot \delta_0} = \frac{t_0}{k} \approx \frac{1}{k} (k + O(k^3) \dots)$$

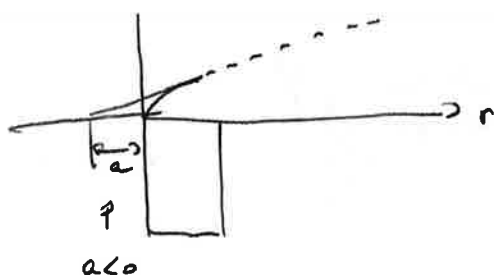
Portanto no limite $k \rightarrow 0$ $k \cot \delta_0$ é muito mais k e daí

$$\sigma_{\text{TOT}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k^2 \cot^2 \delta_0} = 4\pi a^2$$

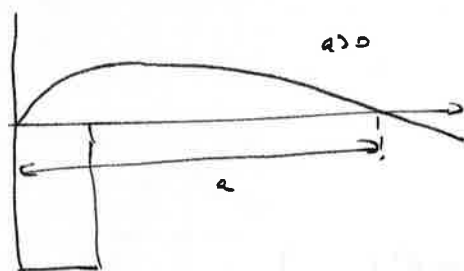
Apesar de a ter a mesma dimensão de R (comprimento) eles podem diferir por ordens de magnitude. Vejamos o significado físico de a . Ele é a interseção da função de onda exterior com o eixo dos r . Para um potencial repulsivo temos $\delta_0 < 0$ e daí $a > 0$ e ele é aproximadamente da ordem de R .



Para um potencial atractivo temos: $V_0 > 0$ e $a < 0$



Se aumentamos a atraco a fun de onda exterior pode cruzar o eixo- r novamente, no lado positivo.



A razo r que δ_0 cresce e $\cos \delta_0$ pode ficar negativo

Lembre-se que $\lim_{k \rightarrow 0} U_{l=0} = \cos \delta_0 \left(r + \frac{t_0 \delta_0}{k} \right)$
↑
slope

A troca do sinal do slope e das δ_l com o aumento da atrac est relacionado com o aparecimento de ~~um~~ estado ligado. Vejamos isto mais em detalhe.

Para a bastante grande e positivo a fun de onda ψ essencialmente chata para $r > R$. Mas

$$u(r) = u_0 (r-a)$$

para $a \gg 1$ não é tão diferente de e^{-kr} com $k \approx 0$.

Mas e^{-kr} com $k \approx 0$ é uma a função de onda de um estado ligado para $r > R$ e energia E infinitesimalmente negativa.

A função de onda interna ($r < R$) $\psi \propto e^{i\sqrt{E}r}$ (espalhamento com energia nula) é o caso $E = 0^-$ (estado ligado com energia de ligação infinitesimalmente pequena) se essencialmente as mesmas pois nos dois casos k' em $e^{-k'r}$ é determinado por

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - V_0 \sim |V_0| \quad E = \text{pequeno (positivo ou negativo)}$$

Como as funções de onda interna são as mesmas para as duas situações nós podemos igualar a derivada logarítmica da função de onda ligada com a derivada da solução envolvendo espalhamento com energia cinética nula

$$\left. \frac{-k e^{-kr}}{e^{-kr}} \right|_{r=R} = \left. \left(\frac{1}{r-a} \right) \right|_{r=R}$$

$$\text{De } R \ll a \quad k \sim \frac{1}{a}$$

A energia de ligação satisfaz

$$E_{BE} = -E_{\text{estado ligado}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

e temos então uma relação entre comprimento de espalhamento e energia de ligação. Isto é interessante pois podemos determinar energias de ligação fazendo espalhamento com energia

extremamente baixa, desde que a medida seja grande comparado com o alcance do potencial. Isto foi primeiramente proposto por Wigner no caso do espalhamento np .

Experimentalmente o estado 3S_1 do sistema np tem um estado ligado que é o deuteron com

$$E_{BE} = 2.26 \text{ MeV}$$

O comprimento de espalhamento é medido e

$$a_{triplet} = 5.4 \times 10^{-13} \text{ cm}$$

dando uma energia de ligação

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} &= \frac{\hbar^2}{m_N a^2} = m_N c^2 \left(\frac{\hbar}{m_N c a} \right)^2 \\ &= 938 \text{ MeV} \left(\frac{2.1 \times 10^{-14} \text{ cm}}{5.4 \times 10^{-13} \text{ cm}} \right)^2 = 1.4 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Onde μ é a massa reduzida que foi aproximada por $m_N/2$

A concordância não é boa. A razão é que as funções de onda intensas não são exatamente as esféricas e a $a_{triplet} \gg R$ não é uma boa aproximação para o deuteron.

Um resultado melhor pode ser obtido tomando o próximo termo na expansão de $k \cot \delta_0$ como função de k .

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2$$

onde r_0 é conhecido como o alcance efetivo.

Estados ligados como polos de $S_l(k)$

De (7.6.8) e (7.6.12) temos

$$\langle \chi | \psi \rangle \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l}{2ik} \left[S_l \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right]$$

Estamos interessados em estudar as propriedades analíticas de S_l para $l=0$. Vemos que a função de onda radial para $l=0$ é proporcional a

$$S_0 \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (7.7.23)$$

A função de onda para um estado ligado a grandes distâncias é da forma

$$\frac{e^{-Kr}}{r} \quad (7.7.24)$$

A existência de um estado ligado implica uma solução não trivial da eq. de Schrödinger com $E < 0$ para um valor discreto de K . Podemos argumentar que $\frac{e^{-Kr}}{r}$ é semelhante a e^{ikr}/r mas com k imaginário. A grande diferença entre (7.7.23) e (7.7.24) é que o estado ligado nos contém o termo correspondente a onda esférica incidente e^{-ikr}/r . A razão ^{dos coeficientes} ~~entre~~ das ondas emergente e incidente é S_l . No caso do estado ligado esta razão é divergente. Portanto $S_{l=0}(k)$ considerado como uma função da variável complexa k tem um polo em $k = iK$. Desta forma um estado ligado implica um polo no

no eixo imaginário positivo. do plano complexo k .

Para k real e positivo nós temos a região do espalhamento físico. Devemos ter

$$S_{l=0} = e^{2i\delta_0} \quad \text{com } \delta_0 \text{ real}$$

Conforme $k \rightarrow 0$ temos $\frac{k}{t_0 \delta_0} \rightarrow -\frac{1}{a}$. ~~logo~~ que é finito

Portanto δ_0 deve se comportar como

$$\delta_0 \rightarrow 0, \pm\pi, \dots \quad \text{quando } k \rightarrow 0$$

Daí $S_{l=0} = e^{2i\pi} \rightarrow 1$ qdo $k \rightarrow 0$.

Vamos tentar construir uma função que satisfaça

- 1) Polo em $k = iK$ (existência de estado ligado)
- 2) $|S_{l=0}| = 1$ para $k > 0$ e real (unitariedade)
- 3) $S_{l=0} = 1$ em $k=0$ (comportamento no limite da energia nula)

A função mais simples que satisfaz estas condições é:

$$S_{l=0}(k) = \frac{-k - iK}{k - iK}$$

pois

$$|S_{l=0}| = \frac{-k - iK}{k - iK} \cdot \frac{-k + iK}{k + iK} = \frac{k^2 + K^2}{k^2 + K^2} = 1$$

Quando escalarmos esta função estamos assumindo que não existe outra singularidade além do polo simples do estado ligado.

Como (veja 7.6.15)

$$f_l = \frac{S_l - 1}{2ik}$$

temos

$$\begin{aligned} f_{l=0} &= \frac{1}{2ik} \left(\frac{-k - iK}{k - iK} - 1 \right) = \frac{1}{2ik} \left(\frac{-k - iK - k + iK}{k - iK} \right) \\ &= \frac{1}{-ik - K} \end{aligned}$$

Comparando com (7.6.16)

$$f_l = \frac{1}{k \cot \delta_l - ik}$$

temos

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} = -K$$

e portanto a mesma relação entre o estado ligado e o comprimento de espalhamento. Veja eg (7.7.17).

Portanto analisando as propriedades de unitariedade e analiticidade de $S_l(k)$ podemos obter informações que ~~podem~~ ^{podem} ser obtidas em geral resolvendo a eq. de Schrödinger explicitamente. Esta tipo de técnica pode ser útil em problemas onde o potencial não é conhecido em detalhes.

Espalhamento ressonante

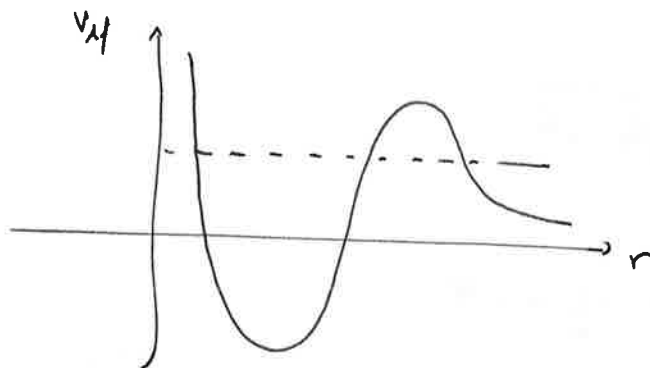
É comum encontrar situações em física nuclear ou de partículas onde a seção de choque tem um pico para uma dada onda parcial. Isto é ~~uma~~ dito uma ressonância.

Continuaremos a considerar um potencial de curto alcance.

Devido a barreira centrífuga o potencial efetivo para uma dada de momento angular l é dado por.

$$V_{ef} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

O 2º termo é sempre positivo. ^(repulsivo) Vamos supor que $V(r)$ é atrativo. Temos então um poço atrativo e uma barreira repulsiva a distâncias maiores.



Se a barreira fosse infinitamente alta, seria possível "aprimorar" partículas dentro do poço, ou seja teríamos estados ligados para E < 0.

No entanto, em casos mais realistas a barreira não é infinita.

A partícula pode ficar presa no poço mas não indefinidamente.

Devido ao tunelamento a partícula tem uma vida média finita. Chamaremos isto de um estado quase ligado.

O "phase shift" δ_l para tal onda parcial atinge o valor $\frac{\pi}{2}$

conforme a energia atinge o valor da energia do estado quase ligado. A seguir de choque parcial

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

atinge então seu valor máximo, ou seja $\frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$

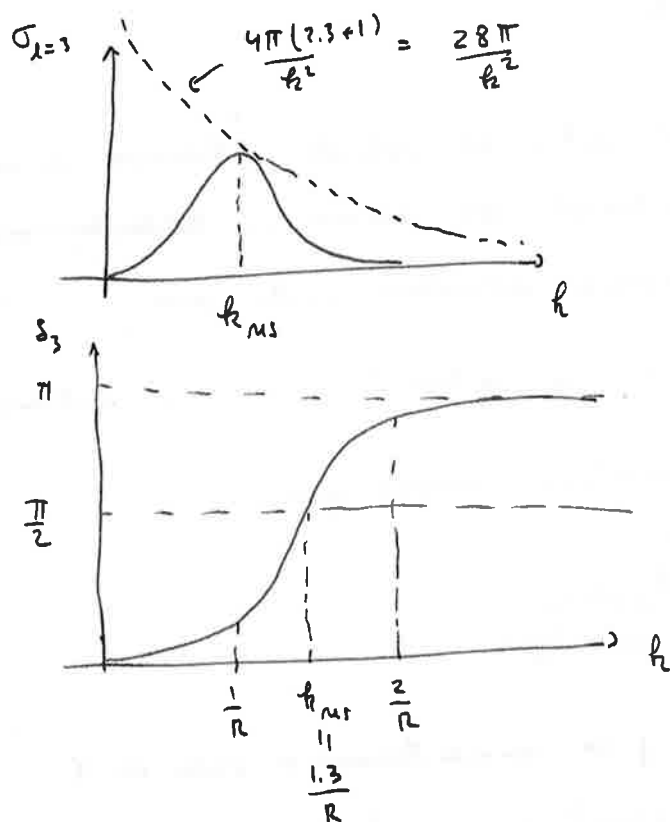
Vamos ver isto em alguns casos particulares.

Para um poço quadrado, é possível ver através de cálculos numéricos que o comportamento ressonante é possível para $l \neq 0$.

Obtemos isto, por exemplo, para

$$l=3 \quad \text{e} \quad \frac{2mV_0 R^2}{\hbar^2} = 5.5$$

O phase shift é pequeno para energias baixas, mas ~~passa a ser~~ rápido a partir de $k = \frac{1}{R}$ e atinge $\frac{\pi}{2}$ em $k = \frac{1.3}{R}$.



Outro exemplo é dado para uma casca repulsiva

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(r) = \gamma \delta(r-R)$$

Neste caso é possível ter ressonância mesmo para $l=0$ uma vez que o potencial só pode perder uma

particular na região $0 < r < R$. No caso $\gamma = \infty$ esperamos estados ligados na região $r < R$ para

$$kR = \pi, 2\pi, \dots$$

uma vez que a função de onda radial para $l=0$ deve ser zero na origem e também em $r=R$. (Lembrete $y_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}$)

Para a região $r > R$ nós temos simplesmente o espalhamento de uma esfera dura (pois não há penetração). Como vimos anteriormente, temos

$$\delta_0 = -kR$$

Como $\gamma = \infty$ não há conexão entre as soluções interiores e exteriores uma vez que não há penetração de barreira. ~~Portanto não há ressonância~~ Não esperamos ressonância neste caso.

No caso de γ ser finito a situação fica mais interessante. O phase shift exibe ressonância sempre que

$$E_{\text{incidente}} = E_{\text{estado}} \\ \text{quase ligado}$$

O pico fica mais agudo ϕ ao aumentarmos o valor de γ .

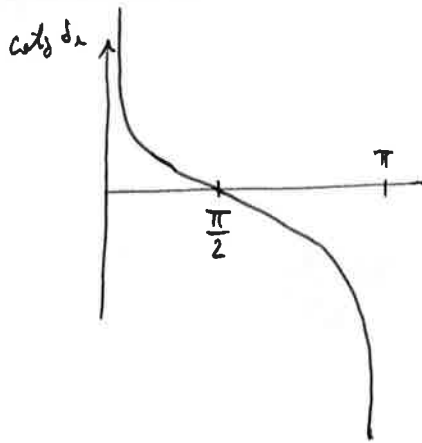
No entanto fora da ressonância o δ_0 comporta-se muito com a função do caso de esfera dura. Temos então a superposição de δ_0 para esfera dura com um δ_0 ressonante.

Isso serve na verdade como um modelo para o espalhamento de nêutrons pelo núcleo atômico onde aparecem vários picos em cima de uma seqüência de choque que varia lentamente.

Vejamos como a amplitude de espalhamento varia próximo a ressonância.

Se há uma conexão entre picos de σ_e e estados quase ligados, então δ_e deve passar por $\frac{\pi}{2}$ (ou $\frac{3\pi}{2}, \dots$) ~~conforme~~ conforme a energia (E) aumenta (e de se aproximar de $\frac{\pi}{2}$ por baixo)

Outro seja $\cot \delta_e$ deve passar por zero vindo de valores maiores



Assumindo que $\cot \delta_e$ é uma função suave da energia próximo da ressonância, podemos tentar fazer a expansão

$$\cot \delta_e = \underbrace{\cot \delta_e|_{E=E_r}}_{\substack{= 0 \\ \text{pois } \delta_e = \frac{\pi}{2} \\ \text{em } E=E_r}} - c(E-E_r) + O((E-E_r)^2)$$

↑

O coeficiente é negativo pois δ_e é uma função crescente de E na ressonância

$$\text{Dado } \frac{d \cot \delta_e}{dE} < 0$$

Temos então

$$\begin{aligned} f_e(k) &= \frac{1}{k \cot \delta_e - i k} = \frac{1}{k} \frac{1}{(-c(E-E_r) - i)} = \\ &= - \frac{1/2}{k \left[(E-E_r) + i \frac{1}{2} \right]} \end{aligned}$$

Onda de finimos

$$\left. \frac{d \cot \delta_l}{dE} \right|_{E=E_r} = -c = -\frac{2}{\uparrow}$$

Note que $\uparrow$ é tanto menor quão maior for a variação de $\cot \delta_l$.

Se somente a ressonância dominar a seção de choque de uma onda parcial l , nós obtemos ~~o seguinte resultado~~

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} \Rightarrow |f_l|^2 = \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2}$$

e então

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(T/2)^2}{(E-E_r)^2 + (T/2)^2}$$

que é a fórmula de Breit-Wigner.

Portanto $\uparrow$ é a largura total da curva na altura correspondendo à metade do máximo, desde que a ressonância seja estreita o suficiente para que a variação devido a $1/k^2$ seja desprezada.

Partículas idênticas e espalhamento

Vamos considerar o espalhamento de duas partículas idênticas, sem spin através do potencial coulombiano. A função de onda espacial deve ser simétrica, e daí a função

de onda assintótica dada na forma

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} + [f(\theta) + f(\pi-\theta)] \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{r}$$

onde $\vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ é a posição relativa das partículas

Daí

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 + 2 \operatorname{Re}(f(\theta) f^*(\pi-\theta)) \end{aligned}$$

Esta seq. de choque é aumentada através de interferência construtiva em $\theta = \frac{\pi}{2}$.

