

Teoria de perturbação dependente do tempo.

Ref.: Cap. 17, Messiah

Cap. 19, Henzberger

ideia: determinar soluções aproximadas da eq. de Schrödinger dependente do tempo;

se  $|ψ(t_0)\rangle$ : estado inicial do sistema

$\psi |ψ(t)\rangle = U(t, t_0) |ψ(t_0)\rangle$ : estado do sistema instante  $t > t_0$ .

↳ ideia método: determinar uma expressão aproximada p/ operador de evolução temporal  $U(t, t_0)$ !

inicial (i): lembrar propriedades op. de evolução temporal  $U(t, t_0)$ ;  
se  $H(t)$ : hamiltoniano do sistema, temos que

$$i\hbar \frac{dU(t, t_0)}{dt} = H(t)U(t, t_0)$$

: eq. de movimento

$$\textcircled{1} \text{ c.i. : } U(t_0, t_0) = I \quad \text{op. } U(t, t_0) \quad (43.1)$$

propriedades  $U(t, t_0)$ :

$$- U(t, t) = I$$

$$- U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$$

$$\hookrightarrow U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t) = U^*(t, t_0) \quad (43.2)$$

↑ pois  $U(t, t_0)$  op. unitária

solução formal Eq. (43.1):

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0) \quad (43.3)$$

itenando Eq. (43.3), temos que

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) H(t_1) + \dots$$

$$+ \dots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n) + \dots \quad (44.1)$$

a eq. acima pode ser escrita como (veja pg. 44.1)

$$U(t, t_0) = \sum_{n \geq 0} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_n} dt_n T[H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n)] \quad (44.2)$$

onde  $T[H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n)]$  : produto cronológico operadores  
 $H(t_1), H(t_2), \dots, H(t_n)$

$$\text{Ex.: } T[H(t_1) H(t_2)] = \begin{cases} H(t_1) H(t_2), & \text{se } t_2 < t_1 \\ H(t_2) H(t_1), & \text{se } t_1 < t_2 \end{cases} \quad (44.3)$$

hipótese:  $H \neq H(t)$  : sistema conservativo,

$$\text{Eq. (44.2): } U(t, t_0) = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n H^n(t - t_0)^n = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (44.4)$$

Eq. (43.3) pode ser escrita como:

$$U^+(t, t_0) = 1 + i \int_{t_0}^t dt' U^+(t', t_0) H(t') \quad \underbrace{U(t_0, t)}_{U(t_0, t')}$$

$$t \leftrightarrow t_0 : U(t, t_0) = 1 + i \int_t^{t_0} dt' U(t, t') H(t')$$

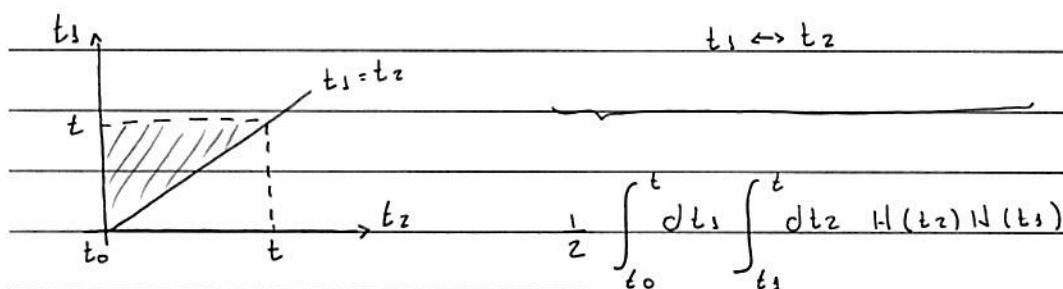
$$\hookrightarrow U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' U(t, t') H(t') \quad (44.5)$$

sobre o produto cronológico de operações, notam:

$$(I) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) +$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2)$$

veja figura  $= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 H(t_1) H(t_2)$



$$\hookrightarrow (I) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 H(t_2) H(t_1)$$

$$t_2 < t_1 \rightarrow t_1 - t_2 > 0$$

$$t_1 < t_2 \rightarrow t_2 - t_1 > 0$$

$$= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 H(t_1) H(t_2) \Theta(t_1 - t_2) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) H(t_1) \Theta(t_2 - t_1)$$

$$= \frac{1}{2!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \mathbb{I}[H(t_1) H(t_2)]$$

inicial (ii) : versão (pictunes) de interação da H.Q. (Henzbachen)  
 formulação intermediária entre versões de Schrödinger e de Heisenberg ; nesse caso, tanto estados quanto observáveis : dependentes do tempo !

consideram o hamiltoniano do sistema

$$H(t) = H_0(t) + V(t) \quad (45.1)$$

onde  $H_0(t)$  : sol. eq. de Schrödinger conhecida  
 e  $V(t)$  : termo de interação

define-se op. unitário  $U_0(t, t_0)$ , sol. eq. de movimento :

$$i\hbar \frac{dU_0(t, t_0)}{dt} = H_0(t) U_0(t, t_0) \quad \text{c.i. : } U_0(t_0, t_0) = I \quad (45.2)$$

$$\stackrel{e}{=} |\psi_I(t)\rangle = U_0^\dagger(t, 0) |\psi_S(t)\rangle : \text{estado do sistema versão de interação}$$

$$A_I(t) = U_0^\dagger(t, 0) A_S U_0(t, 0) : \text{observável} \quad " \quad " \quad " \quad " \quad (45.3)$$

↳ eqs. de movimento :

$$(i) i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = i\hbar \underbrace{\frac{dU_0^\dagger}{dt} |\psi_S(t)\rangle}_{= -U_0^\dagger H_0} + U_0^\dagger \underbrace{\left( i\hbar \frac{d|\psi_S(t)\rangle}{dt} \right)}_{= H|\psi_S(t)\rangle}$$

$$\stackrel{\text{e}}{=} i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = V_I(t) |\psi_I(t)\rangle : \text{eq. de movimento} \quad (45.4)$$

p/ estado  $|\psi_I(t)\rangle$

$$(ii) \frac{i\hbar}{dt} dA_I = \left( \frac{i\hbar}{dt} dU_0^t \right) A_S U_0 + i\hbar U_0^t \frac{\partial A_S}{\partial t} U_0 + U_0^t A_S \left( \frac{i\hbar}{dt} dU_0 \right).$$

$$= -U_0^t H_0 \quad \equiv \frac{\partial A_I}{\partial t} \quad = H_0 U_0$$

$$\hookrightarrow \frac{i\hbar}{dt} dA_I = [A_I, H_0] + \frac{i\hbar}{dt} dA_I : \text{eq. de movimento}$$

pr observável  $A_I(t)$  (46.1)

notar Eqs. (45.4) e (46.1) :

$| \Psi_I(t) \rangle$  : evolução temporal ~ termo de interação  $V(t)$

$A_I(t)$  : " " " " não-interagente  $H_0(t)$

• se  $H_0 \neq H_0(t) \rightarrow$  solução Eq. (45.2) = Eq. (44.4) :

$$U_0(t, t_0) = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \quad (46.2)$$

• notar Eq. (45.3) :

$$| \Psi_I(t) \rangle = U_0^t(t, 0) | \Psi_S(t) \rangle = U_0^t(t, 0) U(t, t_0) | \Psi_S(t_0) \rangle$$

$$\text{como } | \Psi_S(t_0) \rangle = U_0^t(t_0, 0) | \Psi_S(t_0) \rangle = | \Psi_S(0) \rangle$$

$$\hookrightarrow | \Psi_I(t) \rangle = U_0^t(t, 0) U(t, t_0) U_0^t(t_0, 0) U_0^t(t_0, 0) | \Psi_S(t_0) \rangle$$

$$= U_I(t, t_0) : \quad | \Psi_I(t_0) \rangle$$

: op de evolução temporal pr a versão de interacção

notar:

$$\frac{i\hbar}{dt} dU_I = \frac{i\hbar}{dt} dU_0^t(t, 0) U(t, t_0) U_0^t(t_0, 0) + U_0^t(t, 0) \left( \frac{i\hbar}{dt} dU \right) U_0^t(t_0, 0)$$

$$= -U_0^t(t, 0) H_0(t) \quad = H(t) U(t, t_0)$$

$$i \hbar \frac{dU_I}{dt} = U_0^+(t, 0) (1 - U_0(t, 0)) U_I(t, t_0) U_0(t_0, 0)$$

↑

$$U_0(t, 0), U_0^+(t, 0)$$

$$\Rightarrow i \hbar \frac{dU_I(t, t_0)}{dt} = V_I(t) U_I(t, t_0)$$

eq. de movimento (47.1)

$$\text{C.I. : } U_I(t_0, t_0) = 1 \quad \text{op. } U_I(t, t_0)$$

dada a similaridade c/ Eq. (43.1), temos que

$$U_I(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U_I(t', t_0) \quad (47.2)$$

e propriedades  $U_S$  = propriedades  $U^+$ 

similar Eq. (44.1), temos que

$$U_I(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_2) V_I(t_2) +$$

$$+ \dots + (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_3) V_I(t_2) \dots V_I(t_n) + \dots$$

$$\equiv 1 + \sum_{n \geq 1} U_I^{(n)}(t, t_0) \quad (47.3)$$

Eq. (46.3)

$$\Downarrow U_0^+(t, 0) U_I(t, t_0) U_0(t_0, 0)$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = U_0(t, 0) U_0^+(t_0, 0) + \sum_{n \geq 1} U_0(t, 0) U_I^{(n)}(t, t_0) U_0^+(t_0, 0)$$

$$U_0(0, t_0)$$

$$U^{(n)}(t, t_0)$$

$$U_0(t, t_0)$$

(47.4)

notam:

$$U^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n U_0(t, 0) V_1(t_1) \dots V_n(t_n) U_0^*(t_0, 0)$$

(I)

$$(I) = U_0(t, 0) U_0^*(t_1, 0) V_1(t_1) U_0(t_2, 0) U_0^*(t_2, 0) V_2(t_2) U_0(t_3, 0) + \dots$$

 $U_0(0, t_1)$  $U_0(0, t_2)$  $= U_0(t, t_1)$  $= U_0(t_1, t_2)$ 

$$+ \dots + U_0(t_{n-1}, 0) U_0^*(t_n, 0) V(t_n) U_0(t_n, 0) U_0^*(t_0, 0)$$

 $U_0(0, t_n)$  $U_0(0, t_0)$  $U_0(t_{n-1}, t_n)$  $U_0(t_n, t_0)$ 

$$\hookrightarrow U^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n U_0(t, t_1) V(t_1) U_0(t_1, t_2) V(t_2) +$$

$$+ \dots + U_0(t_{n-1}, t_n) V(t_n) U_0(t_n, t_0) \quad (48.1)$$

Eq. (47.4) : expansão do op. de evolução temporal  $U(t, t_0)$

em tempos  $V(t)$  !

Método perturbativo.

consideram que o hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (48.2)$$

onde  $H_0 \neq H_0(t)$  é problema de autovalores determinado

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad \text{④ hipótese: espectro discreto}$$

nesse caso, temos que

$$\text{Eq. (46.2)} : U_0(t, t_0) = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}$$

(49.1)

$\hbar\omega_{kn} = E_k^o - E_n^o$  : frequência de Bohr ~ transição  $|n\rangle \rightarrow |k\rangle$

$V_{kn}(t) = \langle k|V(t)|n\rangle$  : elemento de matriz ~ op.  $V(t)$   
na representação de autoestados de  $H_0$ .

consideram:  $|\psi(t_0)\rangle = |a\rangle$  : estado inicial sistema =

autoestado de  $H_0$ , i.e.,

" sistema não-perturbado "

↳ Q. : Qual a probabilidade uma medida realizada em  $t > t_0$   
encontrar sistema no autoestado de  $H_0$   $|b\rangle \neq |a\rangle$  ?

