

# Mecânica Quântica II

Jens Mund

Notas de aula *incompletas*, DF-UFJF, Período 2021-3

## Contents

<b>1</b>	<b>Produto tensorial, multi-partículas, CSCO</b>	<b>2</b>
1.1	Produto tensorial . . . . .	2
1.2	Sistemas de $n$ partículas; partículas idênticas . . . . .	4
1.3	CSCO (“Complete set of commuting observables”) . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Momento angular; Spin</b>	<b>5</b>
2.1	Partículas com spin $\frac{1}{2}$ . . . . .	5
2.2	Revisão: Momento angular . . . . .	6
2.3	Adição de momenta angulares . . . . .	7
2.4	Teorema de Wigner-Eckart . . . . .	10
2.5	Elétron no campo magnético uniforme e elétrico . . . . .	10
2.5.1	Generalidades . . . . .	10
2.5.2	Efeito Zeeman “normal” . . . . .	12
2.5.3	Fator de Landé . . . . .	13
2.5.4	Acoplamento $J$ - $J$ . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Teoria de perturbação independente de tempo</b>	<b>14</b>
3.1	O método . . . . .	14
3.2	Método variacional . . . . .	17
3.3	Exemplos: Estrutura fina e hiperfina do átomo de hidrogênio . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Teoria de perturbação dependente de tempo</b>	<b>18</b>
4.1	Série de Dyson . . . . .	18
4.2	Cenário de interação . . . . .	19
4.3	Absorção e emissão induzida . . . . .	21
4.4	Regra de ouro de Fermi . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Teoria de espalhamento</b>	<b>22</b>
5.1	Seção de choque . . . . .	22
5.2	Teoria de espalhamento independente de tempo . . . . .	24
5.3	Teoria de espalhamento dependente de tempo . . . . .	26

# 1 Produto tensorial, multi-partículas, CSCO

## 1.1 Produto tensorial

Sejam  $U$  e  $V$  dois espaços unitários de dimensão finita, i.e, com produto escalar  $(\mathbf{u}, \mathbf{u}')$ . O *produto tensorial*  $U$  e  $V$ , em símbolos  $U \otimes V$ , é por definição o espaço das aplicações bilineares de  $U \times V$  em  $\mathbb{C}$ ,

$$U \otimes V \doteq \{U \times V \rightarrow \mathbb{C}, \text{ bilinear}\}, \quad (1)$$

Dado  $\mathbf{u} \in U$ ,  $\mathbf{v} \in V$ , define-se o “produto tensorial”  $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} \in U \otimes V$  pela aplicação  $U \times V \rightarrow \mathbb{C}$  dada por

$$(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})(\mathbf{u}', \mathbf{v}') := (\mathbf{u}, \mathbf{u}') (\mathbf{v}, \mathbf{v}'). \quad (2)$$

(Cuidado: No lado esquerdo,  $(\mathbf{u}', \mathbf{v}')$  denota o *par*, e no lado direito, o produto escalar!)

Um produto escalar em  $U \otimes V$  é definido por

$$(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}, \mathbf{u}' \otimes \mathbf{v}') := (\mathbf{u}, \mathbf{u}') (\mathbf{v}, \mathbf{v}'). \quad (3)$$

Se  $U$  e/ou  $V$  tem dimensão *infinita* e os dois são completos (i.e., eles são espaços de Hilbert), o produto tensorial deles é definido como seguinte. Definem-se primeiro os produtos  $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$  como aplicações bilineares  $U \times V \rightarrow \mathbb{C}$  pela equação (2). Depois define-se  $U \otimes_0 V$  como o espaço das combinações lineares (finitas) de elementos da forma  $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ , e  $U \otimes V$  como a completção de  $U \otimes_0 V$ . Vale o seguinte teorema [5, p. 52]:

**Teorema 1** *Se  $\{\varphi_i\}$  é uma BON (base ortonormal) em  $U$ , e  $\{\chi_j\}$  uma BON em  $V$ , então  $\{\varphi_i \otimes \chi_j\}$  é uma BON em  $U \otimes V$ .*

No caso de espaços do tipo  $L^2(M)$  podemos fazer as identificações

$$L^2(M) \otimes V \cong L^2(M; V), \quad L^2(M_1) \otimes L^2(M_2) \cong L^2(M_1 \times M_2).$$

Em mais detalhes:

*i)* Dado  $M \subset \mathbb{R}^k$  e  $V$  um espaço vetorial, seja  $L^2(M; V)$  o espaço de funções  $\mathbf{f} : M \rightarrow V$  com  $\|\mathbf{f}\|^2 \doteq \int_M \|\mathbf{f}(x)\|_V^2 d^k x < \infty$ . Produto escalar em  $L^2(M; V)$ :

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g}) \doteq \int_M (\mathbf{f}(x), \mathbf{g}(x))_V d^k x. \quad (4)$$

Dado  $f \in L^2(M)$  e  $\mathbf{v} \in V$ , define um elemento  $f \otimes' \mathbf{v} \in L^2(M; V)$  por

$$(f \otimes' \mathbf{v})(x) \doteq f(x) \mathbf{v}. \quad (5)$$

*ii)* Dado  $f \in L^2(M_1)$  e  $g \in L^2(M_2)$ , define uma função  $f \tilde{\otimes} g$  em  $L^2(M_1 \times M_2)$  por

$$(f \tilde{\otimes} g)(x, y) \doteq f(x) g(y). \quad (6)$$

**Corolário 2** i) A aplicação

$$U' : L^2(M; V) \rightarrow L^2(M) \otimes V, \quad f \otimes' v \mapsto f \otimes v \quad (7)$$

é um isomorfismo unitário.

ii) A aplicação

$$\tilde{U} : L^2(M_1 \times M_2) \rightarrow L^2(M_1) \otimes L^2(M_2), \quad f \tilde{\otimes} g \mapsto f \otimes g \quad (8)$$

é um isomorfismo unitário.

O Corolário afirma:

- Se  $\{\varphi_i\}$  é uma BON em  $L^2(M)$  e  $\{\mathbf{a}_j\}$  é uma BON em  $V$ , então  $\{\varphi_i \otimes' \mathbf{a}_j\}$  é uma BON em  $L^2(M; V)$ .
- Se  $\{\varphi_i\}$  é uma BON em  $L^2(M_1)$  e  $\{\chi_j\}$  é uma BON em  $L^2(M_2)$ , então  $\{\varphi_i \tilde{\otimes} \chi_j\}$  é uma BON em  $L^2(M_1 \times M_2)$ .