Ao contrário, no espalhamento de partículas de spin $\frac{1}{2}$ com feixe não polarizado e V independente do spin nós temos que o singlete de spin tem função especial simétrica e o triplete função especial antisimétrica. Logo se o feixe é não polarizado temos uma contribuição $\frac{1}{4}$ do singlete e $\frac{3}{4}$ do triplete. Daí

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{4} |f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 + \frac{3}{4} |f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2 = \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - \operatorname{Re}(f(\theta) f^*(\pi-\theta)) \end{aligned}$$

e portanto temos uma interferência destrutiva em $\theta = \frac{\pi}{2}$.

Considerações da simetria em espalhamento

Suponha que V e H_0 são ambos invariantes sob uma operação de simetria. Vamos ver qual a consequência disso para T ou $f(\theta)$.

Se a simetria é unitária tudo fica mais fácil.

Como H_0 e V são invariantes,

$$U H_0 U^\dagger = H_0 \quad , \quad U V U^\dagger = V$$

e como

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots$$

temos

$$U T U^\dagger = T$$

uma vez que

$$U (E - H_0 + i\epsilon) U^\dagger = E - H_0 + i\epsilon$$

$$^1 \quad U \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} U^\dagger U (E - H_0 + i\epsilon) U^\dagger = 1 =$$

$$= U \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} U^\dagger (E - H_0 + i\epsilon) \Rightarrow U \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} U^\dagger = \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}$$

Definimos

$$|\tilde{k}\rangle = U |k\rangle \quad |\tilde{k}'\rangle = U |k'\rangle$$

e daí

$$\langle \tilde{k}' | T | \tilde{k} \rangle = \langle k' | U^\dagger U T U^\dagger U | k \rangle = \langle k' | T | k \rangle$$

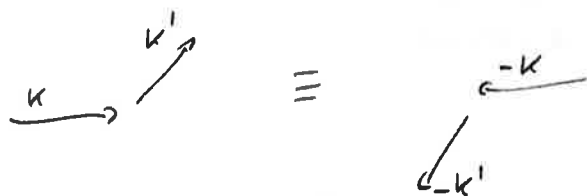
Ex: Paridade π

$$\pi | \tilde{k} \rangle = \bullet | \tilde{k} \rangle \quad \pi | -k \rangle = | k \rangle$$

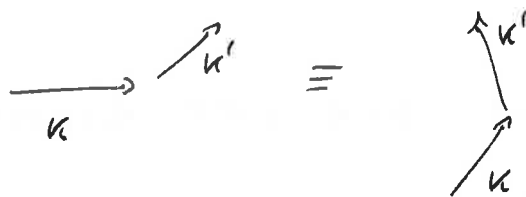
Para H e V são invariantes por paridade

$$\langle -k' | T | -k \rangle = \langle k' | T | k \rangle$$

ou seja



Nós exploramos a conservação do momento angular no método das ondas parciais. O fato de T ser diagonal na base $|E l m\rangle$ é consequência disso. Na verdade T depende da orientação relativa de $\hat{k}$ e $\hat{k}'$



Vamos considerar o caso em que T é a operação antiunitária, como a reversa temporal.

Dar

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = \Theta |\alpha\rangle \quad |\beta\rangle \rightarrow |\tilde{\beta}\rangle = \Theta |\beta\rangle$$

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | \beta \rangle$$

$$\Theta (c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle) = c_1^* \Theta |\alpha\rangle + c_2^* \Theta |\beta\rangle$$

Se $\forall \epsilon$ H_0 for invariantes por Θ , então

$$\Theta T \Theta^{-1} = T^\dagger$$

Pois

$$\Theta \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \Theta^{-1} = \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon}$$

Consider

$$|\alpha\rangle = T |\vec{k}\rangle \quad \langle \beta| = \langle \vec{k}'|$$

Dar

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta T |\vec{k}\rangle = \Theta T \Theta^{-1} \Theta |\vec{k}\rangle = T^\dagger |-\vec{k}\rangle$$

Dar

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle &= \langle \beta | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\beta} \rangle = \langle -\vec{k} | T | -\vec{k}' \rangle \\ &= \langle -\vec{k} | T | -\vec{k}' \rangle \end{aligned}$$

On se je os momentos inicial e final estão trocados assim como os seus sinais. (direções)

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \vec{k}' \\ \nearrow \\ \vec{k} \end{array} & \equiv & \begin{array}{c} \nearrow -\vec{k}' \\ \leftarrow -\vec{k} \end{array} \\ \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle & & \langle -\vec{k} | T | -\vec{k}' \rangle \end{array}$$

Combinando número temporal e paridade

$$\begin{array}{ccccc} \langle k' | T | k \rangle & = & \langle -k | T | -k' \rangle & = & \langle k | T | k' \rangle \\ \uparrow & & \uparrow & & \\ T & & \pi & & \end{array}$$

Como

$$f(k', k) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle k' | T | k \rangle$$

temos

$$f(k, k') = -f(k', k)$$

que significa

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k \rightarrow k') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(k' \rightarrow k)$$



Esta relação é conhecida como "detailed balance" (balanço detalhado)

Consideremos o caso com spin:

Sob número temporal

$$\Theta |j, m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle$$

Dai os estados são denotados por

$$|\vec{k}, m_s\rangle$$

e então:

$$\begin{aligned}
 \langle k' m'_s | T | k m_s \rangle & \stackrel{T}{\downarrow} = (-1)^{m_s - m'_s} \langle -k -m_s | T | -k', -m'_s \rangle = \\
 & \stackrel{?}{=} (-1)^{m_s - m'_s} \langle k, -m_s | T | k', -m'_s \rangle \\
 & \stackrel{\pi}{=}
 \end{aligned}$$

Para fixar nos polarizados, nós tomamos sobre os spins e dividimos por $2l+1$. E a polarização final nos é obtida nós tomamos sobre os estados finais.

Obtemos então

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(k \rightarrow k') = \overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(k' \rightarrow k)$$

onde

$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$ significa ~~em~~ média sobre os estados iniciais de spin e sobre os finais de spin.

Formulações dependentes do tempo do espalhamento

Nós desenvolvemos até agora o formalismo do espalhamento independente do tempo. Este serve para descrever uma situação estacionária, isto é, onde temos um fluxo incidente com um fluxo que não varia no tempo e um potencial também constante no tempo.

Queremos agora desenvolver um formalismo que leve em conta a variação temporal do estado da partícula que sofre o espalhamento.

Desta forma o fut muda de um estado de partícula livre para um fut que sente a presença do potencial.

A eq. de movimento ~~é na representação de Schrodinger é:~~

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0) |\psi, t\rangle = V |\psi, t\rangle \quad (7.11.3)$$

A condição de contorno para tal problema é a seguinte em que no passado remoto $t \rightarrow -\infty$ a partícula é livre.

Isto pode ser obtido ligando-se o potencial adiabaticamente como fizemos na quantização dependente do tempo (Sec. 5.8)

$$V \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{\eta t}$$

Para resolver este problema nós introduzimos ~~a função~~ o operador de Green que deve satisfazer

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0) G_{\pm}(t, t') = \delta(t - t')$$

Conhecendo-se o operador de Green a solução do problema sem livre, (sem potencial) isto é

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0) |\phi, t\rangle = 0$$

podemos construir a solução do problema com potencial como

$$|\psi^+, t\rangle = |\phi, t\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} G_+(t, t') V |\psi^+, t'\rangle dt' \quad (7.11.7)$$

Pois

$$\begin{aligned} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0) |\psi^+, t\rangle &= \overbrace{(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0) |\phi, t\rangle}^{=0} + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0) G_+(t, t')}_{\delta(t-t')} V |\psi^+, t'\rangle dt' \\ &= V |\psi^+, t\rangle \end{aligned}$$

Como a causalidade deve ser obedecida nós impomos que a interação da partícula em t' não tenha efeito em tempos anteriores $t < t'$. Portanto nós impomos a condição de contorno a G_+ :

$$G_+(t, t') = 0 \quad \text{para } t < t' \quad (7.11.4)$$

A solução para o operador de Green é

$$G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') e^{-i H_0 (t - t') / \hbar} \quad (7.11.5)$$

Usando o fato que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \right) = \delta(t-t') \quad (7.11.5)$$

temos

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \left(-\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar} \right) =$$

$$= H_0 \frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar} + \delta(t-t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar} -$$

$$- \frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') i\hbar (-i) \frac{H_0}{\hbar} e^{-iH_0(t-t')/\hbar} = \delta(t-t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$$

* Mas para $t \neq t'$ temos que isto se anula e para

$$t=t' \text{ temos } e^{-iH_0(t-t')/\hbar} = 1$$

Portanto podemos escrever efetivamente que

$$\delta(t-t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar} \equiv \delta(t-t')$$

Logo (7.11.5) satisfaz (7.11.3).

Vejam as propriedades da solução (7.11.7).

Para $t \rightarrow -\infty$ temos $|\psi^+, t\rangle \rightarrow |\phi, t\rangle$ pois a integral envolvendo G_+ ~~se~~ anula-se, pois os extremos se igualam e também porque $G_+ \rightarrow 0$ para $t \rightarrow -\infty$ devido à condição de contorno.

Logo o segundo termo de (7.11.7) contém a influência do potencial sobre $|\psi^+, t\rangle$.

Aí agora nós não pedimos que $|\psi^+, t\rangle$ seja um autoestado da energia, isto é, do operador $H_0 + V$. No entanto se ele for

$$|\phi, t\rangle = |\phi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

$$|\psi^+, t\rangle = |\psi^+\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

onde implicitamente suporemos que a energia E não muda durante o espalhamento e V é "ligado" adiabaticamente de acordo com

~~$$V \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{-\eta t}$$~~

$$V \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{\eta t}$$

Para $t=0$ temos de (7.11.5) e (7.11.7)

~~$$|\psi^+, t\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{iH_0 t'/\hbar} V |\psi^+, t'\rangle e^{-iEt'/\hbar}$$~~

~~$$|\psi^+, t\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \int_{t''}^0 dt' e^{iH_0 t'/\hbar} V |\psi^+, t'\rangle e^{-iEt'/\hbar}$$~~

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{iH_0 t'/\hbar} e^{-iEt'/\hbar} V |\psi^+\rangle dt'$$

O integrando parece oscilar indefinidamente devido a $e^{-iEt'/\hbar}$.

No entanto V deve ser visto como $V e^{\eta t}$ e dar

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \int_{t''}^0 dt' e^{i(H_0 - E - i\eta\hbar)t'/\hbar} V |\psi^+\rangle$$

A integral de no tempo desta forma é dada

$$\begin{aligned}
 |\psi^+\rangle &= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \left[\frac{1}{\frac{i}{\hbar}(H_0 - E - i\eta t)} e^{i(H_0 - E - i\eta t)t'/\hbar} \right]_0^{t''} V|\psi^+\rangle \\
 &= |\phi\rangle - \frac{1}{(H_0 - E - i\eta t)} \left[1 - \lim_{t'' \rightarrow -\infty} e^{i(H_0 - E - i\eta t)t''/\hbar} \right] V|\psi^+\rangle
 \end{aligned}$$

Conforme $t'' \rightarrow -\infty$ isto se torna a eq. Lippmann-Schwinger, ou seja eq (7.1.6)

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle - \frac{1}{H_0 - E - i\epsilon_0} V|\psi^+\rangle$$

A razão do segundo termo não contribuir devido ~~ao~~ a exponencial $e^{\eta t''}$ ($\eta > 0$).

Note que o termo $i\eta t$ aparece aqui devido ao fato de termos imposto que para $t \rightarrow -\infty$ a partícula é livre.

No formalismo independente do tempo o fator $i\epsilon$ aparece devido a imposição de centro espalhador ~~de~~ apenas somente as ondas esféricas emergentes.

Note que o termo $e^{\eta t}$ no potencial, apesar de parecer artificial, ele não altera a situação física. Quando a partícula está fora do alcance do potencial ($t \rightarrow -\infty$) não importa realmente se o potencial é nulo ou não.

Conexão com teoria de perturbações dependente do tempo

Nós queremos desenvolver um método de aproximação no estudo do espalhamento análogo ao método de pert. dependente do tempo ~~dependente do tempo~~ para estados ligados.

O ~~potencial~~ potencial, portanto, deve ser fraco em relação a alguma escala dada.

Vamos recapitular alguns conceitos do cap. 5:

O ket na rep. de interação é definido por

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S$$

e sua evolução temporal é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

onde

$$V_I = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}$$

O operador de evolução temporal na rep. de interação é

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = U_I(t_0, t_0) |\alpha, t_0, t_0\rangle_I$$

e portanto satisfaz

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0)$$

Com a condição inicial

$$U_I(t, t_0)|_{t=t_0} = 1$$

obtemos a solução

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U_I(t', t_0) =$$

~~$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') + \dots$$~~

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') + \dots$$

Desta forma temos

$$\langle \vec{k}' | U_I'''(t, -\infty) | \vec{k} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \vec{k}' | V_I(t') | \vec{k} \rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \vec{k}' | e^{iH_0 t'/\hbar} V e^{-iH_0 t'/\hbar} e^{\eta t'} | \vec{k} \rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle \int_{-\infty}^t dt' e^{i(E_{k'} - E_k)t'/\hbar} e^{\eta t'} \quad \text{onde } E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle \frac{1}{i(E_{k'} - E_k)/\hbar + \eta} e^{i(E_{k'} - E_k)t/\hbar} e^{\eta t} \quad (\eta > 0)$$

Logo

$$|\langle \vec{k}' | U_I'''(t, -\infty) | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{(E_{k'} - E_k)^2/\hbar^2 + \eta^2}$$

Temos então

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{d}{dt} |\langle \vec{k}' | U_I'''(t, -\infty) | \vec{k} \rangle|^2 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{2\eta e^{2\eta t}}{(E_{k'} - E_k)^2/\hbar^2 + \eta^2}$$

$$= 2 \frac{|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \pi \hbar \delta(E_{k'} - E_k)$$

onde usamos o fato que

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \pi \delta(x) \quad , \quad \delta\left(\frac{x}{c}\right) = c \delta(x)$$

Obtemos então a regra de ouro, ou seja a regra de transição é:

$$\frac{d}{dt} |\langle \vec{k}' | U_I''(t, -\infty) | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k)$$

O lado direito é independente do tempo.

No caso do espalhamento é mais conveniente usar a normalização da caixa, onde os valores permitidos de k são

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi m_{x,y,z}}{L}$$

$$\langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \delta_{\vec{k}', \vec{k}}$$

A função de onda é dada por

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad \left(\begin{array}{l} \text{ao invés de } \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ \text{como temos usado até agora} \end{array} \right)$$

A regra de completude fica

$$1 = \sum_{\vec{k}} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|$$

e para uma caixa muito grande ($L \rightarrow \infty$) temos

$$1 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|$$

Esta normalização é mais conveniente para o cálculo da densidade de estados. Definimos n como

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad \text{e} \quad k^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 n^2$$

O nº de estados por cubo da rede é 1. O elemento de volume é $n^2 dn d\Omega$ e como

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 (2\pi)^2}{2m L^2} \Rightarrow \frac{dE}{dn} = \frac{\hbar^2}{m} n \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

e daí

$$n^2 dn d\Omega = n^2 dE d\Omega \frac{dn}{dE} = n^2 dE d\Omega \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{n}$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \hbar dE d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\hbar m}{\hbar^2} dE d\Omega$$

Desta forma a regra de transição do estado $|\vec{k}\rangle$ para um grupo de estados $|\vec{k}'\rangle$ subentendendo um angulo sólido $d\Omega$ é dado por (para espalhamento elástico, ou seja $k' = k$)

$$W = \int dE \frac{d}{dt} |\langle \vec{k}' | U_I(t, -\infty) | \vec{k} \rangle|^2 \rho(E) =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\hbar m}{\hbar^2} d\Omega$$

Isto deve ser igual a

$$\text{fluxo incidente} \times \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \text{nº de partículas espalhadas por unidade de tempo em } d\Omega.$$

Temos

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \frac{e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}}}{L^{3/2}} \cdot \vec{\nabla} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{L^{3/2}} =$$

$$\Rightarrow |\vec{J}| = \frac{\hbar k}{mL^3}$$

Portanto

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{L^3} \frac{\hbar k}{mL^3} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\hbar m}{\hbar^2} d\Omega$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{m k^3}{\hbar^2} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\hbar m}{\hbar^2} \left| \frac{1}{L^3} \int d^3x V(x) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x V(x) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} \right|^2 \end{aligned}$$

Mas isto é precisamente o resultado da aproximação de Born em 1ª ordem.

Vemos então que o formalismo dependente do tempo serve para derivar todos os resultados que nós obtivemos com para o espalhamento elástico utilizando o formalismo independente do tempo.

Mas o formalismo dependente do tempo serve também para obter resultados de Born espalhamento não elástico.

Espalhamento inelástico de elétrons por átomos

No caso de esp. elástico a energia do elétron ~~not~~ muda

~~Ass~~ Supomos que o átomo esteja no estado fundamental e daí:

$$e^- + \text{átomo no est. fund.} \rightarrow e^- + \text{átomo no est. fund.}$$

Se o átomo é bastante pesado a energia ^{cinética} do elétron ~~not~~ muda.

Podemos ter também

$$e^- + \text{átomo (est. fund.)} \rightarrow e^- + \text{átomo (excitado)}$$

Neste caso temos espalhamento inelástico uma vez que a energia do elétron muda de uma quantidade igual a energia do estado fundamental.