A. :

$$W_{a \rightarrow b} = |\langle b|U(t, t_0)|a\rangle|^2$$

(49.2)

: probabilidade transição autoestado de  $H_0$   $|a\rangle$

$p_1$  " " " " $|b\rangle$  !

ideia: determinar uma série perturbativa p/  $W_{a \rightarrow b}$  !

Eq. (47.4) :

$$\langle b|U(t, t_0)|a\rangle = \langle b|U_0(t, t_0)|a\rangle + \underbrace{\sum_{n \geq 1} \langle b|U^{(n)}(t, t_0)|a\rangle}_{= 0} :$$

(49.3)

: expansão do elemento de matriz  $\langle b|U(t, t_0)|a\rangle$   
em termo  $V(t)$

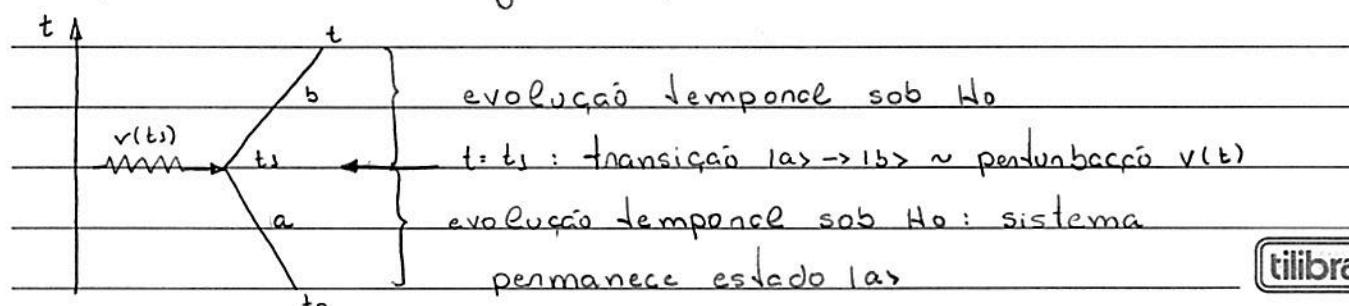
notas:

$$\begin{aligned} \langle b | U^{(1)}(t, t_0) | a \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle b | U_0(t, t_1) V(t_1) U_0(t_1, t_0) | a \rangle \\ &\quad e^{-i E_b^0 (t - t_1)/\hbar} \langle b | V(t_1) | a \rangle e^{-i E_a^0 (t_1 - t_0)/\hbar} \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-i(E_b^0 t - E_a^0 t_0)} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_b^0 - E_a^0)t_1/\hbar} \sqrt{b_a(t_1)} \\ &\quad e^{i\omega_{ba} t_1} \sqrt{b_a(t_1)} \end{aligned} \quad (50.1)$$

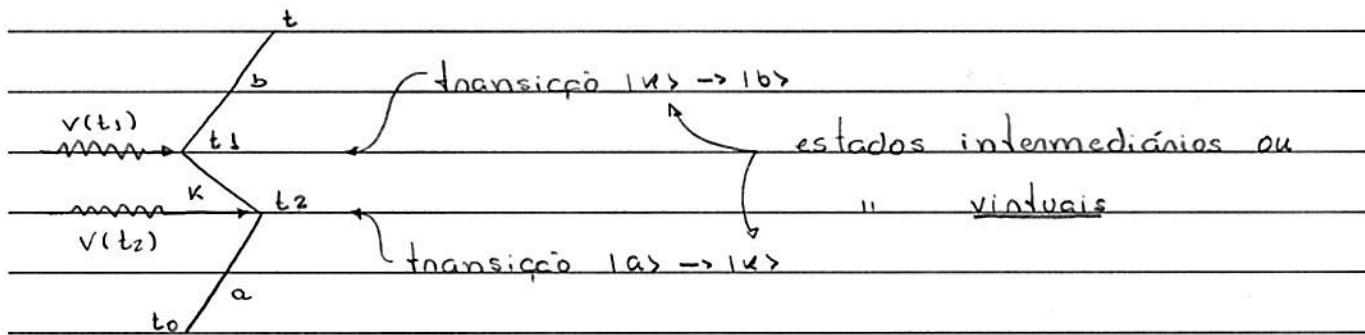
$$\begin{aligned} \langle b | U^{(2)}(t, t_0) | a \rangle &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 + \\ &+ \langle b | U_0(t, t_1) V(t_1) U_0(t_1, t_2) V(t_2) U_0(t_2, t_0) | a \rangle \\ &\quad \uparrow \\ &\quad J = \sum_k |k\rangle \langle k| \\ &\quad e^{-i E_b^0 (t - t_1)/\hbar} \langle b | V(t_1) | k \rangle e^{-i E_k^0 (t_1 - t_2)/\hbar} \langle k | V(t_2) | a \rangle e^{-i E_a^0 (t_2 - t_0)/\hbar} \\ &\quad \sqrt{b_k(t_1)} \quad \sqrt{a_k(t_2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{-i E_b^0 (t - t_1)} \sqrt{b_k(t_1)} e^{-i E_k^0 (t_1 - t_2)/\hbar} + \\ &+ \sqrt{a_k(t_2)} e^{-i E_a^0 (t_2 - t_0)/\hbar} \end{aligned} \quad (50.2)$$

esquematicamente, integrando Eq. (50.1):



similar, integrando Eq. (50.2) :



notar Eq. (50.2) : soma sob estados virtuais : podemos afirmar que em 2<sup>ª</sup> ordem, a transição entre estados não-perturbados  $|a\rangle$  e  $|b\rangle$  ocorre via estados virtuais !

Eqs. (49.2) e (49.3) :

$$\omega_{a \rightarrow b} \approx |\langle b | U^{(1)} | a \rangle + \langle b | U^{(2)} | a \rangle + \dots + \langle b | U^{(n)} | a \rangle|^2 :$$

(51.1)

: probabilidade de transição 1<sup>ª</sup> ordem

em particular:

$$\omega_{a \rightarrow b} \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_b t'} \langle b | a(t') \right|^2 : \text{probabilidade de transição em 1<sup>ª</sup> ordem}$$

(51.2)

notar Eq. (51.2) :  $\omega_{a \rightarrow b} \approx \omega_{b \rightarrow a}$  : cuidado : relação válida somente em 1<sup>ª</sup> ordem !

próxima etapa: discussão aplicações Eq. (51.2)

L

Ex. 1: Regne de onda de Fermi,

consideran: perturbació  $v \neq v(t)$  e  $t_0 = 0$  : notan escolha  $t_0$ !

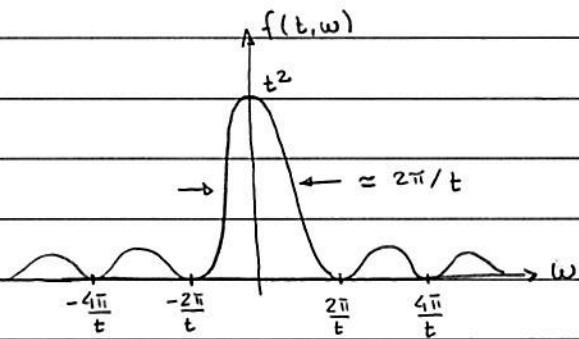
$$\text{Eq. (51.2)}: W_{a \rightarrow b} \approx \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{ba} t'} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba}) \quad (52.1)$$

como  $\int_0^t dt' e^{i\omega t'} = \frac{1}{i\omega} (e^{i\omega t} - 1)$

$$\hookrightarrow f(t, \omega) = \frac{2}{\omega^2} (1 - \cos \omega t) \quad (52.2)$$

propriedades  $f(t, \omega)$

(1) p/  $t$  - fixo :



$$(2) \lim_{\omega \rightarrow 0} f(t, \omega) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{2}{\omega^2} \left( 1 - \left( 1 - \frac{1}{2} \omega^2 t^2 + \dots \right) \right) = t^2$$

$$(3) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(t, \omega) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{(1 - \cos \omega t)}{\omega^2} = 2\pi t$$

↑ veja pg. 477, Anfiken!

$$(4) \text{ como } \delta(x - x_0) = \frac{1}{\pi} \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1 - \cos(x - x_0)t}{t(x - x_0)^2}$$

(52.3)

$$\hookrightarrow f(t, \omega) = 2\pi t \frac{1}{\pi} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2 t} \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 2\pi t \delta(\omega)$$

Dessa forma, Eq. (52.1) :

$$\frac{W_{a \rightarrow b}}{\hbar^2} = \frac{2}{\omega_{ba}^2} |V_{ba}|^2 (1 - \cos \omega_{ba} t) : \text{probabilidade de transição } a \rightarrow b \text{ em } 1^{\text{a}} \text{ ordem} \quad (53.1)$$

consideram instante da medida  $t$  - fixo;

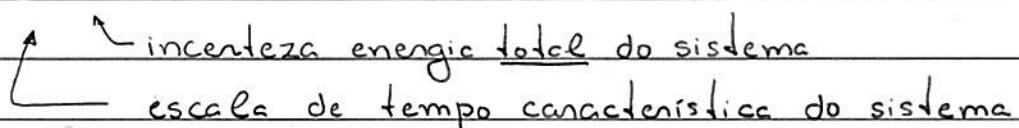
dadas as propriedades de  $f(t, \omega) \rightarrow$  transições mais prováveis são p/ estados  $|b\rangle$  tais que  $\omega_{ba} \approx 0$  ou

$$\Delta E_0 = |E_b - E_a| \approx \frac{2\pi\hbar}{t} : \text{largura pico principal de } f(t, \omega_{ba}) \quad (53.2)$$

nesse caso, podemos afirmar que as transições  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  mais prováveis conservam a energia do sistema não perturbado c/ incerteza  $\Delta E_0 = 2\pi\hbar/t$ !