Exemplo: Escrevendo  $\mathbb{R}^2 \setminus \{0\} \cong \mathbb{R}^+ \times S^2$  e  $d^3\mathbf{x} = r^2 dr d\Omega$ , temos

$$L^2(\mathbb{R}^3, d^3\mathbf{x}) \equiv L^2(\mathbb{R}^+, r^2 dr) \otimes L^2(S^2, d\Omega).$$

**Operadores em  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$**

$$(A \otimes B)(\psi_1 \otimes \psi_2) \doteq A\psi_1 \otimes B\psi_2.$$

Verifique-se facilmente que os operadores  $A \otimes \mathbf{1}$  e  $\mathbf{1} \otimes B$  comutam, então podem ser diagonalizados simultaneamente. De fato: Se  $\{\varphi_{\nu,i}\}$  é uma BON de auto-vetores do operador  $A$  em  $\mathcal{H}_1$  e  $\{\chi_{\mu,j}\}$  é uma BON de auto-vetores do operador  $B$  em  $\mathcal{H}_2$ ,

$$A\varphi_{\nu,i} = a_\nu \cdot \varphi_{\nu,i}, \quad B\chi_{\mu,j} = b_\mu \cdot \chi_{\mu,j}, \quad (9)$$

então  $\{\varphi_{\nu,i} \otimes \chi_{\mu,j}\}$  é uma BON de auto-vetores simultâneos dos operadores  $A \otimes \mathbf{1}$  e  $\mathbf{1} \otimes B$  em  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ :

$$\begin{aligned} (A \otimes \mathbf{1})(\varphi_{\nu,i} \otimes \chi_{\mu,j}) &= a_\nu \cdot \varphi_{\nu,i} \otimes \chi_{\mu,j} \\ (\mathbf{1} \otimes B)(\varphi_{\nu,i} \otimes \chi_{\mu,j}) &= b_\mu \cdot \varphi_{\nu,i} \otimes \chi_{\mu,j} \end{aligned}$$

Usando o calculo funcional, achamos  $f(A \otimes \mathbf{1}) = f(A) \otimes \mathbf{1}$ .

Supomos  $\psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  é normalizado. Então, pela Eq. (83) em [4], a probabilidade conjunta de encontrar um valor de  $A$  no intervalo  $I$  e um valor de  $B$  em  $J$  é dada por

$$P_\psi(A \in I \wedge B \in J) = \sum_{\nu: a_\nu \in I} \sum_{b_\mu \in J} \sum_{i,j} |(\varphi_{\nu,i} \otimes \chi_{\mu,j}, \psi)|^2. \quad (10)$$

**Estados não-correlatos.** Consideramos 2 sistemas, descritas pelos espaços de Hilbert  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . Consideramos um observável  $A$  referente ao sistema 1 e um observável  $B$  referente ao sistema 2, e supomos que os estados dos sistemas 1 e 2 sejam descritos pelos vetores  $\psi_1$  e  $\psi_2$ , respetivamente.

A Eq. (10) implica que no estado  $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$ , a probabilidade conjunta de encontrar um valor de  $A$  no intervalo  $I$  e um valor de  $B$  em  $J$  é dada por

$$P_{\psi_1 \otimes \psi_2}(A \in I \wedge B \in J) = P_{\psi_1}(A \in I) \cdot P_{\psi_2}(B \in J). \quad (11)$$

Isso implica que os observáveis  $A$  (referente apenas ao sistema 1) e  $B$  (referente apenas ao sistema 2), em estados da forma  $\psi_1 \otimes \psi_2$ , são estatisticamente *independentes* [4, Eq. (27)], e daí não-correlatos. Isso *não* vale para estados gerais, que são da forma  $\sum_i \psi_i \otimes \chi_i$ ! Veja [1, DIII]. (Estes estados gerais mostram correlações do tipo Einstein-Podolski-Rosen.)

Resumindo: O estado  $\psi_1 \otimes \psi_2$  descreve a simples justaposição dos sistemas 1 e 2; o sistema 1 sendo no estado  $\psi_1$  e o sistema 2 no estado  $\psi_2$ .

## 1.2 Sistemas de $n$ partículas; partículas idênticas

Consideramos duas partículas, preparadas independentemente de tal maneira que a partícula 1 se encontra no estado  $\psi_1$  e a partícula 2 no estado  $\psi_2$ . O sistema composto é descrito pelo estado  $\psi_1 \otimes \psi_2$ . Na representação de Schrödinger, o operador  $f(\mathbf{X}) \otimes g(\mathbf{X})$  age como

$$((f(\mathbf{X}) \otimes g(\mathbf{X}))(\psi_1 \otimes \psi_2))(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv (f(\mathbf{X})\psi_1 \otimes g(\mathbf{X})\psi_2)(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x})g(\mathbf{y}) \cdot (\psi_1 \otimes \psi_2)(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Por linearidade, isso implica que em qualquer estado  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3) \equiv L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$  no domínio de  $f(\mathbf{X}) \otimes g(\mathbf{X})$  este operador age como

$$((f(\mathbf{X}) \otimes g(\mathbf{X}))\psi)(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x})g(\mathbf{y}) \cdot \psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (12)$$

Pela Eq. (82) das notas sobre MQI [4] concluímos: Num estado normalizado  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$ , a probabilidade conjunta de encontrar a partícula 1 na região  $G_1$  e a partícula 2 na região  $G_2$  é dada por

$$\begin{aligned} P_{\psi}(\mathbf{X}_{(1)} \in G_1 \wedge \mathbf{X}_{(2)} \in G_2) &= (\psi, c_{G_1}(\mathbf{X}) \otimes c_{G_2}(\mathbf{X})\psi) = \int \overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})} c_{G_1}(\mathbf{x}) c_{G_2}(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} \\ &= \int_{G_1 \times G_2} |\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y}. \end{aligned}$$

Em outras palavras,  $|\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2$  é a densidade de probabilidade conjunta de encontrar a partícula 1 em  $\mathbf{x}$  e a partícula 2 em  $\mathbf{y}$ .<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Isso também segue da Eq. (10), veja discussão depois Eq. (18): Considerando que o conjunto  $\{\delta_{\mathbf{x}} \otimes \delta_{\mathbf{y}}, \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3\}$  é uma BON contínua de autovetores (generalizadas) simultâneas dos operadores  $\mathbf{X} \otimes \mathbf{1}$  e  $\mathbf{1} \otimes \mathbf{X}$ , a probabilidade de encontrar a partícula 1 na região  $G_1$  e a partícula 2 na região  $G_2$  é dada por

$$\int_{G_1 \times G_2} d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} |(\delta_{\mathbf{x}} \otimes \delta_{\mathbf{y}}, \psi)|^2 = \int_{G_1 \times G_2} |\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y},$$

pois  $(\delta_{\mathbf{x}} \otimes \delta_{\mathbf{y}}, \psi) = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ .

**Dinâmica.** Consideramos dois sistemas com respectivos espaços de estados  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$  e Hamiltonianos  $H_1, H_2$ . O sistema composto pelos dois (sub-)sistemas é descrito pelo espaço  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Se *não tem interação* entre eles, a dinâmica é descrita pelo Hamiltoniano  $H_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_2$ . Neste caso, se o estado inicial é da forma  $\psi_1 \otimes \psi_2$ , a evolução temporal será  $\psi_t = \psi_{1,t} \otimes \psi_{2,t}$ . (Exercício.) (Em particular, o estado permanece não-correlato.)

Se os subsistemas interagem entre se, o Hamiltoniano do sistema composto tem um termo mais, tipicamente da forma  $V(\mathbf{X} \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes \mathbf{X})$ , onde  $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  é o potencial descrevendo a interação. Neste caso, mesmo se o estado inicial é não-correlato, i.e. da forma  $\psi_1 \otimes \psi_2$ , para quase todos tempos o estado  $\psi_t$  será correlato.