Escreveremos o ket do estado inicial do elétron + átomo como:

$$|\vec{k}, 0\rangle$$

↑ ↗
vetor de denota est.
onda do fund. do
elétron átomo
incidente

deve ser entendido como o produto direto $|k\rangle \otimes |0\rangle$ pois inicialmente não há interação entre eles.

A função de onda correspondente é:

$$\frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \psi_0(x_1, x_2, \dots, x_Z)$$

onde usamos normalização na caixa de onda plana.

No estado final temos:

$$|\vec{k}', n\rangle \quad \text{e} \quad \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}'\vec{x}} \psi_n(x_1, x_2, \dots, x_Z)$$

no caso de $n=0$ temos espalhamento elástico.

Se a teoria da perturbação dependente do tempo pode ser usada podemos calcular a seção de choque, da mesma forma que fizemos anteriormente

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow m) &= \frac{mL^3}{\hbar^2} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\hbar^2 m}{\hbar^2} |\langle \vec{k}' m | V | \vec{k} 0 \rangle|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{\hbar} L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' m | V | \vec{k} 0 \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

Como o espalhamento é inelástico, temos, em geral, $\hbar \neq \hbar'$.

O problema está resumido em calcular o elemento de matriz acima. No entanto temos que achar o potencial apropriado para este problema.

O elétron incidente interage com o núcleo e também com os elétrons dos átomos. Por um princípio temos

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|}$$

Aqui temos que levar em conta a identidade dos elétrons, o que não é uma tarefa fácil.

No entanto para elétrons rápidos não há uma interação relevante da função de onda do elétron incidente com a função de onda dos elétrons do átomo. Podemos portanto desprezar a questão da identidade dos elétrons.

Daí

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' 0 | V | \vec{k} 0 \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} \left\langle m \left| -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} \right| 0 \right\rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} \prod_i \int d^3x_i \psi_m^*(x_1, x_2, \dots, x_2) \left[-\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} \right] \psi_0(x_1, x_2, \dots, x_2) \end{aligned}$$

onde $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$

Vamos calcular o primeiro termo.

O potencial $-\frac{Ze^2}{r}$ é uma interação entre o elétron incidente e o núcleo. Portanto não depende de x_i e pode ser tirado para fora da integral $\int \pi dx_i$

Obtemos então $\langle n | 0 \rangle = \delta_{n0}$

e portanto este termo contribui somente para o espalhamento elástico. (note que o núcleo não muda por seu passado e nos transigir dos elétrons devido a $-\frac{Ze^2}{r}$)

Temos que calcular então

$$-\frac{Ze^2}{\epsilon^3} \int d^3x \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{r}$$

isto equivale a tomar a transformada de Fourier do potencial Coulombiano. Mas nós já calculamos a

transformada do potencial de Yukawa no sec 7.2

Então (veja (7.2.2), (7.2.5) e (7.2.6))

$$\int d^3x \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{r} = \lim_{\mu \rightarrow 0} \int d^3x \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x} - \mu r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2}$$

No 2º termo temos que calcular a transformada de $\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_i|}$. Fazemos isto deslocando a coordenada

$$\sum_i \int d^3x \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} = \sum_i \int d^3x \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x} + \vec{x}_i)}}{|\vec{x}|} = \frac{4\pi}{q^2} \sum_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}_i}$$

Isto é a transformada de Fourier do potencial Coulombiano multiplicado pela transformada da densidade eletrônica

devido ao elétron situado em x_i :

$$P_{atom}(x) = \sum_i d^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_i)$$

Definimos o fator da forma $F_m(q)$ para a excitação $|0\rangle$ p/ $|m\rangle$ como

$$F_m(\vec{q}) = \langle m | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_i} | 0 \rangle$$

Note que

$$\frac{1}{Z} \langle m | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_i} | 0 \rangle \xrightarrow{q \rightarrow 0} 1 \quad \text{p/ } m=0$$

Ono caso o fator da forma tende a 1, do $q \rightarrow 0$ no espalhamento elástico.

Por outro lado

$$F_m(\vec{q}) \xrightarrow{q \rightarrow 0} 0 \quad \text{p/ } m \neq 0.$$

devido a ortogonalidade de $|m\rangle$ e $|0\rangle$.

Desta forma temos:

$$\begin{aligned} \int d^3x e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} \langle m | \left(-\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} \right) | 0 \rangle &= \\ &= \frac{4\pi Ze^2}{q^2} \left[-\delta_{m0} + F_m(\vec{q}) \right] \end{aligned}$$

A seguir de acordo com as equações

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dR}(0 \rightarrow m) &= \frac{\hbar^4}{R} \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{4\pi Ze^2}{q^2} (-\delta_{m0} + F_m(\vec{q})) \right|^2 \\ &= \frac{4m^2}{\hbar^4} \frac{(Ze^2)^2}{q^4} \frac{\hbar^4}{R} (-\delta_{m0} + F_m(q))^2 \end{aligned}$$

Para o caso de espalhamento inelástico o termo $\delta_{n,0}$ não contribui e escrevemos a seq de choque em termos do raio de Bohr

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}$$

e daí

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) = 4 z^2 a_0^2 \left(\frac{\hbar'}{\hbar}\right) \frac{1}{(q a_0)^4} |F_n(\vec{q})|^2$$

$\frac{d\sigma}{dq}$ a r também usado, e daí

$$q^2 = |\hbar - \hbar'|^2 = \hbar^2 + \hbar'^2 - 2\hbar\hbar'\cos\theta$$

$$dq = -d(\cos\theta) \frac{\hbar\hbar'}{q}$$

Então

~~daí~~

Como

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi = -d(\cos\theta) 2\pi$$

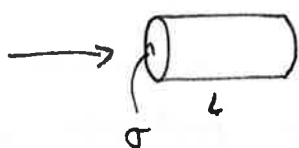
temos

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{dq} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{q 2\pi}{\hbar\hbar'}$$

A seq de choque inelástica que obtivemos pode ser usada para calcular a perda de energia de uma partícula carregada quando ela atravessa a matéria.

Queremos calcular a perda de energia por unidade de comprimento atravessado pela partícula incidente.

A razão de colisões ^{por unidade de comprimento} é $N\sigma$ onde $N = n$ de átomos por unidade de volume isto porque



Todos átomos dentro deste volume σL vão colidir com o elétron

Daí $N\sigma L = n$ de colisões por unidade de comprimento.

Em cada colisão a partícula perde uma energia $E_n - E_0$.

Daí

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} &= N \sum_n (E_n - E_0) \int \frac{d\sigma(0 \rightarrow n)}{dq} dq \\ &= N \sum_n (E_n - E_0) \frac{1}{a_0^2} \frac{\hbar^1}{\hbar} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{1}{q^4} \frac{2\pi q}{\hbar^2 \hbar^1} |F_n(\vec{q})|^2 dq \\ &= \frac{8\pi N}{\hbar^2 a_0^2} \sum_n (E_n - E_0) \int_{q_{min}}^{q_{max}} \left| \langle n | \sum_{i=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_i} | 0 \rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3} \end{aligned}$$

onde usamos

$$F_n(\vec{q}) = \frac{1}{Z} \langle n | \sum_{i=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_i} | 0 \rangle$$

Existem vários trabalhos mostrando como calcular a soma no integrando. (Ver Gottfried e Dethleffsen)

O resultado destes cálculos é justificado, usando a Mecânica Quântica, a fórmula obtida por Bohr em 1913 para o "stopping power":

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z e^4}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2 m_e v^2}{I} \right)$$

onde I é um parâmetro semi-empírico, relacionado à média da energia de excitação $\sqrt{\frac{E_n - E_0}{Z}}$ e a partícula tem carga $\pm ne$ então trocamos Ze^4 por $n^2 Ze^4$.

Note que ^{mesmo que} a massa da partícula incidente não seja a massa do elétron ~~mas~~, a massa m_e que aparece na fórmula é a massa do elétron. Ou seja a fórmula não depende da massa da partícula incidente depende apenas da sua carga e velocidade v .

Isto tem aplicações em detectores de partículas carregadas.

Em M.Q. a perda de energia se dá devido a uma série de espalhamentos inelásticos. Entre cada colisão imaginamos que uma medida é realizada. A trajetória da partícula é quase uma reta porque a seção de choque diferencial tem um pico para q pequeno e logo o momento quase não muda em uma colisão. Após várias colisões a direção do momento é quase a mesma do ^{momento} ~~partícula~~ incidente, devido a perda rápida de $\frac{1}{q^4}$ e $F_n(q)$ para q grande.

O Fator da forma nuclear

A excitação de átomos devido a espalhamento inelástico é importante para q entre 10^3 cm^{-1} e 10^{10} cm^{-1} pois este é o inverso do raio do átomo. Se q é muito grande as contribuições devido a $F_n(q)$ caem rápido.

Para q muito grande, ou seja $q \sim \frac{1}{R_{\text{núcleo}}} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-1}$ a estrutura do núcleo se torna importante. O potencial Coulombiano do núcleo puntual dá um trecho pelo potencial Coulombiano de um núcleo extenso.

$$-\frac{Ze^2}{r} \rightarrow -Ze^2 \int \frac{d^3x' N(r')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad (7.12.22)$$

onde $N(r)$ é a distribuição de carga, que é normalizada como

$$\int d^3x' N(r') = 1$$

Em analogia ao que fizemos para o átomo, vamos calcular a transformada de Fourier de (7.12.22)

$$\begin{aligned}
 Ze^2 \int d^3x \int d^3x' \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} N(r)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} &= Ze^2 \int d^3x' e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}'} N(r') \int d^3x \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}}}{r} \\
 &\quad \uparrow \text{mudança de coordenada} \\
 &\quad \vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{x}' \\
 &= Ze^2 \frac{4\pi}{q^2} F_{\text{núcleo}}(\vec{q})
 \end{aligned}$$

onde $F_{\text{núcleo}}(\vec{q}) = \int d^3x' e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}'} N(r')$

Obtemos assim o desvio da fórmula de Rutherford devido ao tamanho finito do núcleo.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Rutherford}} |F(\vec{q})|^2$$

Para q pequeno temos

$$F_{\text{núcleo}}(\vec{q}) = \int d^3x \left\{ 1 + i\vec{q} \cdot \vec{x} - \frac{1}{2} (\vec{q} \cdot \vec{x})^2 \dots \right\} N(r)$$

↑
este termo quadrado
integrado devido sim. esférica

$$\begin{aligned}
 \int d^3x (\vec{q} \cdot \vec{x})^2 N(r) &= q^2 \int d^3x r^2 (\hat{q} \cdot \hat{r})^2 N(r) = q^2 \int r^2 \sin\theta d\theta d\phi r^2 \cos^2\theta N(r) \\
 &= q^2 \underbrace{\int_{-1}^1 d(\cos\theta) \cos^2\theta}_{\frac{2}{3}} \int r^2 dr r^2 N(r) 2\pi
 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{3} q^2 4\pi \int r^2 dr r^2 N(r) = \frac{1}{3} q^2 \langle r^2 \rangle_{\text{núcleo}}$$

onde $\langle r^2 \rangle_{\text{núcleo}} = \int d\Omega r^2 dr r^2 N(r) = 4\pi \int r^2 dr r^2 N(r)$

é o raio ~~ao~~ quadrado médio do núcleo.

Dar

$$F_{\text{núcleos}}(\vec{q}) = 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle_{\text{núcleos}}$$

Portanto medindo a seq. de choque é possível estimar o ~~raio~~ tamanho do núcleo (e também do próton.)

Espalhamento Coulomb

Soluções da Hamiltoniana

Consideramos o potencial Coulombiano

$$V(r) = - \frac{z_1 z_2 e^2}{r}$$

para colisão de partículas de carga $z_1 e$ e $-z_2 e$.

A eq. de Schrödinger em 3-D fica

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (\underline{E > 0})$$

ou ainda $(m \text{ é a massa reduzida } m = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)})$

$$\left(\nabla^2 + k^2 + \frac{2\gamma\hbar}{r} \right) \psi(r) = 0 \quad \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)$$

onde

$$\gamma\hbar = \frac{z_1 z_2 e^2 m}{\hbar^2} \quad \text{ou} \quad \gamma = \frac{z_1 z_2 e^2}{\hbar v} = \alpha \frac{z_1 z_2 c}{v}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.03608}$$

$$\text{e } mv = \hbar k = p$$

~~é m a massa~~

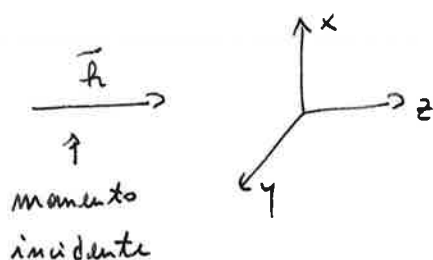
Note que γ positivo corresponde a um potencial atrativo.

Podemos parametrizar a solução como

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi(u)$$

onde $u = ikr(1 - \cos\theta) = ikr(r-z) = ikrw$

e $\vec{k} \cdot \vec{r} = kz$



Esta escolha de coordenadas é planejada pois

- 1) a solução não deve depender de ϕ devido a simetria axial ~~axial~~
- 2) Como $\psi_k(\vec{r})$ representa a função de onda total, ou seja, onda incidente mais a espalhada, devem existir termos na forma assintótica $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ e $\frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}$.

Na verdade esta parametrização é inspirada nos resultados de Gordon (1928) que mostram as frentes de onda assintóticas são dadas pelas superfícies $kz + \delta$ ou $kr(1 - \cos\theta) = \text{cte.}$

Vamos escolher as variáveis (z, w, λ) onde $w = r - z$

e λ é uma variável da qual $\psi_k(r)$ não depende como por exemplo ϕ .

Daí

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial \lambda}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \lambda}$$

$$= \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial \lambda}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \lambda}$$

← não contribui qdo atua em $\psi_k(\vec{r})$

($\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$)

Temos então

$$\nabla^2 e^{i k z} \chi(u) = e^{i k z} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \chi(u) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (e^{i k z} \chi(u))$$

Mas

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (e^{i k z} \chi(u)) &= \frac{\partial}{\partial z} \left(i k e^{i k z} \chi(u) + e^{i k z} \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) \\ &= -k^2 e^{i k z} \chi + 2 i k e^{i k z} \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial \chi}{\partial u} + e^{i k z} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) \end{aligned}$$

Mas como $u = i k (r - z)$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = i k \left(\frac{z}{r} - 1 \right) = \frac{i k}{r} (z - r) = -\frac{u}{r}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{u}{r^2} \frac{z}{r} = \frac{u}{r^2} \left(\frac{z}{r} + \frac{1}{r} \right) = \frac{u}{r^2} (z + r)$$

Daí

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} (e^{i k z} \chi(u)) = e^{i k z} \left\{ -k^2 \chi - 2 i k \frac{u}{r} \frac{\partial \chi}{\partial u} + \frac{u}{r^2} (z + r) \frac{\partial \chi}{\partial u} + \frac{u^2}{r^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} \right\}$$

Temos ainda

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(i k \frac{x}{r} \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) = i k \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2} \frac{x^2}{r} \right) \frac{\partial \chi}{\partial u} + \\ &\quad + \left(i k \frac{x}{r} \right)^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} \end{aligned}$$

$$= \frac{i k}{r} \left(1 - \frac{x^2}{r^2} \right) \frac{\partial \chi}{\partial u} - k^2 \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2}$$

Analogamente

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} = \frac{i k}{r} \left(1 - \frac{y^2}{r^2} \right) \frac{\partial \chi}{\partial u} - k^2 \frac{y^2}{r^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2}$$

Então

$$\begin{aligned}
\nabla^2 (e^{ikz} \chi(u)) &= e^{ikz} \left\{ -\frac{\hbar^2}{r^2} (x^2 + y^2 + (r-z)^2) \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{i\hbar}{r} \left(z - \frac{(x^2 + y^2)}{r^2} - zu \right) + \frac{u}{r^3} (z+r) \right) \frac{\partial \chi}{\partial u} - \hbar^2 \chi \right\} \\
&\quad \underbrace{\frac{r^2 - z^2}{r^2}}_{\frac{2r(r-z)}{2ru}} \quad \underbrace{\frac{i\hbar(r-z)(r+z)}{r^3}}_{i\hbar} \\
&= e^{ikz} \left\{ -\frac{\hbar^2}{r^2} (x^2 + y^2 + z^2 + r^2 - 2rz) \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + \frac{i\hbar}{r} \{ 2 - zu \} \frac{\partial \chi}{\partial u} - \hbar^2 \chi \right\} \\
&\quad \underbrace{\frac{2r(r-z)}{2ru}}_{i\hbar} \\
&= e^{ikz} \left\{ 2 \frac{i\hbar}{r} u \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + 2 \frac{i\hbar}{r} (1-u) \frac{\partial \chi}{\partial u} - \hbar^2 \chi \right\}
\end{aligned}$$

Portanto

$$\left(\nabla^2 + \hbar^2 + \frac{2\gamma\hbar}{r} \right) (e^{ikz} \chi(u)) = \frac{2i\hbar}{r} e^{ikz} \left\{ u \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + (1-u) \frac{\partial \chi}{\partial u} - i\gamma \chi \right\} = 0$$

e consequentemente, a eq. de Schrödinger pode ser escrita como

$$\boxed{u \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + (1-u) \frac{\partial \chi}{\partial u} - i\gamma \chi = 0} \quad (*) \quad (7.13.7)$$

Vejam os comportamentos das soluções no plano complexo u .
Escrevemos

$$\chi'' + \frac{(1-u)}{u} \chi' - \frac{i\gamma}{u} \chi = 0$$

Vemos que o coeficiente de χ' e χ tem polos simples em $u=0$, e são analíticos no resto do plano- u (finito).