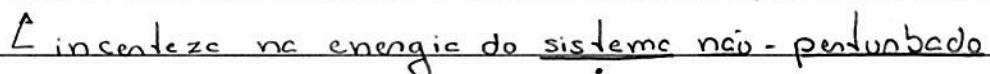
notam similaridade condição (53.2) c/ a relação de incerteza tempo-energia, entendendo

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



incerteza energética total do sistema  
escala de tempo característica do sistema

$$\Delta E_0 \approx 2\pi\hbar/t \sim \text{instante de realização da medida!}$$



incerteza na energia do sistema não-perturbado

notam Eq. (53.1) p/  $\omega$ -fixo:  $W_{a \rightarrow b}$  é uma função oscilatória do tempo, período  $T = \frac{2\pi}{\omega_{ba}}$

hipótese: espectro hamiltoniano não-perturbado  $\hat{H}_0$   
 possui regiões discontínuas e contínuas;

estados  $|a\rangle \sim$  regiões discontínuas do espectro  $\hat{H}_0$

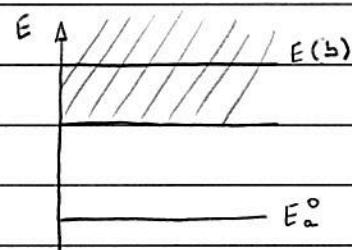
estados  $|b\rangle \sim$  " continua " " : autovalores  $E(b)$

ideia: consideram transição

estados  $|a\rangle$  p/ grupo

de estados  $|b\rangle$  c/

energias  $\approx$  iguais



consideram:  $\langle b|b'\rangle = \frac{1}{n(b)} \delta(b-b')$ ;  $n(b) \in \mathbb{R}$ : normalização

(54.1)

$P_{Ab} = \int_{\Delta b} db n(b) |b\rangle \langle b|$  : projetor associado ao conjunto de estados  $|b\rangle$  e conjunto  $\Delta b$ .

como energia  $E = E(b)$ , podemos definir:

$$\frac{dE}{db} = \frac{n(b)}{\rho_b(E)} \quad \text{ou} \quad \rho_b(E) = n(b) \frac{db}{dE} : \text{densidade de estados} :$$

(54.2)

: número de estados  $|b\rangle$  c/ energia entre  $E$  e  $E+dE$ .

o projetor  $P_{Ab}$  pode ser escrito como

$$P_{Ab} = \int_{\Delta E} dE \rho_b(E) |b\rangle \langle b| : \text{notar soma cm energia!} \quad (54.3)$$

próxima etapa: determinar probabilidade de transição  $W_{a \rightarrow Ab}$ ;

Eq. (49.2) pode ser escrita como,

$$\langle W_{a \rightarrow b} \rangle = \langle a | U^*(t, 0) | b \rangle \underbrace{\langle b | U(t, 0) | a \rangle}_{P_b}$$

$$\hookrightarrow \langle W_{a \rightarrow Ab} \rangle = \langle a | U^*(t, 0) P_{Ab} U(t, 0) | a \rangle$$

$$= \int_{\Delta E} dE P_b(E) \langle a | U^*(t, 0) | b \rangle \langle b | U(t, 0) | a \rangle$$

$$= \int_{\Delta E} dE P_b(E) |\langle b | U(t, 0) | a \rangle|^2 : \text{probabilidade de transição}$$

(55.1)

Eqs (53.1) e (55.1) :  $\langle W_{a \rightarrow Ab} \rangle$  em 3º ordem.

$$\langle W_{a \rightarrow Ab} \rangle \approx \frac{1}{\hbar^2} \int_{\Delta E} dE P_b(E) |V_{ba}|^2 f\left(t, \frac{E - E_a^0}{\hbar}\right) \quad (55.2)$$

Lembrem:  $V_{ba} = \langle b | V | a \rangle = V_{ba}(E)$ , pois  $E = E(b)$ !

Hipóteses:

(1)  $\Delta E$  = intervalo de energia ( $E_J - \epsilon/2$ ;  $E_J + \epsilon/2$ ) : energia conjunto de estados  $Ab$ ;

(2)  $\epsilon \ll J \rightarrow V_{ba} = V_{ba}(E) \in P_b \cdot P_b(E) \approx \text{cte}$  no intervalo de energia  $\Delta E$ ;

(3) instante de medida  $t \gg \frac{2\pi\hbar}{\epsilon}$  ou  $\epsilon \gg \frac{2\pi\hbar}{t}$ ;

:  $\Delta E$  contém vários períodos de oscilação  $f(t, \omega)$  ( $t$  - fixo)

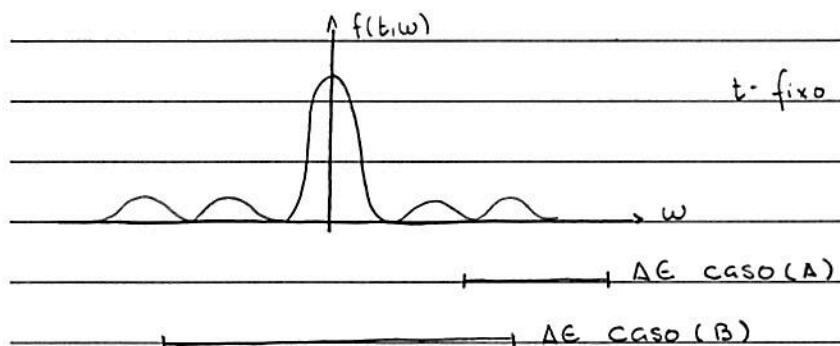
$$\hookrightarrow \text{Eq. (55.2)} : \langle W_{a \rightarrow Ab} \rangle \approx \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 P_b(E_J) \int_{\Delta E} dE f\left(t, \frac{E - E_a^0}{\hbar}\right) \quad (55.3)$$

consideram 2 casos:

(A) domínio de integração  $\Delta E$  não contém pico central  $f(t, \omega)$

(não há conservação da energia não-perturbada);

(B)  $\Delta E$  contém pico central  $f(t, \omega)$



$$(A) \int_{\Delta E} dE f\left(t, \frac{E - E_a^0}{\hbar}\right) \approx 2E \cdot \frac{\hbar^2}{(E_s - E_a^0)^2} : \text{valor médio } f(t, \omega) \text{ no intervalo } \Delta E$$

$\sim$  hipótese (3)

$$(B) \int_{\Delta E} dE f\left(t, \frac{E - E_a^0}{\hbar}\right) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} dE f\left(t, \frac{E - E_a^0}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar t$$

↑  
pois  $\Delta E$  contém  
pico central

Eq. (52.3)

Dessa forma,

(A)

$$W_{a \rightarrow b} \approx 2E P_b(E_s) |V_{ba}|^2 \frac{1}{(E_s - E_a^0)^2} : \text{independe - } \underline{t}$$

(56.1)

$$(B) W_{a \rightarrow b} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ba}(E_a^0)|^2 P_b(E_a^0) t : \text{depende - } \underline{t}$$

Definição:

$$\omega = \frac{dW_{a \rightarrow b}}{dt} : \text{probabilidade de transição / tempo} \quad (56.2)$$

temos que,

Caso (A):  $W_{a \rightarrow b} = 0$  (não há conservação da energia  
não-perturbada)

Caso (B):  $W_{a \rightarrow b} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ba}(E_a)|^2 P_b(E_a) :$  (57.1)

: Regra de ouro de Fermi

Obs. 1: Eq. (57.1) OK se instante medida  $t \gg 2\pi\hbar/E$  : condição (3)

$\Leftrightarrow W_{a \rightarrow b} t \ll 1$  : aproximação em 1ª ordem OK !

Obs. 2: alternativamente, Eq. (57.1) pode ser obtida via Eq. (52.3) :

$$\frac{f\left(\frac{E}{\hbar}, E - E_a^\circ\right)}{t} \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} \frac{2\pi\hbar t}{\hbar} \delta(E - E_a^\circ) \quad (57.2)$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \text{Eq. (55.2)}: W_{a \rightarrow b} &= \frac{2\pi t}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \rho_b(E) |V_{ba}(E)|^2 \delta(E - E_a^\circ) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \rho_b(E_a^\circ) |V_{ba}(E_a^\circ)|^2 t : \text{Eq. (56.1)} ! \end{aligned}$$

Obs. 3: Se  $E_a^\circ$  discreto  $\rightarrow \rho_b(E_a^\circ) = \delta(E_a^\circ - E_a^\circ) :$  Eq. (57.1) OK p/  $E_a^\circ$  discreto ou contínuo !

Ex. 2: perturbação periódica,

consideram:  $V(t)$  função periódica, frequência  $\omega$  ;  
em particular:

$$V(t) = V_0 e^{i\omega t} + V_0^+ e^{-i\omega t} ; V_0 \neq V_0(t) \quad (57.3)$$

neste caso, a probabilidade de transição em 1ª ordem  
é dada por, Eq. (51.2)  $\oplus t_0 = 0$  (notar escolha  $t_0$ ):

$$W_{a \rightarrow b} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} + \omega)t'} \langle b | V_0 | a \rangle + \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} - \omega)t'} \langle b | V_0^\dagger | a \rangle \right|^2$$

(I)                          (II)                          (58.1)

considernan  $t \gg \frac{\hbar}{\omega}$ ;

notam:

$$(I) \neq 0 \text{ se } \omega_{ba} + \omega \approx 0 \quad \text{ou} \quad (E_a^0 - \hbar\omega) - \frac{\pi\hbar}{t} \leq E_b^0 \leq (E_a^0 - \hbar\omega) + \frac{\pi\hbar}{t}$$

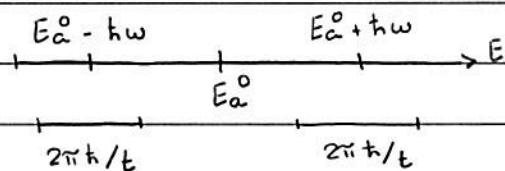
$$(II) \neq 0 \text{ se } \omega_{ba} - \omega \approx 0 \quad \text{ou} \quad (E_a^0 + \hbar\omega) - \frac{\pi\hbar}{t} \leq E_b^0 \leq (E_a^0 + \hbar\omega) + \frac{\pi\hbar}{t}$$

De facto, se  $t \gg \frac{2\pi\hbar}{\omega}$  ou  $\omega \gg \frac{2\pi\hbar}{t}$

↑  
Escala de tempo característica sistema

↳ não há sobreposição dos intervalos de energia  
definidos por  $\omega_{ba} + \omega \approx 0$  e  $\omega_{ba} - \omega \approx 0$ ;

esquematicamente:



considernan caso (I), i.e., freq. perturbação  $\omega \approx -\omega_{ba}$

$$\text{Eq. (58.1)} : W_{a \rightarrow b} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} + \omega)t'} \langle b | V_0 | a \rangle \right|^2$$

Eq. (52.1)

$$= \frac{1}{\hbar^2} |\langle b | V_0 | a \rangle|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)$$

Eq. (57.2)

$$\approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b | V_0 | a \rangle|^2 \delta(E_b - (E_a^0 - \hbar\omega)) t$$

de modo que a probabilidade de transição / tempo :

$$\omega_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b | v_0 | a \rangle|^2 \delta(E_b - (E_a^0 - \hbar\omega)) \quad (59.1)$$

Eq. (59.1): sistema não-perturbado emite energia  $= \hbar\omega$   
no processo de transição  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$

similar caso (II), freq. perturbacão  $\omega \approx +\omega_{ba}$

$$\omega_{a \rightarrow b} \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba}-\omega)t'} \langle b | v_0^\dagger | a \rangle \right|^2$$

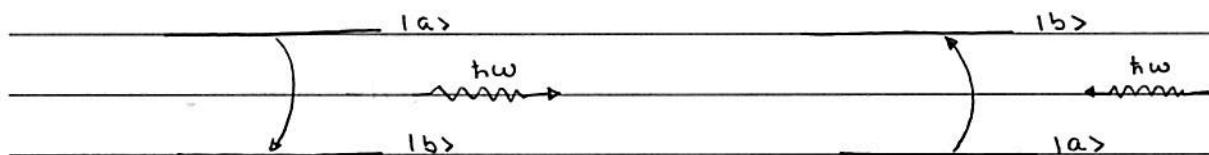
$$= \frac{1}{\hbar^2} |\langle b | v_0^\dagger | a \rangle|^2 f(t, \omega_{ba} - \omega)$$

$$\approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b | v_0^\dagger | a \rangle|^2 \delta(E_b^0 - (E_a^0 + \hbar\omega)) t$$

$$\Rightarrow \omega_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b | v_0^\dagger | a \rangle|^2 \delta(E_b^0 - (E_a^0 + \hbar\omega)) \quad (59.2)$$

Eq. (59.2): sistema não-perturbado absorve energia  $= \hbar\omega$   
no processo de transição  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$

esquematicamente:



(I) : emissão

(II) : absorção

· similar Ex. I, é possível generalizar a regra de  
ouro de Fermi; i.e., consideram transição estado  $|a\rangle$   
para conjunto estados  $|b\rangle$  c/ energias  $\approx$  iguais;  
consideram, e.g., o processo de emissão,

Eqs. (55.2) e (58.1),

$$W_{a \rightarrow b} \approx \frac{1}{\hbar^2} \int_{\Delta E} dE \rho_b(E) |<b|V_0|a>|^2 f\left(t, \frac{E - (E_a^0 - \hbar\omega)}{\hbar}\right)$$

$$\xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \frac{2\pi}{\hbar} \int_{\Delta E} dE \rho_b(E) |V_{0,b,a}|^2 \delta(E - (E_a^0 - \hbar\omega)) t$$

CASO (B)

$$\text{pg. 56} \quad \approx \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \rho_b(E) |V_{0,b,a}|^2 \delta(E - (E_a^0 - \hbar\omega)) t$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{0,b,a}(E_a^0 - \hbar\omega)|^2 \rho_b(E_a^0 - \hbar\omega) t$$

$$\hookrightarrow \omega = \frac{dW_{a \rightarrow b}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |<b|V_0|a>|^2 \rho_b(E_a^0 - \hbar\omega) \quad (60.1)$$

similar p/ processo de absorção:

$$\omega = \frac{dW_{a \rightarrow b}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |<b|V_0^+|a>|^2 \rho_b(E_a^0 + \hbar\omega) \quad (60.2)$$

Obs.: se  $E_b^0$ : discreto

$$\hookrightarrow \rho_b(E_a^0 - \hbar\omega) = \delta(E_b^0 - E_a^0 + \hbar\omega) : \text{emissão}$$

$$\text{notar: } E_b^0 - E_a^0 + \hbar\omega = 0 \rightarrow E_a^0 - E_b^0 + \hbar\omega > 0$$

$$\hookrightarrow \rho_b(E_a^0 + \hbar\omega) = \delta(E_b^0 - E_a^0 - \hbar\omega) : \text{absorção}$$

$$\text{notar: } E_b^0 - E_a^0 - \hbar\omega = 0 \rightarrow E_b^0 - E_a^0 - \hbar\omega > 0$$

↳

Ex. 3: Átomo sob campo EM.

consideram: átomo  $e^-$  + campo EM externo.

ideia: determinar seção de choque  $\rho$

processo de absorção de radiação pelo átomo.

Lembra: hamiltoniano partícula carregada  $q = -e$  ( $e > 0$ )

sob campo EM,

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - e\phi \quad (61.1)$$

onde potenciais vetor  $\vec{A} = \vec{A}(\vec{r}, t)$  e escalar  $\phi = \phi(\vec{r}, t)$ .

Eq. (61.1) na representação de coordenadas (verifiquem):

$$H = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} - e\phi + \frac{e \vec{A} \cdot (-i\hbar \vec{v})}{mc} - i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{e^2 A^2}{2mc^2} \quad (61.2)$$

Hipóteses (1): termo (diagnético)  $\frac{e^2 A^2}{2mc^2} \ll 1$ : "perturbação fraca";

$$\phi_{ext} = 0.$$

consideram: gauge de Coulomb (radiação):  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

Dessa forma, o hamiltoniano do sistema átomo  $e^-$  + campo EM externo pode ser escrito como:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{H_0} + V_0 + \underbrace{\frac{e \vec{A} \cdot \vec{p}}{mc}}_{\text{perturbação: interação eletron-campo EM externo.}} \quad (61.3)$$

$V_0(\vec{r}, t)$ : perturbação: interação eletron-campo EM externo.

onde:  $V_0$ : inclui todas as interações exceto a interação eletron-campo EM externo.

notar: se  $H_0$ : hamiltoniano oscilador harmônico 1-D

↳ Eq. (61.3): " " " fórmula

(veja Sec. 16.6, Henzbach em soluções exatas)

Hipótese (2): radiação incidente = pacote ondas planas

$$\vec{A}(\vec{n}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \vec{A}(\omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{n} - \omega t)} \quad (62.1)$$

onde  $\vec{k} = k \hat{n}$  e  $\omega = ck$ ;  $\hat{n}$ : direção de propagação

Eq. (62.1) pode ser escrita como:

$$\vec{A}(\vec{n}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \vec{A}(\omega) e^{i\omega(\hat{n} \cdot \vec{n}/c - t)}$$

• como  $\vec{A} \in \mathbb{R} \rightarrow \vec{A}(\omega) = \vec{A}^*(-\omega)$ , pois

$$\vec{A}^*(\vec{n}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \vec{A}^*(\omega) e^{-i\omega(\hat{n} \cdot \vec{n}/c - t)} = \int_{\omega \rightarrow -\omega}^{+\infty} d\omega \vec{A}^*(-\omega) e^{i\omega(\hat{n} \cdot \vec{n}/c - t)} \quad (62.2)$$

• como  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \rightarrow \hat{n} \cdot \vec{A}(\omega) = 0$ , pois

$$\partial_i A_j = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A_j(\omega) \frac{i\omega}{c} n_i e^{i\omega(\hat{n} \cdot \vec{n}/c - t)}$$

$$\hookrightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{i\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{A}(\omega) e^{i\omega(\hat{n} \cdot \vec{n}/c - t)} \quad (62.3)$$

↳ perturbação  $V(\vec{n}, t)$  assume a forma

$$V(\vec{n}, t) = \frac{e}{mc} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega(\hat{n} \cdot \vec{n}/c - t)} \vec{A}(\omega) \cdot \vec{p} \quad (62.4)$$

próxima etapa: determinar a probabilidade de transição entre estados  $|a\rangle$  e  $|b\rangle$  do sistema não-perturbado.

$H_0$  (átomo)

Eq. (51.2):

$$W_{a \rightarrow b} \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e}{mc} \int_{t_0}^t dt' \int_{-\infty}^{+\infty} dw \langle b | e^{i\omega(\hat{n} \cdot \hat{r}/c - t')} \vec{A}(w) \cdot \vec{p} | b \rangle e^{i\omega_b a t'} \right|^2 : \quad (I) \quad (63.1)$$

: probabilidade de transição em 1ª ordem,

OK p/ campo EM. externo "físico":

hipótese (3):  $\vec{A}(\hat{n}, t) \neq 0$  p/  $-T \leq t \leq +T$  : "Localizado no tempo"

↳ podemos considerar  $t_0 \rightarrow -\infty$  e  $t \rightarrow +\infty$

(notar escolha  $t_0$ , ≠ caso  $v(t) = v = c/e$ )

notar:

$$(I) = \int_{-\infty}^{+\infty} dw \vec{A}(w) \cdot \langle b | e^{i\omega \hat{n} \cdot \hat{r}/c} \vec{p} | a \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i(w_{ba} - w)t'} \quad 2\pi \delta(w_{ba} - w)$$

$$= 2\pi \vec{A}(w_{ba}) \cdot \langle b | e^{i w_{ba} \hat{n} \cdot \hat{r}/c} \vec{p} | a \rangle$$

$$\hookrightarrow W_{a \rightarrow b} = \left( \frac{2\pi e}{\hbar mc} \right)^2 |\vec{A}(w_{ba}) \cdot \langle b | e^{i w_{ba} \hat{n} \cdot \hat{r}/c} \vec{p} | a \rangle|^2 \quad (63.2)$$

notar Eq. (63.2): processo de absorção de radiação átomo

(em 1ª ordem da teoria de perturbação) depende apenas componente de Fournier  $\vec{A}(w_{ba})$  da radiação incidente, i.e., componente associada à frequência de Bohr  $w_{ba}$ !

notar: campo EM externo: tratamento clássico;

Cap. 21: quantização campo EM.

se radiação incidente linearmente polarizada:  $\vec{A}(\omega) = A(\omega)\hat{e}$ .

$$\hookrightarrow \text{Eq. (63.2)}: W_{a \rightarrow b} \approx \left( \frac{2\pi e}{\hbar mc} \right)^2 |A(\omega_{ba})|^2 |\langle b | e^{i\omega_{ba}\hat{n} \cdot \vec{r}/c} \vec{p} \cdot \hat{e} | a \rangle|^2 \quad (64.1)$$

próxima etapa: relação entre  $W_{a \rightarrow b}$  e a intensidade da radiação incidente;

Lembrem: vetor de Poynting (sistema gaussiano)

$$\vec{s} = c \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{4\pi} \quad (64.2)$$

$\vec{s}$ : densidade de fluxo de energia;

[s]: energia / área · tempo

: nota-se similaridade densidade de fluxo elétrica:

[J] carga elétrica / área · tempo

$$\text{como } \vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\partial_t \vec{A} \quad \text{e} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\hookrightarrow \vec{s} = -c \frac{1}{c} \partial_t \vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A})$$

$$\begin{aligned} \text{Eq. (62.1)} &\Rightarrow -i \frac{1}{4\pi c} \int d\omega d\omega' \omega \omega' A(\omega) A(\omega') \hat{e} \times (\hat{n} \times \hat{e}) \exp(i(\omega + \omega')(\frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c} - t)) \\ &\quad \hat{n} - \hat{e}(\hat{e} \cdot \hat{n}) = \hat{n} \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \vec{s}(\hat{n}, t) = -i \frac{1}{4\pi c} \hat{n} \int d\omega d\omega' \omega \omega' A(\omega) A(\omega') \exp(i(\omega + \omega')(\frac{\hat{n} \cdot \vec{r}}{c} - t)) \quad (64.3)$$

Obs.: como  $\vec{A}(\hat{n}, t) \in \mathbb{R} \rightarrow$  podemos utilizar (64.2);  
não é necessário considerar a média temporal.

notar:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \vec{S}(\vec{n}, t) \cdot \hat{n} = -\frac{1}{4\pi c} \int d\omega d\omega' \omega \omega' A(\omega) A(\omega') e^{i(\omega+\omega') \hat{n} \cdot \vec{n}/c} *$$

$$+ \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+\omega')t}}_{2\pi \delta(\omega+\omega')}$$

$$= \frac{1}{2c} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \underbrace{\omega^2 A(\omega) A(-\omega)}_{A^*(\omega)} = \int_0^{\infty} d\omega \underbrace{\frac{1}{c} \omega^2 |A(\omega)|^2}_{\equiv S(\omega)}$$
(65.1)

como [S]: energia  
área · tempo       $\rightarrow [S(\omega)]$ : energia  
área · frequência

Eqs. (64.1) e (65.1):

$$W_{a \rightarrow b} \approx \left( \frac{2\pi e}{hmc} \right)^2 \frac{c}{\omega_{ba}^2} S(\omega_{ba}) | \langle b | e^{i\omega_{ba}\hat{n} \cdot \vec{n}/c} \hat{p} \cdot \hat{e} | a \rangle |^2 :$$

(65.2)

: relação entre  $W_{a \rightarrow b}$  e a energia/área · frequência da radiação incidente.

como a absorção de energia pelo átomo ocorre apenas

$$p/ \omega = \omega_{ba}$$

$\hookrightarrow h\omega_{ba} W_{a \rightarrow b}$ : valor médio da energia absorvida      (65.3)

Definição: seção de choque de absorção  $\sigma(\omega)$ ,

$\sigma(\omega)$ : área  $\hbar$  direção de propagação radiação incidente.  
tal que a energia através  $\sigma(\omega)$  = energia absorvida  
pelo átomo;