**Partículas idênticas.**

### 1.3 CSCO (“Complete set of commuting observables”)

## 2 Momento angular; Spin

### 2.1 Partículas com spin $\frac{1}{2}$

Consideramos um elétron, que possui spin  $1/2$ , na representação de Schrödinger. Da MQ1 sabemos que os três componentes  $S_x, S_y, S_z$  do spin comutam com os 3 componentes  $X_1, X_2, X_3$  do operador multiplicação e os 3 componentes  $P_1, P_2, P_3$  do momento. Os únicos operadores com essas propriedades são os múltiplos da unidade. Mas  $S_z$  tem espectro  $\{\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}\}$  – enquanto que a unidade tem espectro  $\{1\}$ . Isso implica que o espaço de estados do elétron (com spin  $1/2$ ) é maior que  $L^2(\mathbb{R}^3)$ , a saber, da forma

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes V = L^2(\mathbb{R}^3; V), \quad (13)$$

onde  $V$  é um espaço linear da dimensão  $d \geq 2$ . Vamos escolher a descrição sem degenerescência, com  $d = 2$ . Pegamos uma BON  $\{\chi_+, \chi_-\}$  de auto-vetores de  $S_z$ :

$$S_z \chi_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \cdot \chi_{\pm}. \quad (14)$$

Os elementos do espaço  $L^2(\mathbb{R}^3; V)$  são da forma<sup>2</sup>

$$\vec{\psi} = \sum_{\varepsilon \in \{\pm\}} \psi_{\varepsilon} \otimes \chi_{\varepsilon} \quad \text{com } \psi_{\varepsilon} \in L^2(\mathbb{R}^3). \quad (15)$$

Pelo Cap. 1.1, a norma do vetor (15) é

$$\|\vec{\psi}\|^2 = \sum_{\varepsilon \in \{\pm\}} \|\psi_{\varepsilon}\|_{L^2}^2 = \sum_{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{x} |\psi_{\varepsilon}(\mathbf{x})|^2. \quad (16)$$

<sup>2</sup>Isso pela seguinte razão. Como  $\vec{\psi}(\mathbf{x})$  é um vetor em  $V$ , ele pode ser expandido em termos da BON  $\{\chi_+, \chi_-\}$ :

$$\vec{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{\varepsilon} (\chi_{\varepsilon}, \vec{\psi}(\mathbf{x}))_V \chi_{\varepsilon} = \sum_{\varepsilon} \psi_{\varepsilon}(\mathbf{x}) \chi_{\varepsilon},$$

onde chamamos  $(\chi_{\varepsilon}, \vec{\psi}(\mathbf{x}))_V =: \psi_{\varepsilon}(\mathbf{x})$  e  $(\cdot, \cdot)_V$  denota o produto escalar em  $V$ . Como (pela Eq. (5))  $\psi_{\varepsilon}(\mathbf{x}) \chi_{\varepsilon} = (\psi_{\varepsilon} \otimes \chi_{\varepsilon})(\mathbf{x})$ , isso mostra a Eq. (15).

**Interpretação.** Temos

$$((X_k \otimes \mathbf{1})\vec{\psi})(\mathbf{x}) = \sum_{\varepsilon \in \{\pm\}} x_k \psi_\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \chi_\varepsilon, \quad (\mathbf{1} \otimes S_z)\vec{\psi} = \sum_{\varepsilon \in \{\pm\}} \frac{\varepsilon \hbar}{2} \psi_\varepsilon \otimes \chi_\varepsilon. \quad (17)$$

Por isso,  $\{\delta_{\mathbf{x}} \otimes \chi_\varepsilon, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \varepsilon \in \{\pm\}\}$  é uma BON contínua de autovetores (generalizadas) simultâneas dos operadores  $\mathbf{X}$  e  $S_z$ . Pela Eq. (81) em [4], a probabilidade de encontrar o elétron na região  $G$  é dada por

$$P_{\vec{\psi}}(\mathbf{X} \in G) = \int_G d^3\mathbf{x} \sum_{\varepsilon \in \{\pm\}} |(\delta_{\mathbf{x}} \otimes \chi_\varepsilon, \vec{\psi})|^2.$$

Usando a expansão (15), temos

$$(\delta_{\mathbf{x}} \otimes \chi_\varepsilon, \vec{\psi}) = \sum_{\varepsilon'} (\delta_{\mathbf{x}} \otimes \chi_\varepsilon, \psi_{\varepsilon'} \otimes \chi_{\varepsilon'}) = \sum_{\varepsilon'} (\delta_{\mathbf{x}}, \psi_{\varepsilon'}) (\chi_\varepsilon, \chi_{\varepsilon'}) = \psi_\varepsilon(\mathbf{x}) \quad (18)$$

pois  $(\delta_{\mathbf{x}}, \psi_{\varepsilon'}) = \psi_{\varepsilon'}(\mathbf{x})$  e  $(\chi_\varepsilon, \chi_{\varepsilon'}) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'}$ . Concluímos que a probabilidade de encontrar o elétron na região  $G$  é dada por

$$P_{\vec{\psi}}(\mathbf{X} \in G) = \int_G d^3\mathbf{x} \sum_{\varepsilon \in \{\pm\}} |\psi_\varepsilon(\mathbf{x})|^2. \quad (19)$$

Similarmente, pela Eq; (10), a probabilidade de encontrar o elétron na região  $G$  e também com um valor de  $\pm \frac{\hbar}{2}$  da componente-3 do spin e dada por

$$P_{\vec{\psi}}(\mathbf{X} \in G \wedge S_z = \pm \frac{\hbar}{2}) = \int_G d^3\mathbf{x} |\psi_\pm(\mathbf{x})|^2.$$

**Exercício 3** Exercise 1 em [1, B<sub>IX</sub>]. Observe a notação de [1]:

$$|\mathbf{r}, \pm\rangle := \delta_{\mathbf{r}} \otimes \chi_\pm, \quad \langle \mathbf{r}, \pm | \psi \rangle = \psi_\pm(\mathbf{r}).$$

## 2.2 Revisão: Momento angular

Uma tripla de operadores  $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$  é chamada de *operador de momento angular* se para todo  $k, l \in \{x, y, z\}$  vale a relação de comutação

$$[J_k, J_l] = \sum_{m \in \{x, y, z\}} i\hbar \varepsilon_{klm} J_m, \quad (20)$$

onde  $\varepsilon_{klm}$  é o símbolo de Levi-Civita.<sup>3</sup> Exemplos são o momento angular orbital  $\mathbf{L}$  agindo em  $L^2(\mathbb{R}^3)$  e o spin  $\mathbf{S}$  agindo em  $\mathbb{C}^2$ . Se existe um tal operador de momento angular, pode-se construir uma BON

$$\{|k, j, m\rangle, k \in K, j \in I, m \in \{-j, \dots, j\}\} \quad (21)$$

<sup>3</sup>Identificando os índices  $\{x, y, z\}$  com  $\{1, 2, 3\}$  (e.g.  $\varepsilon_{xyz} = \varepsilon_{123}$ ), a definição é

$$\varepsilon_{klm} := \begin{cases} 0, & \text{se } \{k, l, m\} \neq \{1, 2, 3\}, \\ 1, & \text{se } (1, 2, 3) \mapsto (k, l, m) \text{ é uma permutação par,} \\ -1, & \text{se } (1, 2, 3) \mapsto (k, l, m) \text{ é uma permutação ímpar.} \end{cases}$$

de autovetores simultaneos de  $\mathbf{J}^2 \doteq \sum_l J_l^2$  e  $J_z$ :

$$\mathbf{J}^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle, \quad J_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle. \quad (22)$$