Portanto χ pode ter um polo ou "branch point" em $u=0$, mas no resto do plano ela não pode ter singularidades.

Mas $u=0$ implica $\theta=0$ e nós podemos aceitar somente soluções regulares em $u=0$. Desta forma nossa solução é um polinômio ou uma função inteira de u . (função analítica em todo o plano finito, - ela pode ser representada por uma série de Taylor com raio de convergência ~~infinito~~ $\rightarrow$ infinito) ex. $e^z, \cos z$

Vejam os o comportamento no infinito. Denotamos $w = \frac{1}{u}$ e daí (*) fica:

$$\frac{d}{dw} = \frac{du}{dw} \frac{d}{du} = -\frac{1}{w^2} \frac{d}{du} \quad \frac{d^2}{dw^2} = \frac{2}{w^3} \frac{d}{du} + \frac{1}{w^4} \frac{d^2}{du^2}$$

~~247~~

$$\left\{ \frac{1}{w} \left\{ 2w^3 \frac{d}{dw} + w^4 \frac{d^2}{dw^2} \right\} + \left(1 - \frac{1}{w}\right) \frac{w^2}{w^2} \frac{d}{dw} + i\gamma \right\} \chi = 0$$

$$\frac{d^2 \chi}{dw^2} + \frac{1}{w} \left(1 + \frac{1}{w}\right) \frac{d\chi}{dw} - \frac{i\gamma \chi}{w^3} = 0$$

Os coeficientes de χ' e χ têm polos de ordem mais alta em $w=0$ ($u=\infty$). Portanto χ tem singularidade essencial em $u=\infty$. (uma singularidade essencial é uma singularidade que não é um polo, ponto de ramificação ou singularidade removível). Se $\lim_{z \rightarrow z_0} (z-z_0)^n f(z) \neq 0$ se nós podemos encontrar um inteiro positivo n tal que $\lim_{z \rightarrow z_0} (z-z_0)^n f(z) = A \neq 0$ então z_0 é uma singularidade removível. Logo χ é uma função inteira

Considere ^{como} a transformada de Laplace ~~da~~ $f(t)$ ~~da~~

$$X(u) = \int_{t_1}^{t_2} e^{ut} f(t) dt$$

onde o contorno de integração será especificado mais tarde.

Usando (x)

$$\int_{t_1}^{t_2} dt [ut^2 + (1-u)t - i\gamma] e^{ut} f(t) = 0$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt f(t) \left[(t-i\gamma) + t(t-1) \frac{d}{du} \right] e^{ut} =$$

$$= t(t-1) f(t) e^{ut} \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} e^{ut} \left[(t-i\gamma) f(t) - \frac{d}{dt} [t(t-1) f(t)] \right] dt$$

onde integramos por partes em u .

Portanto se $f(t)$ satisfizer a eq.

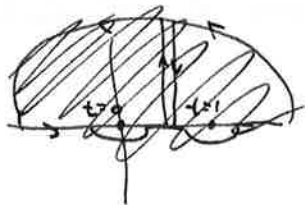
$$\frac{d}{dt} [t(t-1) f(t)] = (t-i\gamma) f(t)$$

e se t_1 e t_2 são escolhidos de tal forma que o termo da superfície anule-se, obtemos uma solução do problema.

A solução da eq. acima é,

$$(2t-1) f(t) + t(t-1) \frac{df}{dt} = (t-i\gamma) f(t)$$

$$\frac{d \ln f}{dt} = \frac{1-t-i\gamma}{t(t-1)} \Rightarrow \ln f = \int dt \frac{1-t-i\gamma}{t(t-1)}$$



~~ln f =~~

e dar

$$f(t) = A t^{\alpha-1} (1-t)^{-\alpha}$$

e então

$$\chi(u) = A \int_C e^{ut} t^{\alpha-1} (1-t)^{-\alpha} dt$$

onde C é fechada, em ∞ (térmo da superfície)

$$t^{\alpha} (1-t)^{1-\alpha} e^{ut}$$

tem o mesmo valor em t_1 e t_2 . (extremos de C)

~~Nota que o integrando tem pontos de ramificação em $t=0$ e $t=1$.~~

Nota que pela definição de u , $u = i k (r-1) = i k r (1-\cos \theta) \equiv i K$

onde $K > 0$. Dar

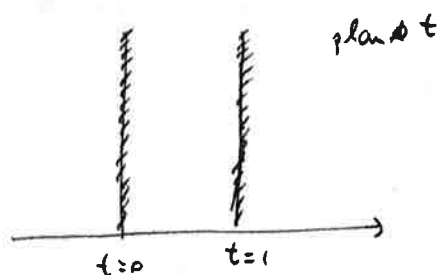
$$e^{ut} \rightarrow e^{iKt}$$

Portanto $e^{ut} \rightarrow 0$ desde que t tenha uma parte imaginária positiva e infinita ($t = a + i\infty$). Desta forma qualquer contorno onde os pontos extremos satisficam $t_1, t_2 \equiv a + i\infty$ não vai ter termo da superfície nulo.

Naturalmente existem vários modos de atingir $t = a + i\infty$.

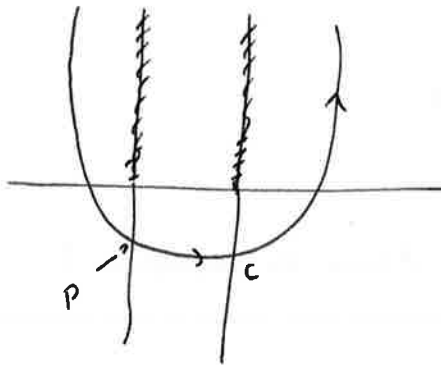
Nota que o integrando tem pontos de ramificação em $t=0$ e $t=1$.

Podemos colocar os cortes como



Podemos tomar C começando em $a + i\infty$ contornando um dos cortes e voltar a $a + i\infty$. Cada uma dessas duas escolhas fornece soluções independentes de $\chi(u)$ conhecidas como funções de Whittaker.

Viremos que a solução apropriada para o caso de espalhamento é aquela onde C contorne os dois cortes



A solução fica mais fácil se fizermos a substituição

$$s = ut$$

Para

$$\begin{aligned} \chi(u) &= A \int_C e^s \left(\frac{s}{u}\right)^{i\delta-1} \left(1 - \frac{s}{u}\right)^{-i\delta} \frac{ds}{u} \\ &= A \int_C e^s s^{i\delta-1} (u-s)^{-i\delta} ds \end{aligned}$$

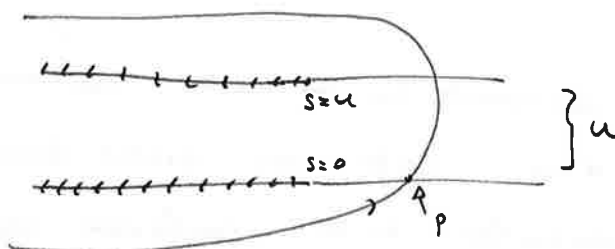
Nota que esta função, como fizíamos, é regular em $u=0$

$$\chi(0) = (-1)^{-i\delta} A \int e^s s^{-1} ds = (-1)^{-i\delta} 2\pi i A$$

Vamos ver o comportamento de χ p/ $u \rightarrow \infty$.

Nota que valores grandes de u não são garantidos por r grandes para $\theta \sim 0$, uma vez que u é sempre muito mais caso.

No plano s o contorno C fica



(Nota que houve uma notação pois $u = iK$ ($K > 0$))

Nota que para $u \rightarrow \infty$ os dois contornos vão ficar infinitamente separados. Na parte inferior do contorno temos

$$s = -(s_0 \pm i\varepsilon)$$

e daí $\frac{s}{u}$ é pequeno ($\frac{s}{u} = -\frac{(s_0 \pm i\varepsilon)}{iK}$) podemos então expandir $(u-s)$ em potências de $\frac{s}{u}$

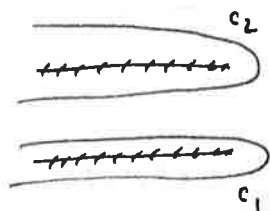
Na parte superior temos

~~scribbles~~ ~~scribbles~~

$$s = -s_0 + i(K \pm \varepsilon)$$

e daí $\frac{s}{u} = 1 - \frac{(s_0 \pm i\varepsilon)}{iK} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 1$ logo não podemos expandir em potências de $\frac{s}{u}$.

Deformamos C em dois ~~contornos~~ contornos C_1 e C_2



Fazemos então a troca de variáveis $s \rightarrow s+u$ no contorno C_2 . Neste modo C_2 vai em C_1 e podemos expandir em potências de s'/u onde $s' = s+u$. Daí

$$\begin{aligned} \chi(u) &= A \int_{C_1} e^s s^{i\delta-1} (u-s)^{-i\delta} ds + A \int_{C_1} e^{s+u} (s+u)^{i\delta-1} (-s)^{-i\delta} ds \\ &= A u^{-i\delta} \int_{C_1} e^s s^{i\delta-1} \left(1 - \frac{s}{u}\right)^{-i\delta} ds + A e^u u^{i\delta-1} (-1)^{-i\delta} \int_{C_1} e^s \left(1 + \frac{s}{u}\right)^{i\delta-1} s^{-i\delta} ds \end{aligned}$$

O termo dominante ~~quando $u \rightarrow \infty$~~ ~~quando $u \rightarrow \infty$~~ $\frac{s}{u} \rightarrow 0$ ($u \rightarrow \infty$) é

$$\chi(u) \sim 2\pi i A \left[u^{-i\delta} g_1(\delta) + (-u)^{i\delta-1} e^u g_2(\delta) \right]$$

onde

$$2\pi i g_1(\delta) = \int_{C_1} e^s s^{i\delta-1} ds$$

$$2\pi i g_2(\delta) = \int_{C_1} e^s s^{-i\delta} ds$$

Integrando por partes obtenemos

$$\begin{aligned}
 2\pi i g_2(\gamma) &= \int_{C_1} e^s s^{-i\gamma} ds = \int_{C_1} \frac{d}{ds} e^s s^{-i\gamma} ds = \\
 &= e^s s^{-i\gamma} \Big|_{-\infty - i\epsilon}^{-\infty + i\epsilon} - \int_{C_1} (-i\gamma) e^s s^{-i\gamma-1} ds \\
 &= i\gamma 2\pi i g_1^*(\gamma)
 \end{aligned}$$

Como $u^* = -u$ tenemos

$$\begin{aligned}
 \chi(u) &\approx 2\pi i A u^{-i\gamma} g_1(\gamma) \left[1 + \frac{(u^*)^{i\gamma}}{u^{-i\gamma}} \frac{g_1^*}{g_1} i\gamma \frac{e^u}{u} \right] \\
 &= 2\pi i A u^{-i\gamma} g_1(\gamma) \left[1 + e^{i\phi(k, u, \gamma)} i\gamma \frac{e^u}{u} \right]
 \end{aligned}$$

onde

$$\frac{(u^*)^{i\gamma}}{u^{-i\gamma}} \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} = \frac{[u^{-i\gamma} g_1(\gamma)]^*}{u^{-i\gamma} g_1(\gamma)} = e^{i\phi(k, u, \gamma)}$$

Usando

$$\begin{aligned}
 (u^*)^{i\gamma} &= (-u)^{i\gamma} = (-i)^{i\gamma} [k(r-z)]^{i\gamma} = (e^{-i\pi/2})^{i\gamma} e^{i\gamma \ln k(r-z)} \\
 &= e^{\frac{\pi}{2}\gamma} e^{i\gamma \ln k(r-z)}
 \end{aligned}$$

$$(u)^{-i\gamma} = (i)^{-i\gamma} [k(r-z)]^{-i\gamma} = e^{\frac{\pi}{2}\gamma} e^{-i\gamma \ln k(r-z)}$$

Como

$$\psi = e^{i k z} \chi(u)$$

$$\psi = 2\pi i A g_1(r) e^{\gamma\pi/2} \left[e^{i[kz - \gamma \ln k(r-z)]} + \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} e^{i k z} e^{-i \gamma \ln k(r-z)} e^{2i \gamma \ln k(r-z)} e^{i \gamma \frac{e^{i k(r-z)}}{i k(r-z)}} \right]$$

É a função de onda normalizada, usando

$$u = i k r (1 - \cos \theta) = i k (r - z) = 2 i k r \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

fica

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i[kz - \gamma \ln k(r-z)]} + \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} \frac{\gamma}{2 k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \frac{e^{i[kr + \gamma \ln k(r-z)]}}{r} \right]$$

Escrevendo na forma ~~normal~~

~~$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i k z} + f_c(k, \theta) \frac{e^{i k r}}{r} \right]$$~~

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{i[kz - \gamma \ln k(r-z)]} + f_c(k, \theta) \frac{e^{i[kr + \gamma \ln k(r-z)]}}{r} \right\}$$

obtemos que

$$f_c(k, \theta) = \frac{\gamma e^{i[\Theta(\gamma) + 2\gamma \ln(\sin \frac{\theta}{2})]}}{2 k \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

$$e^{i\Theta(\gamma)} = \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)}$$

A seguir da choque diferencial fica então

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4 k^2 \sin^4 \theta/2} \quad \left(\gamma = \frac{z_1 z_2 e^2}{k v} \right)$$

que é a fórmula de Rutherford. (que já obtivemos em (7.2.11))

O método das ondas parciais para o caso de Coulomb

De (7.13.4) e (7.13.19) temos:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi(u) \\ &= A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \int_c e^{ut} t^{i\delta-1} (1-t)^{-i\delta} dt \\ &= A \int_c e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}-\vec{z})t} (1+t) d(t, \delta) dt \\ &= A \int_c e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}(1-t)} (1-t) d(t, \delta) dt \end{aligned}$$

onde $\vec{k} \cdot \vec{r} = k z$

$$d(t, \delta) = t^{i\delta-1} (1-t)^{-i\delta-1}$$

Nós queremos fazer a expansão de $\psi(\vec{r})$ em ondas parciais da maneira análoga ao que fizemos anteriormente.

~~Esta decomposição~~ Esta decomposição não é de muito uso no espalhamento Coulomb mas é essencial para determinar funções de onda no espectro discreto por continuação analítica. É também útil no estudo de potenciais que diferem muito pouco do potencial Coulombiano

a grandes distâncias como por ex. espalhamento próton-próton.

Nós expandimos $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}(1-t)}$ em termos dos esféricos harmônicos da maneira análoga a (2.5.17)

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}(1-t)} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr(1-t)) P_l(\cos\theta)$$

dar

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= A \int_C e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr(1-t)) P_l(\cos\theta) (1-t) d(t, \theta) dt \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos\theta) A_l(kr) \end{aligned}$$

onde

$$A_l(kr) = A \int_C e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}t} j_l(kr(1-t)) (1-t) d(t, \theta) dt$$

Nota que somente $Y_{l0} \propto P_l(\cos\theta)$ aparece na expansão pois

$\psi(\vec{r})$ é independente de ϕ .

Mas $j_l = \frac{1}{2} (h_l^{(1)} + h_l^{(2)})$ onde $h_l^{(1)}$ são as funções esféricas de Hankel. Temos

$$h_l(p) = E_l(p) \frac{e^{ip}}{p}$$

onde

$$E_0(p) = -i$$

$$E_1(p) = -\left(1 + \frac{i}{p}\right)$$

$$E_2(p) = i \left(1 + \frac{3i}{p} - \frac{3}{p^2}\right)$$

e o comportamento assintótico é

$$E_l(p) = (-i)^{l+1} + O(p^{-1}) \quad (p \rightarrow \infty)$$

Escrevemos então

$$A_2(kr) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Contribuição} \\ \text{da} \\ h_1}}{A_2''(kr)} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Contribuição} \\ \text{da} \\ h_2}}{A_2^{(2)}(kr)}$$

Temos

$$e^{i\theta r t} e^{i\theta r (1-t)} = e^{i\theta r}$$

$$e^{i\theta r t} \bar{e}^{i\theta r (1-t)} = \bar{e}^{i\theta r} e^{2i\theta r t}$$

e daí

$$A_2'''(kr) = \frac{A e^{i\theta r}}{2\theta r} \int_c E_2(kr(1-t)) d(t, \gamma) dt$$

Para $|t| \rightarrow \infty$ temos ~~daí~~ t^{-2}

$$d(t, \gamma) = t^{i\gamma-1} (1-t)^{-i\gamma-1} \rightarrow t^{i\gamma-1} (-t)^{-i\gamma-1} \sim (-1)^{-i\gamma-1} t^{-2}$$

daí $d(t, \gamma) \xrightarrow{|t| \rightarrow \infty} t^{-2}$

e ainda

$$E_2(kr(1-t)) \Rightarrow E(1-\theta r t)$$

Como E_2 depende de potências negativas do argumento temos que

$$E_2 \rightarrow 1 \quad (\text{ou } i) \quad \text{para } |t| \rightarrow \infty$$

Desta forma as singularidades do integrando de A_2''' são os pontos de ramificação em $t=0$ e 1 (devido a $d(t, \gamma)$) e possíveis polos de E_2 quando seu argumento anula-se.