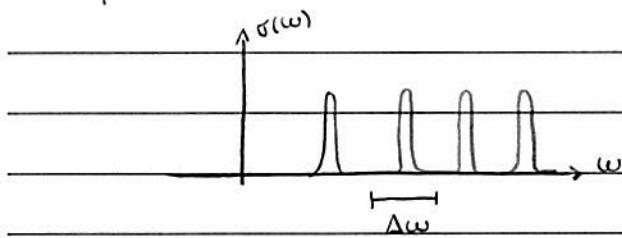
como  $[S(\omega)]$  = energia / área · frequência

↳  $\int \sigma(\omega) S(\omega) d\omega$  : energia absorvida pelo átomo no intervalo  
de frequência  $\omega - \omega + d\omega$ . (66.1)

Vamos considerar 2 casos:

· caso (i) : estados  $1a >$  e  $1b >$  ~ níveis de energia discretos;  
como a absorção ocorre apenas p/  $\omega \approx \omega_{ba}$

↳  $\sigma(\omega)$  : picos estreitos em torno de frequências de Bohr  $\omega_{ba}$ ;  
esquematicamente:



podemos escrever,

$$\int_{\Delta\omega} \sigma(\omega) S(\omega) d\omega = \hbar \omega_{ba} \nu_{a \rightarrow b} \quad (66.2)$$

↑ intervalo em torno de uma única freq. de Bohr  $\omega_{ba}$   
(veja figura)

se  $S(\omega)$  apresenta variação lenta

$$\int_{\Delta\omega} \sigma(\omega) S(\omega) d\omega \approx S(\omega_{ba}) \int_{\Delta\omega} d\omega \sigma(\omega)$$

Dessa forma,

$$\int_{\Delta\omega} d\omega \sigma(\omega) = \left(\frac{2\pi e}{\hbar mc}\right)^2 \frac{\hbar c}{\omega_{ba}} |\langle b_1 | e^{i\omega_{ba}\hat{n} \cdot \vec{r}/c} \vec{p} \cdot \hat{e} | a \rangle|^2$$

(67.1)

: Seção de choque de absorção integrada

consideram: átomo localizado na origem sistema de coordenadas

se  $\lambda = 2\pi c / \omega_{ba}$  : comprimento de onda  $\gg$  raio atômico  
radiação incidente

$$\hookrightarrow \lambda = 2\pi c \gg r \rightarrow \frac{\omega_{ba} r}{c} \ll 2\pi$$

$$\hookrightarrow \langle b_1 | e^{i\omega_{ba}\hat{n} \cdot \vec{r}/c} \vec{p} \cdot \hat{e} | a \rangle \approx \langle b_1 | \vec{p} \cdot \hat{e} | a \rangle + i\omega_{ba} \langle b_1 | \hat{n} \cdot \vec{r} \vec{p} \cdot \hat{e} | a \rangle +$$

+ ...

se  $\langle b_1 | \vec{p} \cdot \hat{e} | a \rangle \neq 0 \rightarrow$  transição entre níveis de energia  
 $E_a^o$  e  $E_b^o$  é do tipo dipolo elétrico!

$$\text{se } H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0; [V_0, \vec{r}] = 0$$

$$\hookrightarrow [\vec{r}, H_0] = \vec{r} H_0 - H_0 \vec{r} = [\vec{r}, p^2/2m] = i\hbar \vec{p}/m$$

$$\hookrightarrow \langle b_1 | [\vec{r}, H_0] | a \rangle = (E_a^o - E_b^o) \langle b_1 | \vec{r} | a \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle b_1 | \vec{p} | a \rangle$$

$$= -\hbar \omega_{ba}$$

$$\hookrightarrow \langle b_1 | \vec{p} | a \rangle = i m \omega_{ba} \langle b_1 | \vec{r} | a \rangle$$

Nesse caso, a seção de choque integrada (67.1) assume a forma:

$$\int_{\Delta\omega} d\omega \sigma(\omega) \approx \left(\frac{2\pi e}{\hbar c}\right)^2 \hbar \omega_{ba} c |\langle b_1 | \vec{r} \cdot \hat{e} | a \rangle|^2$$

(67.2)

Obs.: pt detalhes cálculo da seção de choque de absórcão,  
veja Sec. 16.5, Henzbacher.

notar: integrando Eq. (67.2) sob frequência, temos que

$$\int_0^\infty d\omega \sigma(\omega) \approx \left(\frac{2\pi e}{hc}\right)^2 \sum_b h \omega_b c |<b|\vec{n} \cdot \hat{e}_1 a>|^2$$

hipótese:  $\hat{e} = \hat{x}$ ;

se  $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ , verifica-se que (veja Eq. (72.1) abaixo):

$$\sum_k \frac{2m}{\hbar} \omega_k s |<k| \times |s>|^2 = Z : \text{negc da soma de}$$

Thomas - Reiche - Kuhn

onde  $Z$ : número eletrôns do sistema.

pt  $Z=3$ , temos que:

$$\int_0^\infty d\omega \sigma(\omega) \approx \frac{2\pi^2 e^2}{mc} : \text{independente } \frac{\hbar}{\epsilon}$$

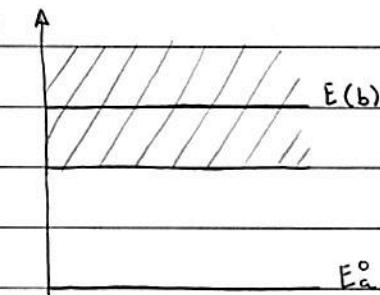
e detalhes  $H_0$ !

Obs.: pt detalhes problema clássico equivalente,  
veja P. 16.53, Jackson.

Obs.: pt detalhes cálculo da seção do choque de absorção.  
Veja Sec. 36.3, Menzschau.

• caso (ii): estado inicial  $|a\rangle \sim$  nível de energia discreto;  
" final  $|b\rangle \sim$  " " " contínuo.

Lembra Fig. pg. 54:



Ex: Efeito fotoelétrico: absorção radiação átomo  
+ emissão e-

nesse caso,  $\sigma = \sigma(\omega)$ : função suave

↳ Eq. (66.2) assume a forma:

$$\int \sigma(\omega) S(\omega) d\omega = \sum_b h\omega \rho_b \delta_{a \rightarrow b} \quad \text{densidade de estados.}$$

$$= \int dE \rho_b(E) E W(E) : \text{Lembra Eq. (55.1)}$$

$$E = \hbar\omega \rightarrow dE = \hbar d\omega$$

$$= \int d\omega \hbar \rho(\omega) \hbar \omega W(\omega) \quad (67.2)$$

$$\hookrightarrow d\sigma(\omega) S(\omega) = \hbar \rho(\omega) \hbar \omega W(\omega)$$

$$= \hbar \rho(\omega) \hbar \omega \left( \frac{2\pi e}{\hbar m c} \right)^2 \frac{c}{\omega^2} \cdot S(\omega) \cdot |\langle b | e^{i\omega \hat{r} \cdot \vec{p}} | a \rangle|^2$$

$$\frac{4\pi^2}{m^2} \frac{1}{\omega} \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{4\pi^2 \alpha}{m^2 \omega} \quad (67.3)$$

consideram:  $|1s\rangle = |1s\rangle$

$$\hookrightarrow \langle \vec{n} | 1s \rangle = \psi_{1s}(\vec{n}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zn/a}$$

$|1s\rangle = |\vec{k}\rangle$ : onda plana ~ partícula livre "na caixa"

(67.4)

$$\hookrightarrow \langle \vec{n} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}}$$

$$\stackrel{e}{=} \rho(E) = \frac{d\Omega}{4\pi} \cdot \frac{m^{3/2} L^3 E^{1/2}}{\sqrt{2} \hbar^3 \pi^2} : \text{densidade de estados (finais)}$$

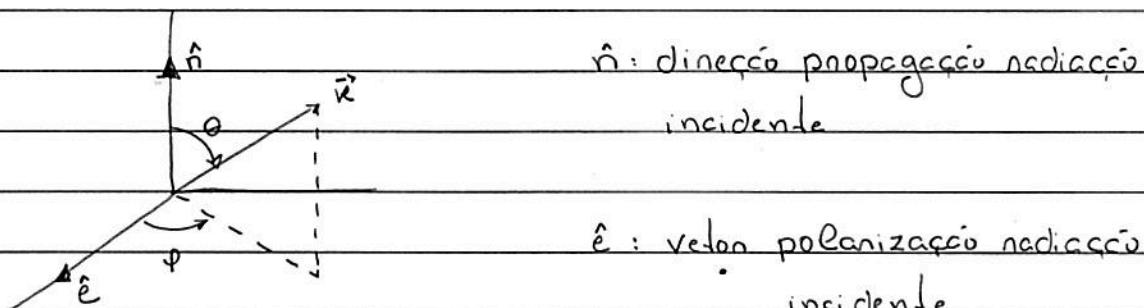
(veja abaixo)

$\hookrightarrow$  Eqs. (67.3)  $\oplus$  (67.4) :

$$\frac{d\sigma(\omega)}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 \omega}{m^2 \omega} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{m^{3/2} L^3}{\sqrt{2} \hbar^3 \pi^2} \left( \frac{\hbar \omega}{2m} \right)^{1/2} \left| \langle \vec{e} | e^{i\omega \hat{n} \cdot \vec{n}/c} \vec{p} \cdot \hat{e} | 1s \rangle \right|^2$$

$$= \frac{e^2 \omega}{2m \hbar^2 c \omega} \cdot \frac{L^3}{\pi} \quad (I)$$

: seção de choque diferencial efecto fotoeléctrico ~ ~ emissão elétron momento hz c angulo sólido dr



(Fig. 5.32, Sakurai)

$$\text{notar: (I)} = \left( \frac{Z}{a L \pi^{1/3}} \right)^{3/2} \int d\Omega e^{-i \vec{k} \cdot \vec{n}} e^{i \omega \hat{n} \cdot \vec{n}/c} (-i\hbar) \hat{e} \cdot \vec{v} e^{-Zn/a}$$

$$(I) = \left( \frac{Z}{a \pi^{1/3}} \right)^{3/2} (+i\hbar) \int d^3 n \hat{e} \cdot \vec{v} \left( e^{-i(\vec{v} - \omega \hat{n}/c) \cdot \vec{n}} \right) e^{-zn/a}$$

$$(-i) \hat{e} \cdot (\vec{v} - \omega \hat{n}) e^{-i(\vec{v} - \omega \hat{n}/c) \cdot \vec{n}}$$

$\hat{e} \cdot \vec{v}$ , pois  $\hat{e} \cdot \hat{n} = 0$ .

$$\cdot h \hat{e} \cdot \vec{v} \int d^3 n \exp \left( -i(\vec{v} - \omega \hat{n}) \cdot \vec{n} - \frac{zn}{a} \right)$$

$$\text{verificam} \curvearrowleft = \frac{8\pi Z}{a} \left( \frac{z^2}{a^2} + q^2 \right)^{-1/2}; \quad \vec{q} = \vec{v} - \omega \hat{n}$$

Dessa forma:

$$\frac{d\sigma(\omega)}{d\Omega} = \frac{32e^2 \kappa}{mc\omega} (\hat{e} \cdot \vec{v})^2 \frac{Z^5}{a^5} \left( \frac{z^2}{a^2} + q^2 \right)^{-4} \quad (67.5)$$

sobre a normalização onda plana, Eq. (67.4)

(p<sub>1</sub> detalhes, veja Sec. 4.4, Henzbachen)