Em (21),  $K \subset \mathbb{R}$  e  $I$  são conjuntos de índices, sendo que  $I \subset \frac{1}{2}\mathbb{N}_0 = \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$ . Quais valores de  $j$  aparecem, depende do sistema. A BON (21) é chamada de “BON padrão”. A construção dessa BON usa os operadores de escada  $J_{\pm} \doteq J_x \pm iJ_y$ . Vale

$$J_{\pm} |k, j, m\rangle = c_{j,m}^{\pm} |k, j, m \pm 1\rangle, \quad c_{j,m}^{\pm} \doteq \sqrt{(j(j+1) - m(m \pm 1))\hbar}. \quad (23)$$

Observamos ainda o seguinte

**Lemma 4** *Sejam  $\phi \perp \phi'$  vetores perpendiculares em  $\mathcal{E}_{jm}$ . Então para todo  $n$ , os vetores  $J_{\pm}^n \phi$  e  $J_{\pm}^n \phi'$  também são perpendiculares.*

*Comprovante.* Simples. □

### 2.3 Adição de momenta angulares

Consideramos 2 espaços de Hilbert  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ , cada um com um operador de momento angular  $\mathbf{J}_{\nu}$ ,  $\nu = 1, 2$ , e uma BON padrão  $\{|k, j, m\rangle_{\nu}, k \in K_{\nu}, j \in I_{\nu}, -j \leq m \leq j\}$ . O sistema composto é descrito pelo espaço  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Definimos

$$\mathbf{J}_{(1)} \doteq \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1}, \quad \mathbf{J}_{(2)} \doteq \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}_2$$

e o *momento angular total*

$$\mathbf{J} \doteq \mathbf{J}_{(1)} + \mathbf{J}_{(2)}.$$

Verifique-se diretamente que isso é um operador de momento angular no sentido das relações (20). Ademais, para todo  $k \in \{x, y, z\}$  e  $\nu \in \{1, 2\}$  vale

$$[J_k, \mathbf{J}_{(\nu)}^2] = 0 = [J_z, J_{(\nu)z}]. \quad (24)$$

Por conseguinte temos dois conjuntos de operadores comutantes em  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ :

$$(A) \quad \{\mathbf{J}_{(1)}^2, \mathbf{J}_{(2)}^2, J_{(1)z}, J_{(2)z}\} \quad (25)$$

$$(B) \quad \{\mathbf{J}_{(1)}^2, \mathbf{J}_{(2)}^2, \mathbf{J}^2, J_z\}. \quad (26)$$

Os vetores

$$|k_1, j_1, m_1\rangle_1 \otimes |k_2, j_2, m_2\rangle_2 \quad (27)$$

fornecem uma BON de auto-vetores simultâneos para o conjunto (A), com respectivos auto-valores  $\hbar^2 j_1(j_1 + 1), \hbar^2 j_2(j_2 + 1), \hbar m_1$  e  $\hbar m_2$ . Nosso objetivo é a construção de uma BON de autovetores simultâneos

$$|k_1, k_2, j_1, j_2; k, j, m\rangle$$

para o conjunto (B), com respectivos auto-valores  $\hbar^2 j_1(j_1 + 1), \hbar^2 j_2(j_2 + 1), \hbar^2 j(j + 1)$  e  $\hbar m$ . (O índice  $k$  rotula as possíveis degenerescências do autovalor  $j$ . Depois vamos ver que os  $j$  não são degenerados, ou seja, o índice  $k$  assume apenas um valor e pode ser

desconsiderado.) Denotamos por  $\mathcal{E}_{\nu;k,j}$  o span em  $\mathcal{H}_\nu$  dos vetores  $\{|k, j, m\rangle_\nu, -j \leq m \leq j\}$  e

$$\mathcal{E}_{k_1, k_2, j_1, j_2} \doteq \mathcal{E}_{1; k_1, j_1} \otimes \mathcal{E}_{2; k_2, j_2}. \quad (28)$$

Esse espaço é invariante sob todos os operadores nos conjuntos (A) e (B). A nossa tarefa se reduz à construção de uma BON de autovetores de (B) em cada um desses espaços.

Vamos construir essa BON, com os índices  $k_1, k_2, j_1, j_2$  fixos. Para fixar ideias, supomos que  $j_1 \geq j_2$ . (No caso geral, precisamos só substituir  $j_1 - j_2$  por  $|j_1 - j_2|$  no final.) No seguinte, vamos suprimir a notação desses índices: Escrevemos  $\mathcal{E} \doteq \mathcal{E}_{k_1, k_2, j_1, j_2}$  e

$$|m_1\rangle|m_2\rangle \doteq |k_1, j_1, m_1\rangle_1 \otimes |k_2, j_2, m_2\rangle_2, \quad |k, j, m\rangle \doteq |k_1, k_2, j_1, j_2; k, j, m\rangle.$$

Denotamos por  $\mathcal{E}_j$  o auto-espaço de  $\mathbf{J}^2$  com autovalor  $\hbar^2 j(j+1)$ :

$$\mathcal{E}_j \doteq \text{span} \{|k, j, m\rangle, k \in K, -j \leq m \leq j\}$$

onde o conjunto de índices  $K$  ainda é desconhecido (vamos ver que é trivial).

Obviamente, o vetor  $|m_1\rangle|m_2\rangle$  é um autovetor de  $J_z$  com autovalor  $\hbar(m_1 + m_2)$ . Como  $m_\nu \leq j_\nu$ , o auto-valor de  $J_z$  mais alto em  $\mathcal{E}$  é  $m_{\max} = j_1 + j_2$ . Isso também deve ser o valor máximo de  $j$  em  $\mathcal{E}$ :

$$j_{\max} = j_1 + j_2. \quad (29)$$

**Passo (0),**  $j = j_{\max}$ : Definimos  $|1, j_{\max}, j_{\max}\rangle \doteq |j_1\rangle|j_2\rangle$ . Aplicando o operador de escada  $J_- \equiv J_{1-} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes J_{2-}$  e normalizando, obtém-se o auto-vetor com o mesmo  $j = j_{\max}$  e o  $m$  diminuído por 1,  $m = j_{\max} - 1$ :

$$\begin{aligned} |1, j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle &\doteq (c_{j_{\max} j_{\max}}^-)^{-1} J_- |j_{\max}, j_{\max}\rangle, \\ &= (c_{j_{\max} j_{\max}}^-)^{-1} [J_{1-} |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle + |j_1\rangle \otimes J_{2-} |j_2\rangle] \\ &= (c_{j_{\max} j_{\max}}^-)^{-1} [c_{j_1 j_1}^- |j_1 - 1\rangle |j_2\rangle + c_{j_2 j_2}^- |j_1\rangle |j_2 - 1\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{j_1 + j_2}} [\sqrt{j_1} |j_1 - 1\rangle |j_2\rangle + \sqrt{j_2} |j_1\rangle |j_2 - 1\rangle] \end{aligned} \quad (30)$$

$$(31)$$

onde  $c_{jm}^-$  são os coeficientes da Eq. (23). (Na formula explicita (31), usamos  $c_{jj}^- = \hbar\sqrt{2j}$ .) Iterando essa operação  $2j_{\max}$  vezes, constroi-se os vetores  $|1, j_{\max}, j_{\max}\rangle, \dots, |1, j_{\max}, -j_{\max}\rangle$ . O Lemma 4, junto com o fato que  $|j_1\rangle|j_2\rangle$  é o único vetor com  $m = j_1 + j_2$ , implicam que o complemento ortogonal do span desses vetores não contém vetores com  $j = j_{\max}$ , ou seja, esse span coincide com  $\mathcal{E}_{j_{\max}}$ . **Daí, podemos suprimir o índice  $k = 1$  e escrever  $|j, m\rangle$  em vez de  $|1, j, m\rangle$ .**