Nós fechamos o contorno C (em A_2''') da seguinte forma

Nós queremos determinar os estados ligados por continuação analítica de $A_\ell(k, r)$ para o eixo ~~para~~ imaginário positivo de k . Isto somente pode ser feito se tivermos uma representação da função que mantenha suas propriedades analíticas na variável k .

Precisamos fazer entrar a integração em t . Isto pode ser feito expandindo-se $e^{i k r t} f_\ell(k r (1-t))$ em série de potências.

Como esta é uma função inteira a série converge no plano todo com exceção do plano no infinito.

~~Escrevemos~~ A expansão em série de $f_\ell(z)$ é dada por

$$f_\ell(z) = z^\ell z^\ell e^{iz} \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(\ell+v)!}{(2\ell+1+v)!} \frac{(-ziz)^v}{v!}$$

que é válida no plano todo. (finito).

Substituindo na expressão de A_ℓ temos:

$$A_\ell(k, r) = A \int_c \frac{e^{i k r t}}{t^{i\delta-1} (1-t)^{-i\delta}} z^\ell (k r (1-t))^\ell \frac{e^{i k r (1-t)}}{v!} \times \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(\ell+v)!}{(2\ell+1+v)!} \frac{(-2izkr(1-t))^v}{v!} dt$$

$$= A z^\ell (kr)^\ell e^{i k r} \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(\ell+v)!}{(2\ell+1+v)!} \frac{(-2izkr)^v}{v!} \int_c dt t^{i\delta-1} (1-t)^{-i\delta+v+\ell}$$

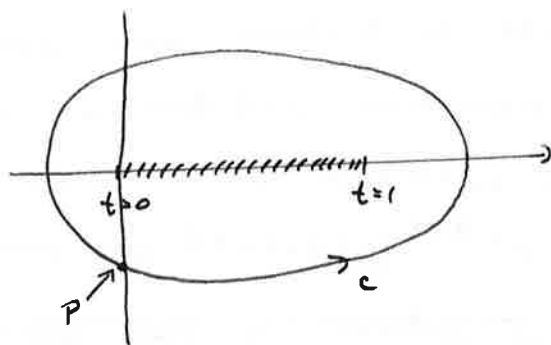
Portanto a integral em t que temos que resolver é da forma

$$\int_c t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt \quad \text{onde } a+b \text{ é um n}^\circ \text{ inteiro.}$$

$$(a = i\delta, \quad b = -i\delta + v + \ell + 1)$$

O integrando tem pontos de ramificação em $t=0$ e $t=1$.

Podemos então escolher o contorno C como



Escolhemos a fase de t no ponto P (indicado) como sendo nula.

Obtemos então:

$$\begin{aligned} \int_C t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt &= (1 - e^{2\pi i b}) \int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt \\ &= (1 - e^{2\pi i b}) \frac{\Gamma(a) \Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \end{aligned}$$

Desta forma:

$$\begin{aligned} A_1(k, r) &= A z^l (kr)^l e^{i k r} \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(l+v)!}{(2l+1+v)!} \frac{(-2i k r)^v}{v!} (1 - e^{2\pi i \gamma}) \times \\ &\quad \times \frac{\Gamma(i\gamma) \Gamma(l+v+1-i\gamma)}{\Gamma(l+v+1)} \end{aligned}$$

~~Seja~~ ~~Seja~~ ~~Seja~~

Na verdade A_1 é dado por uma função hipergeométrica confluyente

$$A_1(k, r) \propto \Gamma(l+1, -i\gamma) {}_1F_1(l+1-i\gamma, 2l+2, -2i k r)$$

onde

$$F_1(l+1, -i\gamma, 2l+2, -2i\hbar r) = 1 + \frac{l+1-i\gamma}{2l+2} \frac{(-2i\hbar r)}{1!} +$$

$$+ \frac{(l+1-i\gamma)(l+2-i\gamma)}{(2l+2)(2l+3)} \frac{(-2i\hbar r)^2}{2!} + \dots$$

Esta série de potência em $\hbar r$ converge ~~em todo~~ ^{em todo} plano finito $\hbar r$ e para todos os valores de γ .

Logo as singularidades de $A_l(\hbar, r)$ são devidas a

$$\Gamma(l+1-i\gamma)$$

A função Γ tem polos simples sempre que o seu argumento é um inteiro negativo ou zero. ~~Assim~~

~~isto é~~

Os polos ocorrem somente para $\gamma > 0$, ou seja para um potencial atrativo ~~em~~ ^{na} Estes polos correspondem a estados ligados. Como

$$\gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2 m}{\hbar^2 k}$$

~~veremos que, para $i\gamma$ ser inteiro é preciso que~~

veremos que os polos ocorrem para valores imaginários puros de k .

Temos então

$$l+1-i\gamma = -n'$$

$$n' = 0, 1, 2, \dots$$

Veremos então que os valores da energia

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

São dados por

(260)

$$\hbar \rightarrow i\hbar$$

$$E = - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$-i\hbar = \hbar k = \frac{\hbar_1 \hbar_2 e^2 m}{\hbar^2 iY} = \frac{\hbar_1 \hbar_2 e^2 m}{\hbar^2 (n'+l+1)}$$

$$E = - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\hbar_1 \hbar_2 e^2 m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(n'+l+1)^2}$$

$$E = - \left(\frac{\hbar_1 \hbar_2 e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{m c^2}{2(n'+l+1)^2}$$

e esta é a fórmula de Bohr para os níveis de energia do átomo de hidrogênio. Definimos o número quântico principal como

$$n = n' + l + 1$$

e temos então ~~a energia independente do momento angular~~ que níveis com momentos angulares diferentes podem ter a mesma energia.

Na fórmula temos a constante adimensional

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.04}$$

que é a constante de estrutura fina

$$\text{Como } E \sim \alpha^2 \frac{m c^2}{n^2}$$

Vemos que a energia de ligação é pequena comparada com a massa de repouso do elétron. Isto permite-nos usar uma teoria não relativística. Se α fosse grande não seria mais possível.

~~Conservamos a função de onda a dada por~~

Uma foto, que não discutiremos em muito detalhe aqui, é que o módulo de $A_l(k, r)$ nos polos discretos acima é a função de onda radial dos estados ligados.

No caso do átomo de H temos $z_1 = z_2 = 1$ e dar lugar a mudança de variável

$$-z_1 k r \rightarrow \frac{z r e^2 m}{\hbar^2 i} = \frac{z r}{a_0 m}$$

onde $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$ é o raio de Bohr.

Daí o módulo de A_l fica

$$\begin{aligned} \left(\frac{z r}{a_0 m}\right)^l e^{-r/a_0 m} {}_1F_1(-n', 2l+1, z r/a_0 m) = \\ = \left(\frac{z r}{a_0 m}\right)^l e^{-r/a_0 m} \left\{ 1 + \frac{(-n')}{2l+1} \left(\frac{z r}{a_0 m}\right) + \frac{1}{2!} \frac{(-n')(1-n')}{(2l+1)(2l+2)} \left(\frac{z r}{a_0 m}\right)^2 + \dots \right\} \end{aligned}$$

No caso do núcleo ter carga Z trocamos a_0 por $\frac{a_0}{Z}$.

A expressão entre colchetes é na verdade um polinômio pois a série termina uma vez que n' é inteiro positivo.

Estes são os polinômios de Laguerre.

A forma assintótica da função de onda radial é então

$$\left(\frac{z r}{a_0 m}\right)^l \left(\frac{z r}{a_0 m}\right)^{n'-l} e^{-r/a_0 m} = \left(\frac{z r}{a_0 m}\right)^{n'-1} e^{-r/a_0 m}$$

uma vez que o grau do polinômio é n' e $n' = l + n' + 1$

Note que a função do estado ligado decai mais devagar que $\frac{e^{-r}}{r}$ que é a característica de estados ligados de potências de alcance finito. Isto é o análogo no estado ligado do

temos logaritmos no lado da função de onda assintótica
do espalhamento Coulomb

Usando a notação $R_{nl}(r)$ para a função radial onde n é o
número quântico principal e l o número quântico de momento angular,
temos para os estados mais baixos:

Camada K ($n=1$)

$$1s: R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2 e^{-1/2 \rho}$$

$$\rho = \frac{Zr}{na_0} \quad (\text{Nota que } \rho \text{ muda com } n)$$

Camada L ($n=2$)

$$2s: R_{20} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{2}} (2-\rho) e^{-1/2 \rho}$$

$$2p: R_{21} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{6}} \rho e^{-1/2 \rho}$$

Camada M ($n=3$)

$$3s: R_{30} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{9\sqrt{3}} (6-6\rho+\rho^2) e^{-1/2 \rho}$$

$$3p: R_{31} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{9\sqrt{6}} (4-\rho)\rho e^{-1/2 \rho}$$

$$3d: R_{32} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{9\sqrt{30}} \rho^2 e^{-1/2 \rho}$$

A equação de Dirac

Até agora nós trabalhamos com uma teoria não relativística. Isto é uma teoria invariante por transformações de Galileu.

Queremos construir agora uma teoria relativística, ou seja que ~~descreva~~ descreva partículas a altas velocidades.

Não vamos nos preocupar com a Teoria Geral da Relatividade pois a gravitação nos é importante em fenômenos atômicos.

Vamos ver como os princípios da M.R. podem ser adotados à relatividade onde as quatro dimensões espaço-temporais devem ser tratadas ~~as~~ em "pé" de igualdade.

- O princípio da superposição já satisfaz os princípios da relatividade uma vez que ele se aplica a estados com o significado relativístico de espaço-tempo.
- O conceito de observáveis no entanto não se enquadra nos princípios da relatividade, uma vez que uma observável pode envolver entes físicos separados no espaço e em um dado instante do tempo.
Como consequência se trabalhamos com uma representação referente a um conjunto completo de observáveis a teoria não pode ter a simetria entre espaço e tempo requerida pela relatividade.
Na M.R. relativística temos que ter uma representação que tenha esta simetria.

No caso de uma partícula temos que usar a representação de Schrödinger para ter a simetria entre espaço e tempo requerida pela relatividade.

Vamos usar a notação

~~para~~ x_0, x_1, x_2, x_3 para x, y, z, ct respectivamente

A função de onda será denotada por $\psi(x_0, x_1, x_2, x_3)$. e ~~se~~ fornece uma base para tratar os quatro x 's da mesma maneira.

Denotaremos os x 's por x_μ ~~se~~ $\mu=0,1,2,3$.

e qualquer vetor ~~que~~ x_μ que transforme como dx_μ por a_μ .

A métrica η tal que

$$a^0 = a_0, \quad a^i = -a_i, \quad i=1,2,3$$

a^μ - covariante

a_μ - contravariante

e daí

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3$$

Definimos

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu$$

Na representação de Schrodinger o momento linear é dado pelo operador

$$P_r = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_r}$$

Os operadores $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ ~~formam~~ ~~as~~ ~~as~~ componentes de um gradiente contravariante.

Definimos então

$$P_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

Introduzimos então uma nova variável dinâmica P_0 que é o operador $i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} = \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}$.

Como x_0 é a componente temporal de P_μ x_0 deve ter o significado físico de uma energia dividida por c .

A equação de onda para o elétron

Vamos tratar primeiramente o problema de um elétron livre, isto é, na ausência de campo eletromagnético. Mas levaremos em conta a possibilidade de ter graus de liberdade internos extras.

A Hamiltoniana clássica relativística para o elétron é

$$H = c(m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}$$

Daí substituindo por operadores temos a equação de onda:

$$\{P_0 - (m^2 c^2 + P_1^2 + P_2^2 + P_3^2)^{1/2}\} \psi = 0 \quad (5)$$

Esta equação, apesar de levar em conta a expressão relativística para a energia, não é satisfatória do ponto de vista da relatividade pois trata P_0 e P_r ($r=1,2,3$) de maneiras diferentes. Desta forma não podemos generalizá-la para o caso onde há um campo presente.

Se a multiplicamos pelo operador

$$P_0 + (m^2 c^2 + P_1^2 + P_2^2 + P_3^2)^{1/2},$$

vão obteremos a equação

$$\{P_0^2 - m^2 c^2 - P_1^2 - P_2^2 - P_3^2\} \psi = 0 \quad (6)$$

Esta eq. tem uma forma relativisticamente invariante e talvez sirva para uma MQ relativística.

Eq (6) não é equivalente a (5) pois embora toda solução de (5) seja solução de (6) nem toda solução de (6) é solução de (5).

Somente as soluções de (6) para um valor positivo de p_0 são soluções de (5).

A eq (6) no entanto não é da forma que os ^{princípios} ~~da~~ da mecânica Quântica exigem.

Nós assumimos que o estado da partícula em uma dado instante de tempo t_0 , i.e. $|\alpha, t_0\rangle$ determina, a menos de um fator numérico, o estado em um tempo posterior t , i.e. $|\alpha, t\rangle$

$$|\alpha, t_0\rangle \text{ determina } |\alpha, t\rangle \quad t > t_0$$

Deste forma a equação de movimento para $|\alpha, t\rangle$ deve ser linear nas derivadas temporais.

Se isto for quadrática nós precisamos especificar

$$|\alpha, t_0\rangle \text{ e } \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0\rangle \text{ em } t_0 \text{ para determinar } |\alpha, t\rangle.$$

Isto quer dizer que $|\alpha, t_0\rangle$ não determina completamente o estado da partícula em t_0 .

Neste caso poderíamos postular que o estado da partícula não é dado pela função de onda ψ somente mas duas funções ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ ou então pelas combinações lineares.

$$\phi = \psi + \frac{i\hbar}{mc^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{e} \quad \chi = \psi - \frac{i\hbar}{mc^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\phi + \chi}{2} = \psi \\ \phi - \chi = \frac{2i\hbar}{mc^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} \end{pmatrix}$$

A eq (6) pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \hbar^2 \nabla^2 \psi - m^2 c^2 \psi = 0$$

ou ainda

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \psi - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \psi$$

Derivando e derivamos a eq. diferencial para ϕ e χ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{i\hbar}{mc^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{mc^2}{2i\hbar} (\phi - \chi) + \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right\} (\phi + \chi)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{i\hbar}{mc^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{mc^2}{2i\hbar} (\phi - \chi) - \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right\} (\phi + \chi)$$

ou seja

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 + \frac{mc^2}{i\hbar} \right] \phi + \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \chi$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = - \left[\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 + \frac{mc^2}{i\hbar} \right] \chi - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \phi$$

ou ainda

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + mc^2 \right] \phi - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \chi \\ -i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + mc^2 \right] \chi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi \end{cases}$$

No limite de baixas ~~energias~~ ^{velocidades} (não relativístico) temos que a energia é praticamente a ~~massa~~ massa de repouso, ou seja

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \equiv p^2 \ll mc^2$$

e daí

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} &= mc^2 \phi - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \chi \\ -i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} &= +mc^2 \chi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi \end{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial (\phi + \chi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\phi + \chi)$$

e $\phi + \chi = \psi$ descreve uma partícula não relativística, livre.

Outro problema relacionado a eq (6) é a interpretação probabilística. Colocando $\hbar = c = 1$ a eq (6) fica

$$(\square + m^2) \psi = 0 \quad \square \equiv \partial_\mu \partial^\mu \text{ ~~oper~~ }.$$

Definimos

$$g^\mu = \frac{i}{2m} [\psi^* \partial^\mu \psi - (\partial^\mu \psi^*) \psi]$$

Como ψ e ψ^* satisfazem (6) temos

$$\partial_\mu g^\mu = \frac{i}{2m} [(\partial_\mu \psi^*) \partial^\mu \psi + \psi^* \square \psi - (\square \psi^*) \psi - (\partial^\mu \psi^*) \partial_\mu \psi]$$

ou seja $\partial_\mu g^\mu = 0$

que é uma expressão de continuidade (de conservação)

Denotamos

$$P(\vec{r}, t) = \frac{i}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2im} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi]$$

(292)

é a quantidade $P(\vec{r}, t)$ integrada no ~~esp~~ espaço ~~tempo~~ todo
é conservada no tempo. Além do mais

$$P(\vec{r}, t) d^3x$$

é invariante por transformações de Lorentz.

Logo $P(\vec{r}, t)$ poderia ser interpretada como a densidade da
probabilidade. No entanto ela não é positiva definida.

Este é um dos problemas da equação de Klein Gordon.

Em 1934 Pauli e Weisskopf propuseram que P fosse
multiplicada por e e a quantidade eP fosse interpretada
como uma densidade de carga elétrica. (e $\vec{j}$ seria a
densidade de corrente elétrica)

Daí $\partial_\mu j^\mu = 0$ é uma equação de conservação da carga elétrica.

~~Essa equação de Klein Gordon admite~~

Em relatividade existe a equivalência entre massa e energia
e portanto partículas podem ser criadas quando a energia
ultrapassa sua massa de repouso.

Deste forma uma ~~teoria~~ Teoria Quântica relativística implica
a possibilidade de não conservar o nº de partículas.

Portanto este caso levou a Teoria Quântica de Campos.

A equação de Klein Gordon portanto é a equação para uma
carga elétrica e não uma partícula.

Pares de partículas de cargas opostas podem ser criados
mantendo-se a carga elétrica total constante no tempo.

Vamos então tentar encontrar uma equação linear nas derivadas temporais.

Para que ela transforme sob o grupo de Lorentz de maneira simples nós tomamos ela linear ~~no~~ no momento P_i assim como P_0 ou seja

$$\{P_0 - \alpha_1 P_1 - \alpha_2 P_2 - \alpha_3 P_3 - \beta\} \psi = 0 \quad (7)$$

onde α_i e β são independentes de P_μ .