Lembrem:

$$\langle \vec{n} | \vec{p} \rangle = \psi_{\vec{p}}(\vec{n}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{n}/\hbar}; \quad \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\text{se } \vec{p} = \hbar \vec{v}$$

$$\hookrightarrow \langle \vec{n} | \vec{v} \rangle = \psi_{\vec{v}}(\vec{n}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{v} \cdot \vec{n}}; \quad \langle \vec{v} | \vec{v}' \rangle = \delta(\vec{v} - \vec{v}')$$

: normalização -  $\kappa$  (67.6)

autovalores:  $E\kappa = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$  : contínuo;  $-\infty \leq \kappa_x, \kappa_y, \kappa_z \leq +\infty$

alternativa: partícula livre "na caixa"

caixa = cubo anesta L → condições periódicas de contorno (c.p.c.)

$$\hookrightarrow \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} ; \quad \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = S_{\vec{r}, \vec{r}'} \quad (67.7)$$

$$\text{c.p.c. : } \hat{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r} + L\hat{x}) = \hat{\psi}_{\vec{k}} = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot (\vec{r} + L\hat{x})} = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\hookrightarrow k_x L = 2\pi n_x ; \quad n_x \in \mathbb{Z} ; \quad \text{similarly } k_y \text{ e } k_z ;$$

$$\hookrightarrow \text{autovalores : } E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) : \text{discreto.}$$

• relação entre descrições discrete e continua:

$$\frac{1}{L^3} \int_{\vec{k}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} ; \quad L \rightarrow 2\pi \quad : \text{veja Eq. (4.57), Herzbachen}$$

• sobre a densidade de estados,

$$\int_{\vec{k}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} L^3 \rightarrow \int dE p(E)$$

$$\text{com } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk \rightarrow dk = m \frac{dE}{\hbar^2 k}$$

$$\therefore k = \sqrt{2mE / \hbar}$$

$$\hookrightarrow \frac{d^3 k L^3}{(2\pi)^3} = d\Omega k^2 dk \frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{d\Omega}{4\pi} \cdot \frac{4\pi}{8\pi^3} \frac{L^3 \cdot m}{\hbar^2} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} dE$$

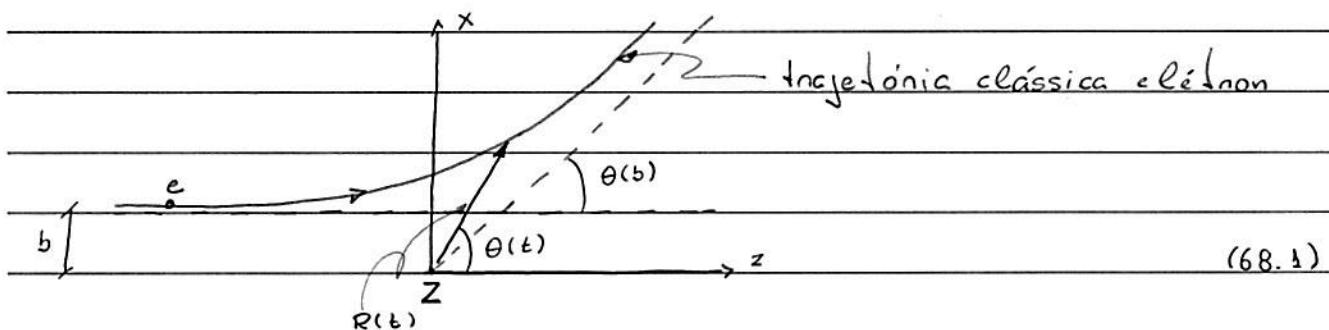
$$= \frac{d\Omega}{4\pi} \cdot \frac{m^{3/2} L^3}{\sqrt{2} \hbar^3 \pi^2} \sqrt{E} dE \quad (67.8)$$

$p(E)$

Ex. 4: Excitação coulombiana.

consideram: átomo com  $Z$  elétrons em repouso na origem;  
elétron incidente, velocidade  $\sigma$ .

parâmetro de impacto  $b \gg$  raio do átomo



(68.1)

notas: elétron incidente  $\rightarrow$  campo elétrico sob átomo  $\rightarrow$  excitação  
átomo:

: processo de espelhamento inelástico elétron-átomo!

ideia: estudar o processo de excitação do átomo em

1ª ordem de teoria de perturbação;

como  $b \gg$  raio do elétron, o hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$H = H_0 + V(t) \quad (68.2)$$

onde  $H_0$ : hamiltoniano atômico e

$$V(t) = e^2 \sum_{i=1}^Z \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}(t)|} : \text{interação elétron-átomo} \quad (68.3)$$

$\vec{r}_i$ : posição i-ésimo elétron átomo;

$\vec{R}(t)$ : trajetória elétron incidente = trajetória clássica: hipótese

↳ tratamento semiclassico do processo de excitação (coulombiano) ~ interação coulombiana (68.3)

como  $b \gg n \sim$  raio átomo, podemos considerar a expansão multipolar do potencial (68.3):

$$V(t) = c^2 \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l>0} \frac{n_i^l}{R^{l+1}} P_l(\hat{n}_i \cdot \hat{R}) ; \quad \vec{R} = \vec{R}(t) \quad (68.3)$$

se  $|a\rangle$  e  $|b\rangle$ : autoestados de  $H_0$  (átomo), temos que

$$\text{Eq. (51.2): } \sqrt{|a \rightarrow b|} \approx \frac{e^4}{\hbar^2} \left| \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l>0} \int_0^t dt' \frac{e^{i\omega_{ba} t'}}{R^{l+1}} \langle b | n_i^l P_l(\hat{n}_i \cdot \hat{R}) | a \rangle \right|^2 \quad (I) \quad (68.2)$$

notam:

$l=0$ : (I) =  $\langle b | a \rangle = 0$  : " transição de monopolo

$l=1$ : (I) =  $\langle b | n_i P_1(\hat{n}_i \cdot \hat{R}) | a \rangle$  : " de dipolo elétrico (E1)

$l=2$  : " " de quadrupolo (E2)

:

$l$  : " " de  $2^{\text{a}}$ -polo (Ee)

consideram apenas a transição do tipo dipolo elétrico;

como trajetória elétron incidente  $\vec{R}(t)$  é pleno  $xz$ , temos que

$$n_i P_1(\hat{n}_i \cdot \hat{R}) = \hat{n}_i \cdot \hat{R}(t) \approx x_i \sin \theta(t) + z_i \cos \theta(t)$$

onde  $R(t)$  e  $\theta(t)$ : coordenadas polares elétron incidente

considerando conservação (clássica) do momento angular elétron:

$$\vec{L}_{in} = -mb\omega \hat{j} = mR^2\dot{\theta} \hat{j} = \vec{L}_{out} \quad (\text{veja figura})$$

$$L \rightarrow -b\omega = R^2 \frac{d\theta}{dt} \rightarrow \frac{dt}{R^2} = -\frac{d\theta}{b\omega} \quad (70.1)$$

considerando  $t_0 \rightarrow -\infty$  e  $t \rightarrow +\infty$ , temos que

$$(II) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt'}{R^2} e^{i\omega_b a t'} \langle b_1 x_i | a \rangle \sin\theta(t') + \langle b_1 z_i | a \rangle \cos\theta(t')$$

$$= - \int_{\pi}^{\theta(b)} \frac{d\theta}{b\omega} e^{i\omega_b a t'} \langle b_1 x_i | a \rangle \sin\theta + \langle b_1 z_i | a \rangle \cos\theta \quad (70.2)$$

onde  $t' = t'(\theta) \leq \theta(b)$ : ângulo de espalhamento.

Lembrem mecanica clássica:

$$b(\theta) = \left(\frac{\kappa}{2E}\right) \cotg \frac{\theta}{2}; \text{ p/ potencial } V(n) = \frac{\kappa}{n}$$

↑  
energia partícula incidente.

como  $\theta(b)$  conhecida  $\rightarrow$  em princípio, Eq.(70.2) pode ser determinada!

Hipótese: intervalo de tempo  $\Delta t' \ll \frac{1}{\omega_b a}$ : escala de tempo colisão característica sistema

$\rightarrow \omega_b a t' \ll 1$  e, assim

$$(II) \approx - \int_{\pi}^{\theta(b)} \frac{d\theta}{b\omega} \langle b_1 x_i | a \rangle \sin\theta + \langle b_1 z_i | a \rangle \cos\theta$$

$$= \frac{1}{b\omega} \left( \langle b_1 x_i | a \rangle (\cos\theta(b) + 1) - \langle b_1 z_i | a \rangle \sin\theta(b) \right)$$

$$\text{Eq. (69.2): } W_{a \rightarrow b} \approx \left( \frac{e^2}{\hbar b \sigma} \right)^2 \left| \langle b_1 \times \mathbf{l}_a \rangle (\cos \theta(b) + 1) - \right.$$

$$\left. - \langle b_1 z \mathbf{l}_a \rangle \sin \theta(b) \right|^2 : \quad (71.1)$$

: prob. de transição para átomo em 1ª ordem teoria de perturbação e na aproximação de dipolo elétrônico.

Aqui:  $x$  e  $y$ : componentes vetoriais  $\vec{n} = \sum_{i=1}^z \vec{n}_i$

· similar Eq. (65.3), podemos definir:

$$\Delta E = \overline{\sum_{b \neq a} (E_b^0 - E_a^0)} W_{a \rightarrow b} : \quad (71.2)$$

: energia média transferida para átomo pela colisão inelástica

verifica-se que (veja abacixos)

$$\Delta E = \frac{2ze^4}{mb^2\sigma^2} \frac{\cos^2 \theta(b)}{2} : \text{ nota: independe } \mathbf{t} : \quad (71.3)$$

Obs.: para tratamento clássico desse sistema, veja problema 14.6.

Jackson!

· sobre a Eq. (71.3),

considerar:

$$S_{ij} = \frac{m}{\hbar^2} \sum_k (E_k - E_s) \left( \langle S_i X_i | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | X_j | S \rangle + \langle S_i X_j | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | X_i | S \rangle \right) \quad (71.4)$$

$$= \frac{m}{\hbar^2} \sum_k \langle S_i X_i | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | H_0 | X_j | S \rangle + \langle S_i X_j | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | H_0 | X_i | S \rangle$$

$$- \langle S_i H_0 | X_j | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | X_i | S \rangle + \langle S_i X_j | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | H_0 | S \rangle$$

$$S_{ij} = \frac{m}{\hbar^2} \langle s_1 x_i \hbar_o x_j + x_j \hbar_o x_i - \hbar_o x_i x_j - x_j x_i \hbar_o | s \rangle$$

$$[x_i, \hbar_o] x_j - x_j [x_i, \hbar_o]$$

$$[[x_i, \hbar_o], x_j]$$

$$\text{se } \hbar_o = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \rightarrow [x_i, \hbar_o] = i\hbar p_i \rightarrow [[x_i, \hbar_o], x_j] = \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij}$$

$$\hookrightarrow S_{ij} = \delta_{ij}$$

$$\text{Eq. (75.4) } p_i \mid i=j : \quad x_i = x_j = x :$$

$$\frac{m}{\hbar^2} \sum_k (E_k - E_s) \cdot 2 \cdot |\langle s_1 x_i x_k \rangle|^2 = 1$$

$p_1$  sistema c/ 2 eletrônes:

$$\underbrace{\frac{1}{\hbar} \frac{2m}{\hbar} \omega_{ks} \sum_k |\langle s_1 x_i x_k \rangle|^2}_\equiv = 1 : \text{negra de soma de} \quad (72.1)$$

Thomas-Reiche-Kuhn

$$\equiv f_{ks}$$

$\uparrow$  força do oscilador

notar: se  $|s\rangle = |n=0\rangle$ : estado fundamental O.H. 1-1 e  
 $|x\rangle = |n=1\rangle$ : " excitado " "

$$\hookrightarrow f_{s0} = \frac{2m \omega_{s0}}{\hbar} |\langle n=0 | x | n=1 \rangle|^2 = 1 !$$

$$\sqrt{\hbar/2m\omega_{s0}}$$

Exercício: Determinar Eq. (75.3) a partir Eqs. (75.1) e (75.2)  
utilizando (72.1).