**Passo (1),**  $j = j_{\max} - 1$ : Consideramos o complemento ortogonal de  $\mathcal{E}_{j_{\max}}$ . Neste espaço, o maior valor de  $m$  (e consequentemente de  $j$ ) é  $j_{\max} - 1$ . Definimos  $|j_{\max} - 1, j_{\max} - 1\rangle$  como o único (módulo fator) vetor no span dos vetores  $|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle$  e  $|j_1 - 1\rangle|j_2\rangle$  contido em  $\mathcal{E}_{j_{\max}}^\perp$ , ou seja,<sup>4</sup> que é ortogonal em  $|j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle$  (dado explicitamente em (31).)

<sup>4</sup>Como  $|j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle$  é o único vetor em  $\mathcal{E}_{j_{\max}}$  com  $m = j_{\max} - 1$ , temos

$$\text{span} \{|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle, |j_1 - 1\rangle|j_2\rangle\} \cap \mathcal{E}_{j_{\max}}^\perp = \text{span} \{|j_1\rangle|j_2 - 1\rangle, |j_1 - 1\rangle|j_2\rangle\} \cap |j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle^\perp,$$

que é unidimensional. Daí, o vetor  $|j_{\max} - 1, j_{\max} - 1\rangle$  realmente é único módulo fator.



Aplicando o operador de escada  $J_-$   $2(j_{\max} - 1)$  vezes e normalizando cada vez, obtém-se os auto-vetores  $|j_{\max} - 1, j_{\max} - 1\rangle, \dots, |j_{\max} - 1, -(j_{\max} - 1)\rangle$ , gerando o espaço  $\mathcal{E}_{j_{\max}-1}$ .

**Passo (2),**  $j = j_{\max} - 2$ : Definimos  $|j_{\max} - 2, j_{\max} - 2\rangle$  como o único (módulo fator) vetor no span dos vetores  $|j_1\rangle|j_2 - 2\rangle, |j_1 - 1\rangle|j_2 - 1\rangle$  e  $|j_1 - 2\rangle|j_2\rangle$  contido em  $\mathcal{E}_{j_{\max}}^\perp \cap \mathcal{E}_{j_{\max}-1}^\perp$  (ou seja, perpendicular em  $|j_{\max}, j_{\max} - 2\rangle$  e  $|j_{\max} - 1, j_{\max} - 2\rangle$ , compare rodapé 4). Aplicando o operador de escada  $J_-$  e normalizando, gera-se espaço  $\mathcal{E}_{j_{\max}-2}$ .

... E aí vai até

**Passo ( $2j_2$ ),**  $j = j_{\max} - 2j_2 = j_1 - j_2$ : Definimos  $|j_1 - j_2, j_1 - j_2\rangle$  como o único (módulo fator) vetor no span dos vetores  $|j_1\rangle|j_2 - j_2\rangle, |j_1 - 1\rangle|j_2 - j_2 + 1\rangle, \dots, |j_1 - 2j_2\rangle|j_2\rangle$  contido em  $\mathcal{E}_{j_{\max}}^\perp \cap \dots \cap \mathcal{E}_{j_1 - j_2 + 1}^\perp$  (ou seja, perpendicular nos vetores  $|j_{\max}, j_1 - j_2\rangle, \dots, |j_1 - j_2 + 1, j_1 - j_2\rangle$ , compare rodapé 4). Aplicando o operador de escada  $J_-$  e normalizando, gera-se espaço  $\mathcal{E}_{j_1 - j_2}$ .

Aqui, a construção termina, porque não tem mais vetores no espaço. Em outras palavras, temos

$$\mathcal{E} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{E}_j, \quad \text{e } \dim \mathcal{E}_j = 2j + 1.$$

(O limite inferior  $|j_1 - j_2|$  está correto para os dois casos  $j_1 \leq j_2$  e  $j_2 \leq j_1$ .) Vamos verificar as dimensões: A dimensão de  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  é  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . A dimensão do lado direito da equação acima é  $\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j + 1)$  que dá, depois um pequeno cálculo, o mesmo valor.

Os elementos da BON  $|j, m\rangle \equiv |j_1, j_2; j, m\rangle$  em  $\mathcal{E}$  (recordamos que  $j_1, j_2$  são fixos!) podem ser expandidos como

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle |m_1, m_2\rangle. \quad (32)$$

(Aqui, escrevemos  $|m_1, m_2\rangle$  em vez de  $|m_1\rangle|m_2\rangle$ .) Os coeficientes  $\langle m_1, m_2 | j, m \rangle$  são chamados de coeficientes de *Clebsch-Gordon*, e podem ser calculadas conforme a construção descrita acima. Essa construção mostra que  $\langle m_1, m_2 | j, m \rangle$  é diferente de zero só se  $m_1 + m_2 = m$  e  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ .<sup>5</sup> Os coeficientes podem ser escolhidos em  $\mathbb{R}$ . A inversão das Eq.s (32) dá

$$|m_1, m_2\rangle = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \langle j, m | m_1, m_2 \rangle |j, m\rangle, \quad m \doteq m_1 + m_2, \quad (33)$$

com  $\langle j, m | m_1, m_2 \rangle = \overline{\langle m_1, m_2 | j, m \rangle}$ .

<sup>5</sup>Equivalentemente,  $|j - j_1| \leq j_2 \leq j + j_1$  ou  $|j - j_2| \leq j_1 \leq j + j_2$ . Isso é a chamada “triangle selection rule”.

## 2.4 Teorema de Wigner-Eckart

Seja  $\mathbf{J}$  um operador de momento angular agindo no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ .

Um operador  $A$  em  $\mathcal{H}$  é chamado de *operador escalar* se ele comuta com todos os  $J_k$ .

**Lemma 5** *Para um operador escalar  $A$  vale*

$$\langle k', j', m' | A | k, j, m \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} a(k, k', j), \quad (34)$$

onde  $a(k, k', j) \in \mathbb{C}$  independe de  $m$ .

Uma tripla de operadores  $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z)$  é chamado de *operador vetor* se para todo  $k, l \in \{x, y, z\}$  vale a relação de comutação

$$[J_k, V_l] = \sum_{m \in \{x, y, z\}} i\hbar \varepsilon_{klm} V_m. \quad (35)$$

Neste caso, define-se  $V_{\pm} \doteq V_x \pm iV_y$ .