Como estamos considerando o caso sem interações, todos os pontos do espaço são equivalentes e daí α_i e β devem ser independentes de x . Eles então descrevem algum grau de liberdade extra interno do sistema. (o spin).

Multiplicando pelo operador $(P_0 + \alpha_i P_i + \beta)$ pela esquerda temos

$$(P_0 + \alpha_i P_i + \beta)(P_0 - \alpha_j P_j - \beta) \psi = 0$$

$$\{P_0^2 - \underline{P_0 \alpha_i P_i} - \underline{P_0 \beta} + \underline{\alpha_i P_i P_0} - \alpha_i P_i \alpha_j P_j - \alpha_i P_i \beta + \underline{\beta P_0} - \beta \alpha_i P_i - \beta^2\} \psi = 0$$

~~Para que isso seja igual a eq (6) precisamos que sempre satisficam~~

Supondo que α_i e β comutam com P_μ :

$$\{P_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) P_i P_j - (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) P_i - \beta^2\} \psi = 0$$

Para que isso seja igual a eq. (6) é preciso que

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2 \delta_{ij}$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$$

$$\beta^2 = m^2 c^2$$

Denotando

$$\beta = \alpha_m m c$$

resumimos estas relações como (nota que existe uma arbitrariedade na escolha do sinal dos α 's)

$$\alpha_a \alpha_b + \alpha_b \alpha_a = 2 \delta_{ab} \quad (a, b = 1, 2, 3 \text{ ou } m)$$

Agora os α 's devem anticomutar e seus quadrados ~~ser~~ 1.

Da mesma maneira as soluções de (7) são também soluções de (6)

Supondo que (7) ~~descreva a movimento~~ seja a equação de onda relativística correta para o elétron, nós encontramos algumas dificuldades. A eq (7) assim como (6) admitem soluções com energia positiva e negativa, e desta maneira não são equivalentes a (5)

É claro que soluções de energia negativa não correspondem a movimento de elétrons relativísticos. Vamos, mais tarde como interpretar isto. Vamos nos concentrar nas energias positivas.

Representação para os α 's

Os α 's têm propriedades similares às aquelas das matrizes σ de Pauli. No entanto se ficarmos trabalhando com matrizes 2×2 poderemos construir no máximo 3 matrizes que anticomutam.

Temos que utilizar matrizes 4×4 para obter 4 d's que anticomutam.

Vamos expressar os d's em termos de dois conjuntos de três matrizes 2×2 que anticomutam entre si.

As matrizes de Pauli são

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

que satisfazes

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij}$$

Definimos matrizes 4×4 como

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} \quad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \quad \Sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad P_2 = \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix} \quad P_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

Como matrizes diagonais comutam entre si temos

$$[P_3, \Sigma_i] = 0$$

Temos ainda que

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & AC \\ BC & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & CA \\ CB & 0 \end{pmatrix}$$

Como $[A, C] = [B, C] = 0$ obtemos

$$\cancel{[P_i, \Sigma_j]} \quad [P_i, \Sigma_j] = 0$$

Nota que

$$\Sigma_i = \sigma_i \otimes I \quad , \quad P_i = I \otimes \sigma_i$$

Além do mais temos

$$\{\Sigma_i, \Sigma_j\} = 2\delta_{ij}; \quad \{p_i, p_j\} = 2\delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3$$

Desta forma uma maneira de representar os α 's é

$$\alpha_i = p_1 \Sigma_i \quad i=1,2,3 \quad \text{e} \quad \alpha_m = p_3$$

Pois

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = p_1 \Sigma_i p_1 \Sigma_j + p_1 \Sigma_j p_1 \Sigma_i = \Sigma_i \Sigma_j + \Sigma_j \Sigma_i = 2\delta_{ij}$$

$$\alpha_m \alpha_i + \alpha_i \alpha_m = p_3 p_1 \Sigma_i + p_1 \Sigma_i p_3 = \{p_3, p_1\} \Sigma_i = 0$$

$$\alpha_m^2 = 1$$

Logo

$$\{\alpha_a, \alpha_b\} = 2\delta_{ab}$$

É claro que existem várias outras maneiras de representar os α 's em termos de p_i e Σ_i .

Como os α 's são matrizes 4×4 , vemos que a função de onda do elétron ψ tem também que ter 4 componentes. Cada componente será uma função da posição.

Vemos que estas graus de liberdade extras estão ligados com o spin (que requer duas componentes) e ao momento (e antipartícula do elétron) de cujo colapso de energia negativa.

Usando a representação dos α 's escrevemos a eq. (7) como

$$\{\gamma_0 - p_1 \Sigma_1 - p_2 \Sigma_2 - p_3 m c\} \psi = 0$$

(10)

É conveniente introduzir o símbolo

$$\alpha_0 = 1$$

e supor que o índice dos 4 α 's α_μ ($\mu=0,1,2,3$) pode ser levantado ou abaixado com a matriz $g^{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$.
 Ou seja

$$\alpha_0 = \alpha^0 = \alpha_i = -\alpha^i \quad i=1,2,3$$

apesar dos α 's não formarem um quadrivector.

Das equações (1.1) fica

~~$$(\alpha^\mu p_\mu - m c) \psi = 0$$~~

$$(\alpha^\mu p_\mu - m c) \psi = 0$$

Os quatro α^μ 's satisfazem:

$$\alpha^\mu \alpha_\mu \alpha^\nu + \alpha^\nu \alpha_\mu \alpha^\mu = 2 g^{\mu\nu} \alpha_\mu$$

pois

$$\alpha^i \alpha_\mu \alpha^j + \alpha^j \alpha_\mu \alpha^i = -\alpha_\mu \{ \alpha^i, \alpha^j \} = -2 \delta^{ij} \alpha_\mu = 2 g^{ij} \alpha_\mu$$

$$\alpha^0 \alpha_\mu \alpha^j + \alpha^j \alpha_\mu \alpha^0 = \{ \alpha_\mu, \alpha^j \} = 0$$

$$\alpha^0 \alpha_\mu \alpha^0 + \alpha^0 \alpha_\mu \alpha^0 = 2 \alpha_\mu = 2 g^{00} \alpha_\mu$$

Portanto definindo

$$\gamma^\mu = \alpha_\mu \alpha^\mu$$

temos

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g^{\mu\nu}$$

e das equações de onde fica

$$(\gamma^\mu p_\mu - m c) \psi = 0$$

Das temos

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

$$\gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

Para generalizar esta equação para o campo em que exista interação eletromagnética substituímos

$$p_0 \rightarrow p_0 + \frac{e}{c} A_0$$

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$$

e dar a eq. de onda fica

$$\boxed{\gamma^\mu (p_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) - mc \psi = 0}$$

que é a eq. de onda fundamental para a teoria relativística do elétron.

A função de onda ψ é denotada por um vetor ~~em~~ coluna de quatro componentes. A função de onda conjugada complexa é um vetor linha que denotaremos por ~~$\psi^\dagger$~~ $\psi^\dagger$, que representa um bra co-inverso de um ket.

A eq. de onda para ele fica então

$$\bar{\psi}^\dagger \left(\gamma^\mu (p_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) - mc \right) = 0$$

onde o operador momento p_μ atua a esquerda $\left(\langle \phi | \frac{\partial}{\partial x} = - \langle \frac{\partial}{\partial x} | \phi \right)$

Nota que as matrizes γ_μ na verdade servem para dizer como as diferentes componentes de ψ se acoplam nas equações de movimento.

Invariância sob transformações de Lorentz

(275)

Queremos verificar se a equação de onda para o elétron é invariante sob transformações de Lorentz.

Precisamos verificar se quando fizermos uma mudança de referencial as soluções da eq. de onda podem ser colocadas em uma correspondência 1 para 1. e assim além disso que as soluções correspondentes representam o mesmo estado.

Em qualquer referencial o módulo quadrado da função de onda somado sobre as 4 componentes deve dar a probabilidade por unidade de volume de encontrar o elétron em um dado ponto do espaço tempo.

Seu valor em diferentes referenciais deve estar relacionado da mesma maneira que a componente temporal de um quadrivector.

Além disso a divergência deste quadrivector deve ser nula de tal modo que haja uma conservação da probabilidade.

~~Considere então uma transformação de Lorentz infinitesimal~~

~~O quadrivector P_μ transforma como~~

$$P'_\mu = P_\mu + a_\mu^\nu P_\nu$$

~~onde a_μ^ν é um número pequeno.~~

~~Desprezamos termos em 2ª ordem em a_μ^ν .~~

Façamos

~~Vamos~~ então fazer uma pequena revisão das transf. de Lorentz

As transf. de Lorentz são rotações no espaço-tempo de

Minkowski. ~~Vamos~~ Considere primeiramente uma rotação de um ângulo ω no plano 1-2. $\left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 \\ & \omega \end{smallmatrix} \right)$

Dai um ponto descrito pelas coordenadas (x_1, x_2, x_3) transforma-se em (x'_1, x'_2, x'_3) onde

$$\begin{cases} x'_1 = x_1 \cos \omega + x_2 \sin \omega \\ x'_2 = -x_1 \sin \omega + x_2 \cos \omega \\ x'_3 = x_3 \end{cases}$$

Por outro lado quando fazemos uma transf. de Lorentz ao longo do eixo x_1 com tal forma que o referencial se move com velocidade $v = \beta c$ obtemos que:

$$x'_1 = \frac{x_1 - \beta x_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad x'_0 = \frac{x_0 - \beta x_1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3$$

ou ainda

$$\begin{cases} x'_1 = x_1 \cosh \chi - x_0 \sinh \chi \\ x'_0 = x_0 \cosh \chi - x_1 \sinh \chi \\ x'_2 = x_2 \\ x'_3 = x_3 \end{cases} \quad \text{onde } \tanh \chi = \beta$$

ou seja χ uma rotação por um ângulo imaginário

Tanto para as rotações como para os "boosts" podemos escrever

$$x'_\mu = a_\mu^\nu x_\nu$$

onde

apresenta

$$a_\mu^\nu a^\mu_\rho = \delta^\nu_\rho \quad \text{pois } (x')^2 = x^2$$

Segue ainda que para transformações que são compostas de transf. infinitesimais temos $\det a_\mu^\nu = 1$

Como o momento P_μ e o potencial vetor A_μ são quadrivetores eles também transformam como,

$$P'_\mu = a_\mu^\nu P_\nu \quad \text{e} \quad A'_\mu = a_\mu^\nu A_\nu$$

Note que a_μ^ν não depende das coordenadas do espaço tempo.

As matrizes γ_μ por outro lado, apesar ~~de serem~~ de carregarem um índice "vetorial" não ~~transformam~~ mudam sob transformações de Lorentz.

A função de onda $\psi(x)$ de sofrer uma ~~transformação~~ ^{mudança} sob transf. de Lorentz. Suponhamos que sua transformação é linear

$$\psi'(x') = S \psi(x)$$

onde S é uma matriz 4×4 . que depende da natureza da transformação de Lorentz mas é independente de x_μ .

A eq. transformada fica então

$$\left\{ \gamma^\mu \left(P'_\mu + \frac{e}{c} A'_\mu \right) - mc \right\} \psi'(x') = 0$$

ou

$$\left\{ \gamma^\mu a_\mu^\nu \left(P_\nu + \frac{e}{c} A_\nu \right) - mc \right\} S \psi(x) = 0$$

Multiplicando por S^{-1} a esquerda

$$\left\{ S^{-1} \gamma^\mu S a_\mu^\nu \left(P_\nu + \frac{e}{c} A_\nu \right) - mc \right\} \psi(x) = 0$$

Portanto a eq. de Dirac é invariante desde que

$$S^\dagger \gamma^\mu S a_\mu^\nu = \gamma^\nu$$

ou equivalentemente

$$S^\dagger \gamma_\mu S = a_{\mu}^\nu \gamma_\nu \rightarrow ((S_1, S_2)^\dagger \gamma_\mu (S_1, S_2) = S_2^\dagger a_{1\mu}^\nu \gamma_\nu S_2 = a_{1\mu}^\nu a_{2\nu}^\rho \gamma_\rho)$$

Esta equação determina a matriz S e portanto a lei de transformação para a função de onda $\psi(x)$.

Exercício Determine a matriz S que satisfaz a equação acima para os casos:

i) uma rotação espacial

ii) um "boost"

O que ocorre quando o ângulo de uma rotação espacial é 2π ?

Estas matrizes são unitárias? Mostre que em qualquer um dos casos temos $S^\dagger = \alpha_m S^\dagger \alpha_m$

Vemos então que, desde que ψ transforme como $\psi' = S\psi$ a eq. de Dirac é invariante por transf. de Lorentz.

As funções de onda nos dois referenciais estão em uma correspondência 1 para 1. As funções correspondentes, entre si, representam o mesmo estado.

Vamos verificar se a interpretação física das funções em cada referencial está de acordo.

Queremos que $\psi^\dagger \psi$ dê a densidade de probabilidade

$\psi^\dagger \psi$ é o mesmo que $\psi^\dagger \alpha_0 \psi$ pois $\alpha_0 = 1$

~~Isso é correto~~

Então ele pode ser visto como uma das componentes de $\psi^\dagger \alpha_\mu \psi$ que será tratado juntos.

Definindo

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \alpha_m = \psi^\dagger \gamma^0 \begin{pmatrix} \psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \\ \bar{\psi} = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*) \end{pmatrix}$$

obtemos que

$$\psi^\dagger \alpha_\mu \psi = \bar{\psi} \gamma_\mu \psi$$

Fazendo uma transf. de Lorentz

$$\begin{aligned} \bar{\psi}' \gamma_\mu \psi' &= \psi'^\dagger \alpha_\mu \gamma_\mu \psi' = (S\psi)^\dagger \alpha_\mu \gamma_\mu S\psi = \\ &= \psi^\dagger S^\dagger \alpha_\mu \gamma_\mu S\psi = \bar{\psi} \alpha_\mu S^\dagger \alpha_\mu \gamma_\mu S\psi \end{aligned}$$

Usando o fato que

$$\alpha_\mu S^\dagger \alpha_\mu = S^{-1}$$

$$\text{e que } S^{-1} \gamma_\mu S = a_\mu{}^\nu \gamma_\nu$$

obtemos

$$\bar{\psi}' \gamma_\mu \psi' = a_\mu{}^\nu \bar{\psi} \gamma_\nu \psi$$

Logo $\bar{\psi} \gamma_\mu \psi$ transforma como um quadrivector e portanto

$$\bar{\psi} \gamma_0 \psi = \psi^\dagger \alpha_m \alpha_m \alpha_0 \psi = \psi^\dagger \psi$$

transforma como ~~uma~~ componente temporal de um quadrivector

Mas

$$dx'_\mu = \frac{\partial x'_\mu}{\partial x_\nu} dx_\nu = a_\mu{}^\nu dx_\nu$$

1. dar

$$d^4x' = \left| \frac{\partial x'_\mu}{\partial x_\nu} \right| d^4x = \det(a_{\mu\nu}) d^4x = d^4x$$

Como

$$d^4x = dx_0 d^3x$$

Vemos que d^3x transforma de maneira inversa ~~de~~ a componente temporal de um four-vector. Desta forma

$$\bar{\psi}' \gamma_0 \psi' d^3x' = \bar{\psi} \gamma_0 \psi d^3x$$

ou seja a probabilidade de encontrar o elétron em um elemento de volume v é a mesma em qualquer referencial

Note que

$$\bar{\psi} \gamma_0 \psi = \psi^\dagger \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \geq 0$$

A densidade de probabilidade é positiva definida

Note também que $\bar{\psi} \psi$ é invariante por transformações de Lorentz pois

$$\begin{aligned} \bar{\psi}' \psi' &= \psi'^\dagger \alpha_\mu \psi' = (S^\dagger)^\dagger \alpha_\mu S \psi = \psi^\dagger \alpha_\mu \alpha_\mu S^\dagger \alpha_\mu S \psi \\ &= \bar{\psi} S^{-1} S \psi = \bar{\psi} \psi. \end{aligned}$$

Vejamos agora que a densidade de probabilidade satisfaz a eq. de continuidade. Multipliquemos a equação de onda por $\bar{\psi}$ a esquerda

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} + \frac{e}{c} A_\mu \psi \right) - mc \bar{\psi} \psi = 0$$

~~Multiplicando a eq. conjugada e~~

Como vimos a eq. conjugada e

$$\psi^\dagger \left\{ \gamma^\mu \left(P_\mu + \frac{e}{c} A_\mu \right) - \alpha_m m c \right\} = 0$$

e como $\bar{\psi} = \psi^\dagger \alpha_m$ temos

$$\bar{\psi} \left\{ \gamma^\mu \left(P_\mu + \frac{e}{c} A_\mu \right) - m c \right\} = 0 = -i \hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu + \frac{e}{c} \bar{\psi} A_\mu \gamma^\mu - \bar{\psi} m c$$

~~Subtraindo da~~

Multiplicando por ψ a direita e subtraindo da eq. anterior obtemos

$$i \hbar \bar{\psi} \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} + i \hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \psi = 0$$

ou seja

$$\partial_\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi) = 0$$

e a conservação de probabilidade é conservada.