L

• Aproximação adiabática e a fase de Berry.

(pr. detalhes, veja Sec. 5.6, Sakurai e Napolitano)

consideram:  $H = H(t)$

hipótese:  $H = H(t) = H[\vec{R}(t)]$  (73.1)

onde  $\vec{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), \dots)$  : conjunto de parâmetros  
e funções  $R_i(t)$  : variação temporal lenta

Ex.: spin- $\frac{1}{2}$  + campo magnético  $\vec{B} = \vec{B}(t)$ ;  
hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = -\frac{2\mu}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B}(t) \quad (73.2)$$

nesse caso:  $\vec{R}(t) = \vec{B}(t) = (B_1(t), B_2(t), B_3(t))$ ;

escala de tempo característica:  $\tau = \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{\hbar}{E_+ - E_-}$

se  $T: \Delta t$  característico  $\vec{B}(t)$

$\hookrightarrow$  variação temporal lenta =  $T \gg \tau$  (73.3)

ideia: consideram a eq. de movimento  $i\psi(t)\rangle$  na  
aproximação adiabática.

Definição: base instantânea  $|f_n(t)\rangle$ : autoestados  $H(t)$   
pr. t fixo, i.e.,

$$H(t)|f_n(t)\rangle = E_n(t)|f_n(t)\rangle \quad (73.4)$$

onde  $\langle f_n(t)|f_m(t)\rangle = \delta_{n,m}$ , pr. t fixo

notar Eq. (73.4) : tempo  $t$  é apenas um parâmetro !

Eq. de movimento p/  $|\psi(t)\rangle$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (74.1)$$

podemos considerar:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\phi_n(t)\rangle ; \quad C_n(t) \in \mathbb{C}$$

$$\text{c/ } |\psi(t=0)\rangle = \sum_n C_n(0) |\phi_n(0)\rangle \quad (74.2)$$

Eqs. (74.1) e (74.2),

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + i\hbar \sum_n C_n(t) \frac{d}{dt} |\phi_n(t)\rangle = \sum_n C_n(t) H(t) |\phi_n(t)\rangle \\ = E_n(t) |\phi_n(t)\rangle$$

$\langle \phi_k(t) | :$

$$\hookrightarrow i\hbar \dot{C}_k(t) - E_k(t) C_k(t) = -i\hbar \sum_n C_n(t) \langle \phi_k(t) | \frac{d}{dt} |\phi_n(t)\rangle :$$

(I) (74.3)

: eq. diferencial p/ coeficientes  $C_k(t)$ .

próxima etapa: determinar (I);

vamos considerar 2 casos:

(i)  $K = n$ ,

$$\text{como } \langle \phi_n(t) | \phi_n(t)\rangle = 1$$

$$\hookrightarrow \left( \frac{d}{dt} \langle \phi_n(t) | \right) |\phi_n(t)\rangle + \langle \phi_n(t) | \frac{d}{dt} |\phi_n(t)\rangle = 0$$

$$\equiv \langle \dot{\phi}_n(t) |$$

$$\equiv |\dot{\phi}_n(t)\rangle$$

$$\hookrightarrow \langle \dot{\phi}_n(t) | \phi_n(t) \rangle + \langle \phi_n(t) | \dot{\phi}_n(t) \rangle = 2\operatorname{Re} \langle \phi_n(t) | \frac{d}{dt} | \phi_n(t) \rangle = 0$$

$$\langle \phi_n(t) | \dot{\phi}_n(t) \rangle^*$$

$$\hookrightarrow \langle \phi_n(t) | \frac{d}{dt} | \phi_n(t) \rangle = i \omega_n(t) ; \quad \omega_n(t) \in \mathbb{R} \quad (75.1)$$

imaginário puro

(ii)  $\kappa \neq n$ .

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_n(t) | H | \phi_n(t) \rangle + H \frac{d}{dt} \langle \phi_n(t) | = \dot{E}_n(t) \langle \phi_n(t) | + E_n(t) \frac{d}{dt} \langle \phi_n(t) |$$

$$\langle \dot{\phi}_x(t) | : \quad \langle \phi_x(t) | \dot{H} | \phi_n(t) \rangle + \langle \phi_x(t) | H \frac{d}{dt} | \phi_n(t) \rangle =$$

$$E_x(t) \langle \phi_x(t) |$$

$$= \dot{E}_n(t) \langle \phi_x(t) | \phi_n(t) \rangle + E_n(t) \langle \phi_x(t) | \frac{d}{dt} | \phi_n(t) \rangle$$

$$= 0$$

$$\hookrightarrow \langle \dot{\phi}_x(t) | \frac{d}{dt} | \phi_n(t) \rangle = \langle \phi_x(t) | \dot{H} | \phi_n(t) \rangle ; \quad n \neq x \quad (75.2)$$

Eqs. (74.3), (75.1) e (75.2).

$$\dot{C}_x(t) + i \left( E_x(t) + \hbar \omega_x(t) \right) C_x(t) =$$

$$= - \sum_{n \neq x} C_n(t) \langle \phi_x(t) | \dot{H} | \phi_n(t) \rangle \quad (75.3)$$

Eq. (75.3) : acoplamento entre estados  $|f_n(t)\rangle$  e  $|f_m(t)\rangle$ ,  $n \neq m$ .

notar: como  $H \sim 1/\tau$

$\hookrightarrow (II) \sim \frac{1}{T\Delta E} \sim \frac{\hbar}{T} \ll 1$  : condição (73.3) : variação  
tempo constante  $H(t)$ !

considerar:  $(II) \approx 0$  : aproximação adiabática

$$\hookrightarrow \text{Eq. (75.3)} : i\frac{c_n(t)}{\hbar} + i\left(\frac{E_n(t)}{\hbar} + \hbar\alpha_n(t)\right)c_n(t) \approx 0 \quad (76.1)$$

Solução:

$$c_n(t) = c_n(0) \exp\left(-i\int_0^t dt' E_n(t')\right) \exp\left(-i\int_0^t dt' \alpha_n(t')\right)$$

$$\equiv i\gamma_n(t)$$

(76.2)

Dessa forma, Eq. (74.2) :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) \exp\left(-i\int_0^t dt' E_n(t')\right) e^{i\gamma_n(t)} |f_n(t)\rangle :$$

: estado do sistema  $|\psi(t)\rangle$  na

aproximação adiabática !

(76.3)

se  $c_n(0) = s_{n,n}$ , temos que

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp\left(-i\int_0^t dt' E_n(t')\right) e^{i\gamma_n(t)} |f_n(t)\rangle \quad (76.4)$$

fase dinâmica,

generalização

caso  $H \neq H(t)$

fase adicional (não-dinâmica)

$\approx$  aproximação adiabática

pr.  $H = H(t)$

$\gamma_n(t)$  : fase geométrica ou fase de Berry

Eq (76.4): na aproximação adiabática, a evolução temporal  
não envolve transições entre estados instantâneos;  
 $| \psi_n(t) \rangle$  apenas adquirem uma fase dinâmica e uma  
fase geométrica:

Verifica-se que se parâmetro  $\vec{R} \in \mathbb{R}^n$ ,  $n > 3 \rightarrow f_n(t) \neq 0$ !

Definição: estados adiabáticos

$$|\tilde{\psi}_n(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')\right) e^{if_n(t)} |\psi_n(t)\rangle \quad (77.1)$$

Nesse caso, o estado do sistema (76.3) assume a forma:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) |\tilde{\psi}_n(t)\rangle \quad (77.2)$$

sobre a fase de Berry.

Ref.: M.V. Berry, Proc. Roy. Soc. Lond. A 392, 45 (1984).

Ideia: considerar  $f_n(t)$  em detalhes;

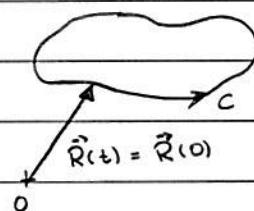
Lembra hamiltoniano (73.1):  $H = H(t) = H[\vec{R}(t)]$

$\uparrow$  conjunto de  
parâmetros  $R_i(t)$

Notação:  $|\psi_n(t)\rangle \equiv |n(\vec{R}(t))\rangle = |n(\vec{R})\rangle$

consideram: curva fechada  $C$  no espaço de parâmetros, i.e.,

$$\vec{R}(0) = \vec{R}(t)$$



$$\text{Eq. (75.1)} : d_n(t) = -i \langle \varphi_n(t) | \frac{d}{dt} | \varphi_n(t) \rangle = -i \langle n(\vec{R}) | \frac{d}{dt} | n(\vec{R}) \rangle.$$

$$= \vec{\nabla}_R |n(\vec{R})\rangle \frac{d\vec{R}}{dt}$$

$$\hookrightarrow d_n(t) = -i \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R |n(\vec{R})\rangle \cdot \frac{d\vec{R}}{dt}$$

Eq. (76.2) :

$$f_n(t) = - \int_0^t d_n(t') dt' = \int_0^t i \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R |n(\vec{R})\rangle \cdot \frac{d\vec{R}}{dt'} dt'$$

$$= \oint_C i \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R |n(\vec{R})\rangle \cdot d\vec{R} \equiv f_n(c) : \text{fase de Berry}$$

$$\equiv \vec{A}_n(\vec{R})$$

notar: como  $f_n(c) \in \mathbb{R} \rightarrow$  componentes  $A_n(\vec{R})_i \in \mathbb{R}$

se  $\vec{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), R_3(t)) \rightarrow \vec{A}_n(\vec{R}) \in \mathbb{R}^3$ , temos que

$$f_n(c) = \oint_C \vec{A}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{R} = \int_S (\vec{\nabla}_R \times \vec{A}_n(\vec{R})) \cdot d\vec{s} : \quad (78.2)$$

↑ superfície cuja fronteira = curva  $C$ .

:  $f_n(c)$  pode ser vista como o fluxo do "campo magnético"  $\vec{\nabla}_R \times \vec{A}_n(\vec{R})$  através superfície  $S$ .

notar:  $f_n(c)$  não é uma fase dinâmica;

depende apenas da variação estada  $|n(\vec{R})\rangle$  à medida

que  $\vec{R}(t)$  se movimenta ao longo da curva  $C$

no espaço de parâmetros

$\hookrightarrow f_n(c)$  é uma fase geométrica !