**Teorema 6 (Wigner-Eckart — Caso particular)**

$$\langle k', j', m' | V_{\pm} | k, j, m \rangle = 0 \quad \text{se } m' \neq m \pm 1 \quad (36)$$

$$\langle k', j', m' | V_z | k, j, m \rangle = 0 \quad \text{se } m' \neq m. \quad (37)$$

Ademais,

$$\langle k, j, m' | \mathbf{V} | k, j, m \rangle = \alpha(k, j) \langle k, j, m' | \mathbf{J} | k, j, m \rangle \quad \text{onde} \quad (38)$$

$$\alpha(k, j) = \frac{\langle \mathbf{V} \cdot \mathbf{J} \rangle_{\phi}}{j(j+1)\hbar^2}. \quad (39)$$

Aqui,  $\phi$  é um vetor arbitrário em  $\mathcal{E}_{k,j} \doteq \text{span} \{|k, j, m\rangle, -j \leq m \leq j\}$ .

## 2.5 Elétron no campo magnético uniforme e elétrico

[1, Vol. 1: D<sub>VII</sub>]

### 2.5.1 Generalidades

Clássicamente, o Hamiltoniano de uma partícula de massa  $m$  e carga  $q$  nos campos  $\mathbf{E} = -\nabla V - \dot{\mathbf{A}}$  e  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  é

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + qV(\mathbf{x}). \quad (40)$$

(Pois as equações de Hamilton são equivalentes com  $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$  mais a segunda Lei de Newton com a força de Lorentz,  $m\ddot{\mathbf{x}} = q(\mathbf{E} + \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B})$ .) Na descrição quântica do elétron, usaremos o mesmo Hamiltoniano, substituindo os observáveis pelos operadores correspondentes na representação de Schrödinger:  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ , e  $\mathbf{A}(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{X})$ ,  $V(\mathbf{x}) \rightarrow V(\mathbf{X})$ , agindo como operadores de multiplicação, por exemplo

$$(V(\mathbf{X})\psi)(\mathbf{x}) \doteq V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}).$$

No caso de  $(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2$ , tem o problema do ordenamento dos operadores  $P_k$  e  $A_k(\mathbf{X})$ . Aqui, adotamos a receita simétrica

$$(\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{X}))^2 \doteq \mathbf{P}^2 + q^2 \mathbf{A}^2 - q(\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}). \quad (41)$$

(Essa receita pode ser justificada só pelo sucesso.)

O spin do elétron também interage com o campo magnético, através do potencial  $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ , onde  $\boldsymbol{\mu}$  é o momento de dipolo magnético associado com o spin. Da experiência de Stern-Gerlach sabemos que para spin 1/2, o momento de dipolo magnético é  $\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{m} \mathbf{S}$ , onde  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$  são os operadores do spin agindo em  $\mathbb{C}^2$ .<sup>6</sup> Resumindo, o Hamiltoniano descrevendo o elétron no campo eletromagnético é

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + qV - \frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}, \quad (42)$$

entendendo  $\mathbf{A}$ ,  $V$  e  $\mathbf{B}$  como operadores de multiplicação e entendendo a simetriação (41). A equação de Schrödinger correspondente é a *Equação de Pauli*.

No seguinte, consideramos um campo magnético *uniforme*,  $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$ . O potencial vetor pode ser escolhido como  $\mathbf{A} \doteq \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{X}$ , pois

$$\nabla \times \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{x}) = \frac{1}{2}[(\nabla \cdot \mathbf{x})\mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{x}] = \frac{1}{2}[3\mathbf{B} - \mathbf{B}] = \mathbf{B}.$$

Com essa escolha, calcula-se

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{P} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{X}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{X} \times \mathbf{P}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad (43)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{X}) \cdot \mathbf{P} = \frac{1}{2}(\mathbf{X} \times \mathbf{P}) \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad (44)$$

onde  $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$  é o momento angular orbital. (Observe que  $\mathbf{L}$  comuta com  $\mathbf{B}$  pois  $\mathbf{B}$  é constante.) Resumindo, temos

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_s \quad \text{com} \quad (45)$$

$$H_0 = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + qV, \quad H_2 = \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 \quad (46)$$

$$H_1 = -\frac{q}{2m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad H_s = -\frac{q}{m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}. \quad (47)$$

Para discutir as ordens de grandeza dos termos, introduzimos o magneton de Bohr  $\mu_B$  e a frequência de Larmor  $\omega_L$ ,

$$\mu_B \doteq \frac{q\hbar}{2m} < 0, \quad \omega_L \doteq \frac{|q|B}{2m}.$$

Observe que para o elétron, a carga  $q$  e consequentemente  $\mu_B$  são negativos.

<sup>6</sup>Tomando em consideração..., vale  $\boldsymbol{\mu} = g \frac{q}{2m} \mathbf{S}$ , com  $g = 2,00023 \dots$  o fator giromagnético.

### 2.5.2 Efeito Zeeman “normal”

Literatura: [1, D<sub>VII</sub>, p. 835]. Consideramos o átomo de H no campo  $B$  homogêneo, desprezando o spin. O campo  $B$  deforma as frequências e as polarizações das linhas atômicas. Para analisar a mudança de frequências consideremos as auto-energias. Já para analisar as polarizações, vamos considerar o valor esperado do momento de dipolo,  $\mathbf{D} \doteq q\mathbf{X}$ , numa superposição dos dois estados que participam na linha atômica considerada. Esse valor esperado oscila. Analisaremos a radiação produzida por um dipolo clássico oscilante  $\mathbf{d}(t) \doteq \langle \mathbf{D} \rangle_t$ , e supomos (como [1] faz) que ela tem a mesma característica como a luz emitida *espontaneamente na transição* entre os dois estados. Isso vale aproximadamente, porém, vale enfatizar que a emissão espontânea é outra coisa e deve ser tratada pela EDQ, enquanto que nosso modelo do elétron, fixado pelo Hamiltoniano (42), *não* prevê nenhuma radiação (ou outra perda de energia)!

Desprezando  $H_2$  e o spin, temos  $H = H_0 + H_1$ . Na BON  $\phi_{nlm} = |nlm\rangle$  temos

$$\begin{aligned} H_0\phi_{nlm} &= E_n \cdot \phi_{nlm} \\ H_1\phi_{nlm} &\equiv \omega_L L_z \phi_{nlm} = m\hbar\omega_L \cdot \phi_{nlm} \\ H\phi_{nlm} &= (E_n + m\hbar\omega_L) \cdot \phi_{nlm} \end{aligned}$$

(Degenerescência removida!) Consideramos em particular a transição (1s)  $\rightarrow$  (2p), ou seja  $\phi_{100} \rightarrow \phi_{21m}$  (a chamada linha de ressonância).

$$H\phi_{100} = E_1 \cdot \phi_{100}, \quad H\phi_{21m} = (E_2 + m\hbar\omega_L) \cdot \phi_{21m}. \quad (48)$$

A diferença de frequências é  $\Delta\nu = \Omega + m\omega_L$ , onde  $\Omega \doteq (E_2 - E_1)/\hbar$  é a diferença de frequências sem campo  $B$ . (Lembrando que  $E_1 = -E_I \cong -13$  eV, e  $E_2 = \frac{1}{4}E_1$ , temos  $\Omega = \frac{3}{4\hbar}E_I$ .)