Ou seja

$$P = \int d^3x \bar{\psi} \gamma^0 \psi \quad \text{satisfaz} \quad \frac{dP}{dt} = 0$$

Em outras palavras, o elétron não pode desaparecer ou aparecer em um dado volume sem passar pela sua fronteira.

Independência da representação

Suponha que alguém escreva a equação

~~interepente~~

$$\gamma^\mu (i\hbar \partial_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) \Phi - mc \Phi = 0$$

onde o único requisito para γ^μ é que eles satisfaçam

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2 \eta^{\mu\nu} \quad (*)$$

Pode-se mostrar que tal equação é equivalente a eq. de Dirac, ~~que~~ que vimos anteriormente (isto é com as matrizes γ_μ definidas anteriormente). No entanto para uma dada situação física Φ e $\bar{\Phi}$ não são a mesma matriz.

Conjuntos de matrizes 4×4 satisfazendo (*) são ditos representações das matrizes gamma de Dirac.

Nós podemos mostrar que a eq. de Dirac é independente da representação usando o seguinte teorema devido a Pauli (veja pag 83 e apêndice C do Advanced Quantum Mechanics - Sakurai)

Teorema: Dados dois conjuntos de matrizes 4×4 satisfazendo

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2 \eta^{\mu\nu}, \quad \{\gamma'^\mu, \gamma'^\nu\} = 2 \eta^{\mu\nu}$$

então existe uma ~~matriz~~ matriz 4×4 não singular T , tal que

$$T \gamma_\mu T^{-1} = \gamma'_\mu$$

Além disso T é única a menos de uma constante multiplicativa.

Dai usando este teorema •

$$0 = \gamma^\mu (i\hbar \partial_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) \psi' - mc \psi' = T \gamma^\mu T^{-1} (i\hbar \partial_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) T^{-1} T \psi' - mc T T^{-1} \psi'$$

Multiplicando por T^{-1} pela esquerda

$$\gamma^\mu (i\hbar \partial_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) T^{-1} \psi' - mc T^{-1} \psi' = 0$$

isto é o mesmo que a eq. de Dirac com $T^{-1} \psi'$ como solução

Dai as soluções estão relacionadas por

$$\psi' = T \psi$$

A corrente de probabilidade transforma de uma representação para outra como:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}' \gamma^\mu \psi' &= \psi'^{\dagger} \gamma_0' \gamma^\mu \psi' = (T\psi)^{\dagger} T \gamma_0 T^{-1} T \gamma^\mu T^{-1} T \psi \\ &= \psi^{\dagger} T^{\dagger} T \gamma_0 \gamma^\mu \psi = \bar{\psi} \gamma_0 T^{\dagger} T \gamma^\mu \psi \end{aligned}$$

Se T for unitária $T^{\dagger} = T^{-1}$ vemos que a corrente de probabilidade não muda de representação e/representados

$$\bar{\psi}' \gamma^\mu \psi' = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$$

Quando as propriedades de hermiticidade dos γ 's são preservadas ($\gamma^{\mu\dagger} = \pm \gamma^\mu$) então

$$\bar{\psi}^{\dagger} \gamma^{\mu\dagger} \psi^{\dagger} = \gamma^{\mu\dagger} \Rightarrow \bar{\psi} (\bar{\psi}^{\dagger})^{-1} \gamma^\mu \psi^{\dagger} = \gamma^\mu$$

Como $\bar{\psi}$ é única $\bar{\psi}^{\dagger} = \bar{\psi}^{-1}$

O spin do elétron

Para estudar o spin nós vamos utilizar a representação de Heisenberg

Temos que

$$\psi(x,t) = e^{-iHt/\hbar} \psi(x,0) \quad (\psi \text{ é uma função autovalor da energia})$$

onde H é o operador Hamiltoniano

A relação entre operadores nas duas representações é

$$\Omega^{(H)}(t) = e^{iHt/\hbar} \Omega^{(S)} e^{-iHt/\hbar} \quad \Omega^{(H)}(0) \equiv \Omega^{(S)}$$

e a evolução temporal é

$$\frac{d\Omega^{(H)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \Omega^{(H)}] + \frac{\partial \Omega^{(H)}}{\partial t}$$

A Hamiltoniana de Dirac para o elétron livre é

$$H \equiv c p_0 = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta_3 m c^2 = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta_3 m c^2$$

Vamos a variação temporal do momento angular orbital

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$$

$$i\hbar \frac{d\vec{L}}{dt} = [\vec{L}, H] = [\vec{r} \wedge \vec{p}, c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta_3 m c^2] = [\vec{r} \wedge \vec{p}, c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}]$$

No caso da componente 1

$$i\hbar \frac{dL_1}{dt} = [x_2 p_3 - x_3 p_2, c \alpha_i p_i] = c \alpha_i [x_2 p_i p_3 - x_3 p_i p_2]$$

$$= i\hbar c \alpha_2 p_3 - i\hbar c \alpha_3 p_2 = i\hbar c (\alpha_2 p_3 - \alpha_3 p_2)$$

ou seja

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = c(\vec{\alpha} \wedge \vec{p})$$

Portanto o momento angular orbital não é conservado, apesar da equação ^{de onde} ser invariante por rotações.

Nós podemos associar um operador dinâmico no rep. de Heisenberg às matrizes Σ_i (ou mesmo α_i)

$$\Sigma_i^{(H)}(t) = e^{iHt/\hbar} \Sigma_i e^{-iHt/\hbar}$$

As relações de anticomutação de Σ são válidas para $\Sigma^{(H)}(t)$

Temos então

$$i\hbar \frac{d\vec{\Sigma}^{(H)}}{dt} = [\vec{\Sigma}^{(H)}, H] = e^{iHt/\hbar} [\vec{\Sigma}, H] e^{-iHt/\hbar}$$

~~Para~~

$$[\vec{\Sigma}, H] = [\vec{\Sigma}, c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + p_z m c^2] = c p_1 [\vec{\Sigma}, \vec{\Sigma} \cdot \vec{p}]$$

uma vez que ~~$\vec{\Sigma} \cdot \vec{p} = 0$~~ $[\Sigma_i, p_j] = 0$

Mas $\vec{\Sigma}$ satisfaz

$$[\Sigma_i, \Sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \Sigma_k$$

e daí

$$[\Sigma_i, H] = 2i c p_1 \epsilon_{ijk} \Sigma_k p_j$$

ou seja

$$[\vec{\Sigma}, H] = -2i c p_1 \vec{\Sigma} \wedge \vec{p}$$

Daí

$$i\hbar \frac{d\vec{\Sigma}^{(H)}}{dt} = e^{iHt/\hbar} (-2ic p_1 \vec{\Sigma} \wedge \vec{p}) e^{-iHt/\hbar}$$

$$= -2ic p_1^{(H)} \vec{\Sigma}^{(H)} \wedge \vec{p} = -2ic \vec{\alpha}^{(H)} \wedge \vec{p}$$

uma vez q $p^{(H)} \equiv p$ pois p comuta com H .

Se $\vec{\Sigma}^{(H)}$ também não é conservado no tempo

No entanto o operador

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$$

é conservado no tempo

Podemos interpretar este resultado ~~como~~ dizendo que o elétron tem um momento angular de spin $\frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$ que ~~se~~ deve ser adicionado ao momento angular orbital para ter uma constante de movimento.

Portanto somos levados ao valor do spin do elétron simplesmente através de argumentos baseados nos princípios da mecânica quântica e relatividade restrita.

Vejamos agora como o momento magnético do elétron é obtido.

~~Se fizermos isso, veremos que a teoria clássica~~

Considere a eq. de onda para o elétron acoplado ao campo eletromagnético

$$\left\{ p_0 + \frac{e}{c} A_0 - p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) - p_3 mc \right\} \psi = 0$$

Multiplicamos a equação pelo operador

$$p_0 + \frac{E}{c} A_0 + p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A}) + p_3 m c$$

Temos então:

$$\begin{aligned} & \left\{ \underbrace{(p_0 + \frac{E}{c} A_0)^2}_{(1)} + \underbrace{p_1 (p_0 + \frac{E}{c} A_0) \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A})}_{(2)} + \cancel{(p_0 + \frac{E}{c} A_0) p_3 m c} + \right. \\ & + p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A}) (p_0 + \frac{E}{c} A_0) - \underbrace{p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A}) p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A})}_{(3)} - \\ & - \cancel{p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A}) p_3 m c} + \cancel{p_3 m c (p_0 + \frac{E}{c} A_0)} - \cancel{p_3 m c p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A})} - \\ & \left. - \underbrace{p_3^2 m^2 c^2}_{(4)} \right\} \psi = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (p_0 + \frac{E}{c} A_0)^2 - [\vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A})]^2 - m^2 c^2 - p_1 \{ (p_0 + \frac{E}{c} A_0) \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A}) - \\ - \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{E}{c} \vec{A}) (p_0 + \frac{E}{c} A_0) \} \psi = 0 \end{aligned}$$

Se $\vec{B}$ e $\vec{C}$ são dois vetores que comutam ~~com~~ ^{com $\vec{\Sigma}$} , temos

$$(\vec{\Sigma} \cdot \vec{B})(\vec{\Sigma} \cdot \vec{C}) = \sum_i B_i \sum_j C_j \Sigma_j = \sum_i \sum_j B_i C_j \Sigma_j$$

Como

$$\sigma_i \sigma_j = \frac{i}{2} \epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \mathbb{I}_{2 \times 2}$$

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}$$

$$\text{temos } \Sigma_i \Sigma_j = i \epsilon_{ijk} \Sigma_k + \delta_{ij} \mathbb{I}_{4 \times 4}$$

Logo

$$\begin{aligned} (\vec{\Sigma} \cdot \vec{B})(\vec{\Sigma} \cdot \vec{C}) &= \{\vec{B} \cdot \vec{C} + i \epsilon_{ijk} B_i C_j \Sigma_k\} \\ &= \vec{B} \cdot \vec{C} + i \vec{\Sigma} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) \end{aligned} \quad (*)$$

Colocando $\vec{B} = \vec{E} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$ temos

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{ijk} (p_j + \frac{e}{c} A_j) (p_k + \frac{e}{c} A_k) &= \epsilon_{ijk} (p_j p_k + \frac{e}{c} (p_j A_k + A_j p_k) + \frac{e^2}{c^2} A_j A_k) \\
 &= \frac{e}{c} \epsilon_{ijk} (p_j A_k - A_k p_j) \\
 &= -i \frac{\hbar e}{c} \epsilon_{ijk} (\partial_j A_k - A_k \partial_j) \\
 &= -i \frac{\hbar e}{c} \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} (\partial_j A_k - \partial_k A_j) \\
 &= -i \frac{\hbar e}{c} \text{rot } \vec{A} = -i \frac{\hbar e}{c} \vec{B} \quad (*)2
 \end{aligned}$$

Temos ainda que

$$\begin{aligned}
 (p_0 + \frac{e}{c} A_0) \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) - \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) (p_0 + \frac{e}{c} A_0) &= \\
 = \sum_i \left\{ \cancel{p_0 p_i} + \frac{e}{c} (p_0 A_i + A_0 p_i) + \left(\frac{e}{c}\right)^2 \cancel{A_0 A_i} - \cancel{p_i p_0} - \frac{e}{c} (p_i A_0 + A_i p_0) - \left(\frac{e}{c}\right)^2 \cancel{A_i A_0} \right\} \\
 = \frac{e}{c} \sum_i \{ [p_0, A_i] + [A_0, p_i] \} = \\
 = i \frac{\hbar e}{c} \sum_i \left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_0}{\partial x_i} \right\} = i \frac{\hbar e}{c} \vec{\Sigma} \cdot \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \text{grad } A_0 \right) \\
 = -i \frac{\hbar e}{c} \vec{\Sigma} \cdot \vec{E}
 \end{aligned}$$

Da esta forma obtemos a equação:

~~Equação de Dirac~~

$$\left\{ (p_0 + \frac{e}{c} A_0)^2 - (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 - m^2 c^2 - \frac{\hbar e}{c} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} + i p_1 \frac{\hbar e}{c} \vec{\Sigma} \cdot \vec{E} \right\} \psi = 0$$

Se tomássemos a eq.

$$\{p_0^2 - \vec{p}^2 - m^2 c^2\} \psi = 0$$

e fizéssemos a substituição minimal $p_\mu \rightarrow p_\mu + \frac{e}{c} A_\mu$ obteríamos uma eq. sem os dois últimos termos, ou seja, o acoplamento de $\vec{\Sigma}$ com $\vec{B}$ e $\vec{E}$. (Note que o termo contendo $\vec{\Sigma} \cdot \vec{E}$ é imaginário puro)

$$\vec{\Sigma} \cdot \vec{A} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{A} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} \cdot \vec{A} = \begin{pmatrix} A_3 & (A_1 - iA_2) \\ (A_1 + iA_2) & -A_3 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\Sigma} \cdot \vec{A} \psi = \begin{pmatrix} A_3 \psi_1 + (A_1 - iA_2) \psi_2 \\ (A_1 + iA_2) \psi_1 - A_3 \psi_2 \\ A_3 \psi_3 + (A_1 - iA_2) \psi_4 \\ (A_1 + iA_2) \psi_3 - A_3 \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$p_1 \vec{\Sigma} \cdot \vec{A} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{A} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{A} & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow p_1 \vec{\Sigma} \cdot \vec{A} \psi = \begin{pmatrix} A_3 \psi_3 + (A_1 - iA_2) \psi_4 \\ (A_1 + iA_2) \psi_3 - A_3 \psi_4 \\ A_3 \psi_1 + (A_1 - iA_2) \psi_2 \\ (A_1 + iA_2) \psi_1 - A_3 \psi_2 \end{pmatrix}$$

Para ter um melhor entendimento destes termos vamos trabalhar na representação de Heisenberg. Como vimos a Hamiltoniana do elétron livre é:

$$H = p_0 c = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + p_3 m c^2$$

Quando introduzimos o campo eletromagnético obtemos

$$\begin{aligned} H = p_0 c &= -e A_0 + c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) + p_3 m c^2 \\ &= -e A_0 + c p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) + p_3 m c^2 \end{aligned}$$

Daí obtemos

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{H}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 &= \left[p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) + p_3 m c \right]^2 \\
 &= \left[\vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) \right]^2 + m^2 c^2 + (p_1 p_3 + p_3 p_1) m c \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}) \\
 &= (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 + \frac{\hbar e}{c} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} + m^2 c^2
 \end{aligned}$$

onde usamos (x.1) e (x.2) e o fato que p_i comuta com Σ_j

Temos então a parte real dos termos extras aparecendo aqui, sem o termo imaginário puro.

Para um elétron lento (com momento linear pequeno) esperamos que as equações de movimento de Heisenberg sejam determinadas por uma Hamiltoniana da forma

$$m c^2 + H_1$$

onde $H_1 \ll m c^2$.

Substituindo H por $H_1 + m c^2$ na eq. acima, ~~obtemos~~ desprezando termos quadráticos em H_1 e em c^{-1} , nós obtemos (dividindo tudo por $2m$)

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{H_1}{c} + m c + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 = \frac{1}{2m} (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 + \frac{\hbar e}{2m c} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} + \frac{m^2 c^2}{2m}$$

ou seja

$$H_1 + e A_0 = \frac{1}{2m} (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 + \frac{\hbar e}{2m c} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B}$$

~~Esta~~ A Hamiltoniana H_1 dada por esta expressão é a mesma que a clássica, a menos do termo

$$\frac{\hbar e}{2mc} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B}$$

Este termo pode ser considerado como uma energia potencial que um elétron lento tem na teoria quântica e pode ser interpretado como sendo devido a um momento de dipolo magnético ~~do~~ do elétron ~~tem~~ cujo valor é

$$\vec{m} = - \frac{\hbar e}{2mc} \vec{\Sigma}$$

E esta é na verdade o momento de dipolo usado no efeito Zeeman e concorda com a experiência.

Vemos então que o spin do elétron e seu momento magnético estão na mesma direção e sentidos opostos (i.e. são proporcionais)

* A Teoria do positron

Nós vimos que a eq. de onda do elétron tem duas vezes mais soluções do que ele deveria ter. Metade destas soluções referem-se a estados de energia negativa, isto é o operador $c \not{p} + e \phi_0$ tem autovalores negativos.

Este é um problema que aparece em qualquer teoria relativística.

Na teoria clássica ele também ocorre mas lá a dificuldade não é séria. O espectro é tal que

$$E \geq mc^2 \quad \text{ou} \quad E \leq -mc^2$$

Como as variáveis clássicas variam continuamente o sistema não pode passar de energias positivas para negativas e vice versa.

Na teoria quântica no entanto isto pode acontecer. O elétron pode emitir um fóton e cair num estado de $E < 0$. Na verdade a teoria não tem vácuo. Temos então que levar em conta os estados de energia negativa.

Vamos examinar as soluções de energia negativa da equação

$$\left\{ \left(p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right) - \alpha_i \left(p_i + \frac{e}{c} A_i \right) - \alpha_m mc \right\} \psi = 0 \quad (*)$$

Vamos usar uma representação para os α 's onde todos os elementos das matrizes representando α_i $i=1,2,3$ são reais e a quarta representando α_m são imaginários puros ou nulos.

Podemos fazer isto trocando α_2 por α_m e vice versa.