Utilizando o teorema de Stokes, temos que

$$r_n(c) = i \int_C \langle n(\vec{r}) | \vec{J}_R | n(\vec{r}) \rangle \cdot d\vec{r}$$

$$= i \int_S (\vec{v}_R \times \langle n(\vec{r}) | \vec{J}_R | n(\vec{r}) \rangle) \cdot d\vec{s}$$

$$E_{ijk} \partial_j \langle n | \partial_k | n \rangle d\vec{s}$$

$$E_{ijk} (\underbrace{\partial_j n | \partial_k n \rangle}_{0} + \underbrace{\langle n | \partial_j \partial_k | n \rangle}_{0}) d\vec{s}$$

$$= i \int_S \underbrace{\langle \vec{J}_R n(\vec{r}) | \times | \vec{J}_R n(\vec{r}) \rangle}_{E_{ijk} \langle \partial_j n | \partial_k n \rangle} \cdot d\vec{s}$$

$$E_{ijk} \langle \partial_j n | \partial_k n \rangle d\vec{s}$$

$$\uparrow J = \sum_m |m(\vec{r})\rangle \langle m(\vec{r})|$$

$$\hookrightarrow r_n(c) = i \sum_{m \neq n} \int_S (\langle \vec{J}_R n(\vec{r}) | m(\vec{r}) \rangle \times \langle m(\vec{r}) | \vec{J}_R n(\vec{r}) \rangle) \cdot d\vec{s} \quad (79.3)$$

Obs.:  $m = n$  não incluído pois,

$$\langle n(\vec{r}) | n(\vec{r}) \rangle = 1 \rightarrow \langle \vec{J}_R n | n \rangle + \langle n | \vec{J}_R n \rangle = 0$$

$$\hookrightarrow \langle \vec{J}_R n | n \rangle \times \langle n | \vec{J}_R n \rangle = 0 !$$

Próxima etapa: determinar  $\langle \vec{J}_R n | m \rangle$ ,

$$\vec{J}_R \text{ Eq. (73.4)} : (\vec{J}_R H) |n\rangle + H | \vec{J}_R n \rangle = (\vec{J}_R E_n(\vec{r})) |n\rangle +$$

$$+ E_n(\vec{r}) | \vec{J}_R n \rangle$$

$$\langle m(\vec{r}) | :$$

$$\langle m_1 | \vec{V}_R H | n \rangle + \langle m_1 H | \vec{V}_R n \rangle = (\vec{V}_R E_n) \langle m_1 n \rangle + E_n \langle m_1 | \vec{V}_R n \rangle$$

$$E_m(\vec{R}) \langle m_1 |$$

0

$$\hookrightarrow \langle m(\vec{R}) | \vec{V}_R n(\vec{R}) \rangle = \langle m(\vec{R}) | \vec{V}_R H | n(\vec{R}) \rangle ; n \neq m \quad (80.1)$$

$$E_n(\vec{R}) - E_m(\vec{R})$$

Dessa forma, Eq. (79.1) :

$$f_n(c) = \int_S i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \vec{V}_R H | m \rangle \times \langle m | \vec{V}_R H | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \cdot d\vec{s}$$

$\equiv \vec{V}_n(\vec{R})$  : "campo magnético"

$$= \int_S \vec{V}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{s} \quad : \text{similar a Eq. (78.2)} \quad (80.2)$$

Ex. 1: spin- $1/2$   $\oplus$  campo magnético  $\vec{B} = \vec{B}(t)$ ;

ideia: determinar  $f_n(c)$  via Eq. (80.2);

hamiltoniano Eq. (73.2) :

$$H(t) = H(\vec{B}(t)) = -\frac{2}{\hbar} \mu \vec{S} \cdot \vec{B} = -\mu B \hat{S} \cdot \hat{B} ; \mu = \text{cte} \quad (80.3)$$

notar: parâmetro  $\vec{R}(t) = \vec{B}(t)$

como autovalores  $\hat{S} \cdot \hat{B}$  :  $\pm \frac{1}{2}$ , temos que

autovalores  $H(t)$ :

$$E_+(t) = -\mu B(t)$$

$$E_-(t) = +\mu B(t)$$

autovalores:

$$|+\rangle = |+(B)\rangle$$

$$|- \rangle = |-(B)\rangle$$

temos que,

$$\cdot (E_\sigma(\vec{B}) - E_{-\sigma}(\vec{B}))^2 = \langle \mu^2 B^2(t) \rangle$$

$$\cdot \vec{V}_{BH} = -\frac{2\mu}{\hbar} \vec{S}$$

• para determinar  $\langle \sigma | \vec{V}_{BH} | -\sigma \rangle$ , vamos utilizar a simetria de notação do sistema w.r.t. eixo  $\hat{B}$ ;

consideram:  $\vec{B} \parallel \hat{z}$ ;

$$\text{como } \vec{S} = \frac{1}{2} (S_+ + S_-) \hat{x} + \frac{1}{2i} (S_+ - S_-) \hat{y} + S_z \hat{z}$$

$$\stackrel{e}{=} S_+ | + \rangle = \hbar | + \rangle; S_- | + \rangle = \hbar | - \rangle, \text{ temos que}$$

$$\langle +(\vec{B}) | \vec{V}_{BH} | -(\vec{B}) \rangle = -\frac{2\mu}{\hbar} \langle +|\vec{S}| - \rangle = -\mu (\hat{x} - i\hat{y})$$

$$\langle -(\vec{B}) | \vec{V}_{BH} | +(\vec{B}) \rangle = -\frac{2\mu}{\hbar} \langle -|\vec{S}| + \rangle = -\mu (\hat{x} + i\hat{y})$$

$$\rightarrow \langle +|\vec{V}_{BH}| - \rangle \times \langle -|\vec{V}_{BH}| + \rangle = 2\mu^2 i \hat{z}$$

$$\langle -|\vec{V}_{BH}| + \rangle \times \langle +|\vec{V}_{BH}| - \rangle = -2\mu^2 i \hat{z}$$

Eq. (80.2):

$$V_\sigma(\vec{B}) = i \langle \sigma | \vec{V}_{BH} | -\sigma \rangle \times \langle -\sigma | \vec{V}_{BH} | \sigma \rangle; \sigma = \pm$$

$$(E_\sigma - E_{-\sigma})^2$$

$$= -\sigma \frac{1}{2} \frac{\hat{z}}{B^2(t)} \quad (81.1)$$

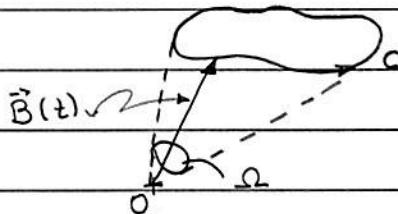
caso geral,

$$V_\sigma(\vec{B}) = -\sigma \frac{1}{2} \frac{\hat{B}}{B^2(t)} \quad (81.2)$$

$$\Rightarrow \gamma_z(c) = \mp \frac{1}{2} \int_S \hat{\vec{B}} \cdot d\vec{s} = \mp \frac{1}{2} Q$$

$\uparrow$  ângulo sólido

(82.1)



Eq. (82.1):  $\gamma_z(c)$  depende apenas ângulo sólido;  
não depende detalhes curva  $C$  e de  $\mu$ .

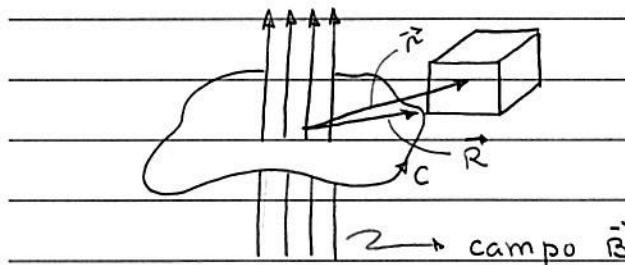
Ex. 2: Efeito Aharonov-Bohm.

ideia: verificam que o efeito Aharonov-Bohm (AB) está relacionado a a fase geométrica  $\gamma_n(c)$ ;

(p/ introdução efeito AB, veja Sec. 2.7, Sakurai & Napolitano)

consideram: partícula carregada, posição  $\vec{r}$ , confinada intérieur caixa;  
vetor  $\vec{R}$ : pto de referência na caixa.

$t$  parâmetro externo



notar: intérieur caixa

$\vec{B} = 0$  mas  $\vec{A} \neq 0$ !

Vamos considerar 2 casos:

(i) fluxo campo  $\vec{B}$  através curva  $C$ :  $\Phi_B = 0$  ( $\vec{A} = 0$ ),

hamiltoniano:  $H = H(\vec{p}, \vec{r} - \vec{R})$

$$\Leftrightarrow H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle ; \langle \dot{\vec{r}}_1 | \psi_n \rangle = \psi_n (\vec{r} - \vec{R}) \quad (82.2)$$

(iii) fluxo campo  $\vec{B}$  através curva  $C$ :  $\Phi_B \neq 0$  ( $\vec{A} \neq 0$ ).

$$\text{hamiltoniano: } H = H(\vec{p} - \frac{1}{c} q \vec{A}(\vec{r}), \vec{n} - \vec{r})$$

$$\hookrightarrow H|\vec{n}(\vec{r})\rangle = E_n|\vec{n}(\vec{r})\rangle \quad (83.1)$$

Lembra transformação de gauge em H.Q.,

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \times$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \partial_t \times \quad ; \quad \phi = \phi(\vec{r}, t), \vec{A} = \vec{A}(\vec{r}, t), \times = \times(\vec{r}, t)$$

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = e^{iq \times / hc} \psi(\vec{r}, t)$$

notar:  $|t_n\rangle$  e  $|\vec{n}(\vec{r})\rangle$  podem ser relacionados via uma transformação de gauge;

$$\text{identificando: } \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \times$$

$$\vec{A} = 0 + \vec{\nabla} \times$$

$$\text{como } \vec{A} = \vec{\nabla} \times \rightarrow \times(\vec{r}) = \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'$$

Dessa forma,

$$\langle \vec{n} | \vec{n}(\vec{r}) \rangle = \exp \left( \frac{iq}{hc} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \right) \underbrace{\langle \vec{n} | t_n \rangle}_{t_n(\vec{r} - \vec{R})} \quad (83.2)$$

consideram: transporte adiabático caixa ao longo da curva fechada  $C$ ;

temos que,

$$\langle \vec{n} | \vec{V}_R n(\vec{r}) \rangle = \exp \left( \frac{iq}{\hbar c} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{n}') \cdot d\vec{n}' \right) +$$

$$* \left( \vec{V}_R - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A}(\vec{R}) \right) \psi_n(\vec{n} - \vec{r}) \quad (84.1)$$

$$\hookrightarrow \langle n(\vec{r}) | \vec{V}_R n(\vec{r}) \rangle = \int d^3n \langle n(\vec{r}) | \vec{n} \rangle \langle \vec{n} | \vec{V}_R n(\vec{r}) \rangle$$

$$= \int d^3n \psi_n^*(\vec{n} - \vec{r}) \left( \vec{V}_R - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A}(\vec{R}) \right) \psi_n(\vec{n} - \vec{r}) = - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A}(\vec{R}) \quad (84.2)$$

$$\text{pois } \vec{V}_R \int d^3n |\psi_n(\vec{n} - \vec{r})|^2 = 0$$

Eqs. (78.1) e (84.2),

$$r_n(c) = i \oint_C \langle n(\vec{r}) | \vec{V}_R | n(\vec{r}) \rangle \cdot d\vec{r} = \frac{q}{\hbar c} \underbrace{\oint_C \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}}_{\Phi_B} :$$

$$(84.3)$$

: fase função de onda ~ efeito AB!

(veja Eq.(2.7.70), Sakurai)

Obs. 1: resultados experimentais p/  $r_n(c)$ : veja, e.g.,

Richardson et al., Phys. Rev. Lett. 61, 2030 (1988);

Filipp et al., Phys. Rev. Lett. 102, 030404 (2009).

Obs. 2: fase de Berry: ingrediente importante p/ descrição isolantes topológicos, veja, e.g.,

Topological insulators. Contemporary concepts of condensed matter science, vol. 6, edited by

M. Franz and L. Molenkamp (Elsevier, 2013).