Para determinar as polarizações, consideramos o valor esperado do operador do momento de dipolo (??) no estado inicialmente descrito por  $\psi^m \doteq c_1\phi_{100} + c_2\phi_{21m}$ . A solução da equação de Schrödinger com essa condição inicial é

$$\psi_t^m = c_1 e^{-it\omega_1} \phi_{100} + c_2 e^{-it\omega_2^m} \phi_{21m}, \quad \omega_1 \doteq E_1/\hbar, \quad \omega_2 \doteq E_2/\hbar, \quad \omega_2^m \doteq \omega_2 + m\omega_L. \quad (49)$$

**Lemma 7** *Vale*

$$\langle 100|\mathbf{D}|100\rangle = 0, \quad \langle 21m'|\mathbf{D}|21m\rangle = 0 \quad (50)$$

$$\langle 100|D_{x,y}|nl0\rangle = 0, \quad \langle n'l'm'|D_z|nlm\rangle = 0, \quad \text{se } m' \neq m. \quad (51)$$

*Comprovante.* Isso é parcialmente consequência do Teorema de Wigner-Eckart: A Eq. (51) segue da Eq. (36) do Teorema e o fato que  $D_x, D_y$  são combinações lineares de  $D_+, D_-$ . A equação esquerda em (50) segue da Eq. (38) e do fato que  $\langle 100|\mathbf{L}|100\rangle = 0$ . A equação direita em (50) pode ser mostrado usando a noção de *paridade*. O operador paridade  $\Pi$  é definido, na representação de Schrödinger, por

$$(\Pi\psi)(\mathbf{x}) \doteq \psi(-\mathbf{x}).$$

Ele é hermiteano e unitário,  $\Pi^{-1} = \Pi = \Pi^*$ . Chamamos um vetor  $\psi$  de *par/impar* se  $\Pi\psi = \pm\psi$ , e chamamos um operador  $A$  de par/impar se  $\Pi^{-1}A\Pi = \pm A$ . Os esféricos

harmônicos  $Y_{lm}$  tem paridade  $\Pi Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}$ , e o mesmo vale para os  $\phi_{nlm}$ . Por outro lado, os componentes do operador multiplicação  $\mathbf{X}$  são ímpares, eg.  $\Pi^{-1}Z\Pi = -Z$ . Daí,

$$(\phi_{nlm'}, Z\phi_{nlm}) \equiv (-1)^{2l}(\Pi\phi_{nlm'}, Z\Pi\phi_{nlm}) = (\phi_{nlm'}, \Pi^{-1}Z\Pi\phi_{nlm}) = -(\phi_{nlm'}, Z\phi_{nlm}),$$

daí  $(\phi_{nlm'}, Z\phi_{nlm}) = 0$ . Similar para os componentes  $X$  e  $Y$ .  $\square$

Calcula-se também [1, p. 387]

$$\langle 100|X|211\rangle = -\langle 100|X|21, -1\rangle = -\frac{\chi}{\sqrt{6}} \quad (52)$$

$$\langle 100|Y|211\rangle = \langle 100|Y|21, -1\rangle = -i\frac{\chi}{\sqrt{6}} \quad (53)$$

$$\langle 100|Z|210\rangle = \frac{\chi}{\sqrt{3}}, \quad (54)$$

onde  $\chi \doteq (R_{10}, rR_{21}) = \int_0^\infty dr r^3 \overline{R_{10}(r)} R_{21}(r)$ . As Eq.s (50) – (54) implicam

$$\langle 100|\mathbf{D}|210\rangle = q\frac{\chi}{\sqrt{3}}\hat{z} \quad (55)$$

$$\langle 100|\mathbf{D}|211\rangle = -q\frac{\chi}{\sqrt{6}}(\hat{x} + i\hat{y}) \quad (56)$$

$$\langle 100|\mathbf{D}|21, -1\rangle = q\frac{\chi}{\sqrt{6}}(\hat{x} - i\hat{y}) \quad (57)$$

A evolução temporal do valor esperado é

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{\psi_t^m} = 2\Re[ce^{-it(\omega_2^m - \omega_1)} \langle 100|\mathbf{D}|21m\rangle], \quad c \doteq \bar{c}_1 c_2.$$

Supondo que  $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ , e escrevendo  $\omega_2^m - \omega_1 = \Omega + m\omega_L$  com  $\Omega \doteq \omega_2 - \omega_1$ , temos

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{\psi_t^0} = 2qc\frac{\chi}{\sqrt{3}}\cos(\Omega t)\hat{z} \quad (58)$$

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{\psi_t^1} = -2qc\frac{\chi}{\sqrt{6}}[\cos((\Omega + \omega_L)t)\hat{x} + \sin((\Omega + \omega_L)t)\hat{y}] \quad (59)$$

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{\psi_t^{-1}} = 2qc\frac{\chi}{\sqrt{6}}[\cos((\Omega - \omega_L)t)\hat{x} - \sin((\Omega - \omega_L)t)\hat{y}] \quad (60)$$

A radiação produzida por um dipolo clássico oscilante  $\mathbf{d}(t) \doteq \langle \mathbf{D} \rangle_{\psi_t^m}$  tem as seguintes propriedades: Para  $m = 0$ , a luz emitida é polarizada linearmente; a intensidade é maximal nas direções perpendiculares a  $\hat{z}$ , e zero na direção  $\hat{z}$ . Para  $m = \pm 1$ , a luz emitida é polarizada elípticamente, em particular: A polarização é circular na direção  $\hat{z}$  e linear nas direções perpendiculares a  $\hat{z}$ .

A linha de ressonância do átomo de hidrogênio é mais complexa devido ao spin do elétron e pósitron (estrutura fina e hiperfina), porém qualitativamente os resultados obtidos aqui coincidem com as observações.

### 2.5.3 Fator de Landé

[1, D<sub>X</sub>.3]

### 2.5.4 Acoplamento $J$ - $J$

Literatura: [1, F<sub>X</sub>]. Consideramos dois momenta angulares  $\mathbf{J}_{(\nu)}$  agindo nos espaços de Hilbert respetivos  $\mathcal{H}_{\nu}$ ,  $\nu = 1, 2$ . Eles adicionam um interação da forma

$$H_1 \doteq a\mathbf{J}_{(1)} \cdot \mathbf{J}_{(2)}$$

ao Hamiltoniano. Clássicamente, a evolução temporal desse acoplamento é dada por

$$\frac{d}{dt}\mathbf{J}_{(1)} = a\mathbf{J} \times \mathbf{J}_{(1)}. \quad (61)$$

com  $|\mathbf{J}_{(1)}|, |\mathbf{J}_{(2)}|, \mathbf{J}_{(1)} \cdot \mathbf{J}_{(1)}$  e  $\mathbf{J}$  constantes. Isso é uma precessão dos vetores  $\mathbf{J}_{(1)}$  e  $\mathbf{J}_{(2)}$  em torno do momento total  $\mathbf{J} \doteq \mathbf{J}_{(1)} + \mathbf{J}_{(2)}$  (que por sua vez é constante).