Para

$$\alpha_1 = \rho_1, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_m = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_m = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{onde } \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Daí trocando i por $-i$ em toda a expressão obtemos (tomando o complexo conjugado)

$$\left\{ \left(-p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right) - \alpha_i \left(-p_i + \frac{e}{c} A_i \right) + \alpha_m mc \right\} \psi^* = 0 \quad (**)$$

$$\text{uma vez que} \quad p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

Portanto o complexo conjugado de ~~uma~~ solução da eq (*) é uma solução da eq (**). Além do mais se

~~seja ψ uma solução da eq (*)~~

$$(c p_0 + e A_0) \psi = E \psi$$

Vamos fazer

$$(-c p_0 + e A_0) \psi^* = E \psi^* \Rightarrow (c p_0 - e A_0) \psi^* = -E \psi^*$$

Logo se uma solução de (*) corresponde a um valor E negativo de $c p_0 + e A_0$ vemos que a solução correspondente de (**) tem um valor positivo de $c p_0 - e A_0$.

Por outro lado o operador em (**) é obtido de $(*)$ trocando e por $-e$.

Segue então que cada solução de energia negativa de (*) é o complexo conjugado de uma solução de energia positiva da eq. de onda obtida de (*) trocando e por $-e$. Tal solução corresponde a um elétron de carga positiva ($+e$).

Logo as soluções de energia negativa da equação de Dirac estão associadas a partículas de carga $+e$ e massa igual a do elétron. Estas partículas foram chamadas de positrons ou antielétrons.

No entanto não podemos dizer simplesmente que as soluções de energia negativa são positrons pois isto levaria a dizer que as relações dinâmicas estivessem erradas. Pois não é verdade que um positron tenha energia ^{cinética} negativa.

Para estabelecer a teoria dos pósitrons, nós precisamos adicionar um pouco mais.

Devido ao fato da teoria de Dirac não ter um vácuo, um elétron poderia diminuir sua energia indefinidamente emitindo fótons.

Portanto ^{Dirac} propôs em 1930 que todos os estados (ou quase todos) de energia negativa estão ocupados. Com um elétron em cada estado de acordo com o princípio de exclusão de Pauli.

Um elétron de energia negativa pode absorver um fóton de energia $h\nu > 2mc^2$ e se tornar um elétron de energia positiva. Desta forma foi criado um "buraco" no mar dos elétrons.

A energia "observável" do mar é a energia do vácuo menos a energia (negativa) do elétron que saiu e é portanto uma energia positiva.

Da mesma forma a carga "observável" do mar age e a carga do mar com buracos é menos a carga do mar sem buracos o vácuo.

$$Q_{\text{obs}} = Q - Q_{\text{vácuo}}$$

$$e \quad Q = Q_{\text{vácuo}} - e = Q_{\text{vácuo}} - (-|e|) = Q_{\text{vácuo}} + |e|$$

$$\text{daí} \quad Q_{\text{obs}} = |e|$$

A mesma coisa pode se fazer para o momento e o spin.

Daí o buraco aparece como uma partícula de energia positiva

e carga oposta ao do elétron. Desta forma os pósitrons

são ~~chamados~~ interpretados como os buracos.

Primariamente Dirac pensou que os buracos fossem prótons.

Mas Oppenheimer chamou atenção para o fato que se isso fosse certo o átomo de H se aniquilava em dois fótons, com

uma vida média da 10^{-10} s. Além do mais Weyl mostrou que por razões de simetria que a massa da partícula associada ao buraco deveria ser a massa do elétron.

~~Originalmente~~ Anderson (1932) demonstrou experimentalmente a existência de pósitrons.

A hipótese do mar negro uma distribuição de elétrons de densidade infinita em todo o Universo.

O vácuo perfeito é aquele onde todos os estados de $E > 0$ estão desocupados e todos de $E < 0$ estão ocupados.

Num vácuo perfeito a eq. de Maxwell deve ser válida.

$$\text{div } \vec{E} = 0$$

Isto quer dizer que a densidade infinita de elétrons não contribui para o campo elétrico somente as flutuações de distribuição nos contribuem para a densidade de carga no espaço

$$\text{div } \vec{E} = 4\pi j_0$$

O princípio da exclusão ~~pro~~ proíbe um elétron de $E > 0$ de entrar no mar. No entanto se existir um buraco ele pode cair e emitir radiação (o elétron e pósitron desaparecem)

O inverso também pode ocorrer

Da simetria entre estados fermiônicos ocupados e não ocupados esta teoria é simétrica entre elétrons e pósitrons

Teríamos uma teoria equivalente se suposéssemos que os pósitrons fossem as partículas básicas e os elétrons os buracos

Isto é na verdade a simetria matéria-antimatéria.

Soluções de ondas planas

Queremos construir agora soluções exatas da eq. de Dirac para o elétron livre.

Primeiramente chamaremos a atenção para o fato que cada componente do spinor de Dirac satisfaz a eq. de Klein Gordon.

Considere a eq. de Dirac

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi = 0 \Rightarrow \left[i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0 \quad (p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu})$$

onde $\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ $\gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}$

Multiplicando a equação pelo operador $\gamma^\nu \partial_\nu$ temos

$$i\gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\nu \partial_\mu \psi - \frac{mc}{\hbar} \gamma^\nu \partial_\nu \psi = 0 \Rightarrow i\gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\nu \partial_\mu \psi + \frac{mc}{\hbar} i\gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0$$

e daí

$$\gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\nu \partial_\mu \psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi = 0$$

Mas

$$\gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\nu \partial_\mu = \frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) \partial_\nu \partial_\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu \partial_\mu = \square$$

e portanto

$$= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \right] \psi = 0$$

Esta relação corresponde na verdade a 4 equações desacopladas. Uma para cada componente de ψ .

Uma sol. para esta eq. e'

$$\begin{aligned} \psi &= u(\vec{p}) \exp(i P_\mu x^\mu / \hbar) \\ &= u(\vec{p}) \exp(i \frac{E}{\hbar} t / \hbar + i \vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar) \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{onde } u(\vec{p}) \text{ e' um} \\ \text{spinor independente} \\ \text{de } x^\mu \end{array} \right.$$

pois

$$\partial_\mu \psi = u(\vec{p}) i \frac{P_\mu}{\hbar} \exp(i P_\mu x^\mu / \hbar)$$

$$\partial^\mu \partial_\mu \psi = - \frac{P_\mu P^\mu}{\hbar^2} \psi$$

e dar

$$P_\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right)$$

$$\left(- \frac{P_\mu P^\mu}{\hbar^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0$$

Logo temos que tem

$$- \frac{E^2}{c^2} + \vec{p}^2 + m^2 c^2 = 0 \implies E = \pm \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Estas solucoes correspondem portanto a valores positivos e negativos da energia.

Note que estas solucoes sao auto estados simultaneos de $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ e $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -i \frac{E}{\hbar} \psi (i\hbar) = \frac{E}{\hbar} \psi$$

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi = -i\hbar i \frac{\vec{p}}{\hbar} \psi = \vec{p} \psi$$

Note tambem que poderiamos trocar o sinal do argumento da exponencial que ainda teriamos uma solucao ($\psi = u(\vec{p}) e^{-i P_\mu x^\mu / \hbar}$) mas nos teriamos nada novo.

Para uma partícula em repouso ($\vec{p}=0$) a eq. que temos
 que resolver é (eq. da Dirac com $\vec{p}=0$)

$$i \frac{\gamma^0}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{m c}{\hbar} \psi$$

Denotando $u(\vec{p}) = \begin{pmatrix} u_A(\vec{p}) \\ u_B(\vec{p}) \end{pmatrix}$ temos

$$\frac{i}{c} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix} \left(-\frac{iE}{\hbar} \right) = \frac{m c}{\hbar} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_A(0) \\ -u_B(0) \end{pmatrix} = \frac{m c^2}{E} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix}$$

onde $E = \pm m c^2$ pois $\vec{p}=0$.

Logo para

$$i) E = m c^2 \Rightarrow u_B(0) = 0$$

$$ii) E = -m c^2 \Rightarrow u_A(0) = 0$$

Portanto temos 4 soluções independentes para a eq. da Dirac
 com $\vec{p}=0$,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i m c^2 t / \hbar}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i m c^2 t / \hbar}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i m c^2 t / \hbar}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i m c^2 t / \hbar}$$

Se interpretamos $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ como sendo o operador Hamiltoniano vemos que as duas primeiras soluções correspondem a energias positivas enquanto que as outras duas a energias negativas (Esta está relacionada com a existência do positron)
Nós vimos que o operador de spin do elétron é dado por

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

Vemos então que a 1ª e 3ª soluções têm autovalor $+\frac{\hbar}{2}$ de componente z de $\vec{S}$, enquanto que a 2ª e a 4ª têm autovalor $-\frac{\hbar}{2}$

Logo a 1ª e a 3ª podem ser vistas como spin para cima e a 2ª e 4ª como spin para baixo.

Não podemos no entanto dizer que a função de onda da eq. de Dirac tem 4 componentes porque temos 4 estados para o elétron: 2 de energia (positiva e negativa) e 2 de spin.

A eq. de Klein & Gordon tem uma função de onda de uma componente somente e no entanto acomoda as soluções de energias negativa e positiva.

Na eq. de Dirac precisamos conhecer ψ em $t=0$ para determinar ψ em $t=t$. ~~Em eqs. a duas~~ Isto porque são as lineares em derivadas temporais.

Quando tratamos o elétron com função de onda com duas componentes temos equações ~~que~~ que têm derivadas segunda no tempo. Por precisamos conhecer ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ em $t=0$ para determinar ψ em $t=t$. Logo o n.º de componentes que temos que especificar é sempre quatro.

Vamos considerar agora o caso em que $\vec{p} \neq 0$. Da eq. de Dirac temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi - \gamma_i p_i \psi = m c \psi$$

Se ψ for um auto estado de Hamiltoniana

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi$$

obtemos, (denotando $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$)

$$\frac{E}{c} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = m c \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \psi_A = \frac{1}{c} [E + m c^2] \psi_B \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \psi_B = \frac{1}{c} [E - m c^2] \psi_A \end{cases}$$

Substituindo a solução

$$\psi = \begin{pmatrix} u_A(\vec{p}) \\ u_B(\vec{p}) \end{pmatrix} \exp(-iEt/\hbar + i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar)$$

obtemos:

$$u_A(\vec{p}) = \frac{c}{E - m c^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) u_B(\vec{p})$$

$$u_B(\vec{p}) = \frac{c}{E + m c^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) u_A(\vec{p})$$

uma vez que

$$\begin{matrix} \hat{p} \\ \uparrow \\ \text{operador} \end{matrix} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar} = \vec{p} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar}$$

Para $E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ podemos tentar para $u_A(\vec{p})$ as expressões

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

a ~~menos~~ de normalização.

Daí

$$\begin{pmatrix} u'_0 \\ u'_3 \end{pmatrix} = \frac{c}{E+mc^2} \begin{pmatrix} p_3 & p_1 - i p_2 \\ p_1 + i p_2 & -p_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u'_0 \\ u'_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} p_3 c / (E+mc^2) \\ (p_1 + i p_2) c / (E+mc^2) \end{pmatrix}$$

e ainda

$$\begin{pmatrix} u'_3 \\ u'_0 \end{pmatrix} = \frac{c}{E+mc^2} \begin{pmatrix} p_3 & p_1 - i p_2 \\ p_1 + i p_2 & -p_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (p_1 - i p_2) c / (E+mc^2) \\ -p_3 c / (E+mc^2) \end{pmatrix}$$

Obtemos então duas soluções

$$u^{(1)}(\vec{p}) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p_3 c / (E+mc^2) \\ (p_1 + i p_2) c / (E+mc^2) \end{pmatrix} \quad u^{(2)}(\vec{p}) = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ (p_1 - i p_2) c / (E+mc^2) \\ -p_3 c / (E+mc^2) \end{pmatrix}$$

Quando $\vec{p} \rightarrow 0$ obtemos as 1ª e 2ª soluções p da página 299.

Para $E = -\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ podemos tentar para $u_B(\vec{p})$ as expressões

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dar

$$\begin{pmatrix} u_A^1 \\ u_A^2 \end{pmatrix} = \frac{c}{E - mc^2} \begin{pmatrix} P_3 & (P_1 - i P_2) \\ (P_1 + i P_2) & -P_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_B^1 \\ u_B^2 \end{pmatrix}$$

e obtemos então as soluções

$$u^{(3)}(\vec{p}) = N \begin{pmatrix} -P_3 c / (E + mc^2) \\ -(P_1 + i P_2) c / (E + mc^2) \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^{(4)}(\vec{p}) = N \begin{pmatrix} -(P_1 - i P_2) c / (E + mc^2) \\ +P_3 c / (E + mc^2) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Quando $\vec{p} \rightarrow 0$ obtemos as 3ª e 4ª soluções da página 299.

Cada um desses 4 espinores

$$\psi^{(r)} = u^{(r)}(\vec{p}) \exp(-iEt/\hbar + i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar) \quad r=1,2,3,4$$

satisfaz a eq. da Dirac livre. Logo $u^{(r)}(\vec{p})$ satisfaz

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc) u^{(r)}(\vec{p}) = 0 \quad \text{com} \quad \gamma^\mu p_\mu = \gamma^0 \frac{E}{c} - \gamma_i p_i$$

tanto para $E < 0$ ou $E > 0$.

No caso $\vec{p} = 0$ nós vimos que as soluções da pag 299 eram ~~estados~~ autoestados de Σ_3 (componente z do spin).

No caso $\vec{p} \neq 0$ isto não é mais verdade. (Basta verificar diretamente.)

Mas coloquemos o eixo z na direção de $\vec{p}$ de tal modo que

$p_1 = p_2 = 0$. Verificamos então que $u^{(r)}$ $r=1, \dots, 4$ são autoestados de Σ_3 com autovalores $+1, -1, +1$ e -1 respectivamente.

Na verdade ondas planas de elétrons livres podem sempre ser tomadas como autoestados de ~~$\vec{\Sigma} \cdot \hat{p}$~~ $\vec{\Sigma} \cdot \hat{p}$ onde $\hat{p} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$, mas nós é possível tomá-las como autoestados de $\vec{\Sigma} \cdot \hat{n}$ com $\hat{n}$ um vetor unitário arbitrário.

A razão disso é que $\vec{\Sigma} \cdot \hat{n}$ comuta com a Hamiltoniana somente se $\hat{n} = \pm \hat{p}$ ou então $\vec{p} = 0$.

O operador $\vec{\Sigma} \cdot \hat{p}$ que pode ser diagonalizado simultaneamente com a Hamiltoniana é chamado de operador helicidade.

Como vimos a Hamiltoniana para o elétron livre é dada por

$$H = c p_0 = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + p_3 m c^2$$

$$= c p_1 \vec{\Sigma} \cdot \vec{p} + p_3 m c^2$$

com $[\Sigma_i, p_j] = 0$ e $[\Sigma_i, \Sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \Sigma_k$

Daí

$$[H, \vec{\Sigma} \cdot \hat{n}] = c p_1 [\vec{\Sigma} \cdot \vec{p}, \vec{\Sigma} \cdot \hat{n}] = c p_1 p_i n_j [\Sigma_i, \Sigma_j]$$

$$= c p_1 2i \epsilon_{ijk} \Sigma_k p_i n_j = 2i c p_1 \vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} \times \hat{n})$$

Logo

$$[H, \vec{\Sigma} \cdot \hat{p}] = 0 \quad \text{se} \quad \hat{n} = \pm \hat{p} \quad (\text{ou então } \vec{p} = 0)$$

Denotamos os estados de helicidade de acordo com o autovalor de $\vec{\Sigma} \cdot \vec{p}$ como

$$\vec{\Sigma} \cdot \vec{p} = \begin{cases} 1 & \text{estado de direita (right handed)} \\ -1 & \text{" " " esquerda (left handed)} \end{cases}$$

Ortoogonalidade

Para um dado valor de $\vec{p}$ é fácil ver que as soluções $u^{(r)}(\vec{p})$ são ortogonais

$$u^{(r')}(\vec{p})^\dagger u^{(r)}(\vec{p}) = 0 \quad \text{para } r \neq r'$$

Quanto a normalização existem duas convenções na literatura

a) $u^{(r)}(\vec{p})^\dagger u^{(r)}(\vec{p}) = 1$

que implica

$$\left[1 + \frac{\vec{p}^2 c^2}{(E + mc^2)^2} \right] N^2 = 1$$

e daí

$$\begin{aligned} N^2 &= \frac{(E + mc^2)^2}{(E + mc^2)^2 + \vec{p}^2 c^2} = \frac{(E + mc^2)^2}{E^2 + m^2 c^4 + 2mc^2 E + \cancel{E^2 - m^2 c^4}} \\ &= \frac{E + mc^2}{2E} \Rightarrow N = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2E}} \end{aligned}$$

b) $u^{(r')}(\vec{p})^\dagger u^{(r)}(\vec{p}) = \frac{E}{mc^2}$

e daí

$$N = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}}$$

Esta segunda escolha implica que $u^\dagger u$ transforme como a componente temporal de um quadrivector.

Exercício (Sakurai - Advanced Q.M. Ex 3-2 pag 175)

Considere um elétron em um campo magnético uniforme $\vec{B}$ ao longo do eixo z . Obtenha as autofunções (4 componentes) de energia positiva mais geral. Mostre que os autovalores de energia são

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p_z^2} + 2m\epsilon c |\vec{B}|$$

com $m = 0, 1, 2, \dots$

Lista todas as constantes de movimento.

(Ver V. A. Fock - Fundamentals of Quantum Mechanics, pag 316)