Na MQ, vamos supor que o Hamiltoniano total seja  $H_0 + H_1$ , onde  $H_0$  comuta com os momenta angulares  $\mathbf{J}_{(\nu)}$ . Nesse caso, a evolução temporal do valor esperado é dada por

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{J}_{(1)} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{J}_{(1)}, H_1] \rangle_t = \dots = -a\langle \mathbf{J}_{(1)} \times \mathbf{J}_{(2)} \rangle_t = a\langle \mathbf{J} \times \mathbf{J}_{(1)} \rangle_t.$$

Isso difere da evolução clássica (61) em que  $\langle \mathbf{J} \times \mathbf{J}_{(1)} \rangle \neq \langle \mathbf{J} \rangle \times \langle \mathbf{J}_{(1)} \rangle$  em geral. [1]: ...

## 3 Teoria de perturbação independente de tempo

### 3.1 O método

Consideramos um Hamiltoniano da forma  $H = H_0 + W$ ,  $H_0$  e  $W$  auto-adjuntos, onde nos conhecemos a diagonalização de  $H_0$ , mas não de  $H$ . A tarefa é achar aproximadamente os autovalores e autovetores de  $H$  por um algoritmo iterativo.

O termo  $H_0$  será chamado de “Hamiltoniano livre”, e o termo  $W$  de “perturbação”. Seja  $\{\varphi_{n,i} \mid n \in \mathbb{N}, i = 1, \dots, d_n\}$  uma BON de autovetores<sup>7</sup> do Hamiltoniano livre  $H_0$  com auto-valores respetivos  $E_n^{(0)}$ :

$$H_0 \varphi_{n,i} = E_n^{(0)} \varphi_{n,i}. \quad (62)$$

Para achar os auto-vetores e auto-valores do Hamiltoniano  $H = H_0 + W$ , definimos

$$H(\lambda) \doteq H_0 + \lambda W, \quad \lambda \in [0, 1], \quad (63)$$

e tentamos resolver, para cada  $\lambda \in [0, 1]$ , a equação

$$H(\lambda) \psi(\lambda) = E(\lambda) \psi(\lambda). \quad (64)$$

A hipótese crucial é que  $E(\lambda)$  e  $\psi(\lambda)$  dependem analiticamente de  $\lambda$ , permitindo as expansões

$$E(\lambda) = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots, \quad \psi(\lambda) = \psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \lambda^2 \psi^{(2)} + \dots \quad (65)$$

<sup>7</sup>Discutimos o caso discreto de autovetores (e não vetores generalizados), ou seja, o caso de estados ligados, veja a discussão depois do teorema espectral em [4, p. 22].

Substituindo na Eq. (64), os dois lados dessa equação viram

$$\begin{aligned} H(\lambda) \psi(\lambda) &= H_0 \psi^{(0)} + \lambda(H_0 \psi^{(1)} + W \psi^{(0)}) + \dots + \lambda^\nu(H_0 \psi^{(\nu)} + W \psi^{(\nu-1)}) + \dots \\ E(\lambda) \psi(\lambda) &= E^{(0)} \psi^{(0)} + \lambda(E^{(0)} \psi^{(1)} + E^{(1)} \psi^{(0)}) + \dots + \lambda^\nu(E^{(0)} \psi^{(\nu)} + \dots + E^{(\nu)} \psi^{(0)}) + \dots \end{aligned}$$

Comparando termo a termo, resulta na sequência de equações

$$(H_0 - E^{(0)}) \psi^{(0)} = 0 \quad (66)$$

$$(H_0 - E^{(0)}) \psi^{(1)} = -(W - E^{(1)}) \psi^{(0)} \quad (67)$$

$$(H_0 - E^{(0)}) \psi^{(2)} = -(W - E^{(1)}) \psi^{(1)} + E^{(2)} \psi^{(0)}, \quad (68)$$

e em  $\nu$ -ésima ordem

$$(H_0 - E^{(0)}) \psi^{(\nu)} = -(W - E^{(1)}) \psi^{(\nu-1)} + E^{(2)} \psi^{(\nu-2)} + \dots + E^{(\nu)} \psi^{(0)}. \quad (69)$$

Eq. (66) quer dizer que  $\psi^{(0)}$  é um dos auto-vetores de  $H_0$  e  $E^{(0)}$  é a auto-energia correspondente. Supomos que  $\psi^{(0)}$  seja normalizado, e que  $E^{(0)}$  é a  $n$ -ésima auto-energia,  $E^{(0)} = E_n^{(0)}$ . Então  $\psi^{(0)}$  deve ser contido no auto-espaço correspondente,

$$\mathcal{E}_n \doteq \{\psi \in \mathcal{H} \mid H_0 \psi = E_n^{(0)} \psi\} \equiv \text{span}\{\varphi_{n,i} \mid i = 1, \dots, d_n\}.$$

Denotamos por  $P_n$  o projetor sobre esse espaço. Aplicando esse projetor nos dois lados da Eq. (67) e observando que ele anula o lado esquerdo, resulta em

$$(P_n W P_n - E^{(1)}) \psi^{(0)} = 0. \quad (70)$$

(Aqui também usamos que  $P_n \psi^{(0)} = \psi^{(0)}$ .) Em outras palavras,  $\psi^{(0)}$  não é apenas qualquer auto-vetor de  $H_0$  em  $\mathcal{E}_n$ , mas também é um auto-vetor de  $P_n W P_n$  (a restrição de  $W$  no subespaço  $\mathcal{E}_n$ ), e  $E^{(1)}$  é o auto-valor correspondente.

Com isso,  $E^{(0)}$ ,  $\psi^{(0)}$  e  $E^{(1)}$  são determinados. Para determinar  $\psi^{(1)}$ , aplicamos o projetor sobre o complemento ortogonal de  $\mathcal{E}_n$ ,

$$P_n^\perp \doteq \mathbf{1} - P_n,$$

na Eq. (67). Isso resulta em

$$(H_0 - E^{(0)}) P_n^\perp \psi^{(1)} = -P_n^\perp W \psi^{(0)}$$

(No lado esquerdo, usamos que  $P_n^\perp$  comuta com  $H_0$ , e no lado direito usamos que  $P_n^\perp \psi^{(0)} = 0$ .) Mas no complemento ortogonal de  $\mathcal{E}_n$  o operador  $H_0 - E^{(0)}$  é invertível; então temos

$$P_n^\perp \psi^{(1)} = -(H_0 - E^{(0)})^{-1} P_n^\perp W \psi^{(0)} \quad (71)$$

$$\equiv - \sum_{n' \neq n} \sum_{i=1}^{d_{n'}} (E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)})^{-1} (\varphi_{n',i}, W \psi^{(0)}) \varphi_{n',i}. \quad (72)$$

A componente de  $\psi^{(1)}$  em  $\mathcal{E}_n$ ,  $P_n \psi^{(1)}$ , fica indeterminada em geral (mas no caso não-degenerado pode ser fixada por convenções, ver abaixo).

Para determinar  $E^{(2)}$ , fazemos o produto escalar dos dois lados da Eq. (68) com  $\psi^{(0)}$ . Observando que o lado esquerdo dá zero e que  $\psi^{(0)}$  é normalizado, isso resultando na equação

$$\begin{aligned} E^{(2)} &= (\psi^{(0)}, (W - E^{(1)})\psi^{(1)}) \\ &= (\psi^{(0)}, (W - E^{(1)})P_n^\perp\psi^{(1)}) + (\psi^{(0)}, (W - E^{(1)})P_n\psi^{(1)}) \\ &= (\psi^{(0)}, (W - E^{(1)})P_n^\perp\psi^{(1)}) \stackrel{(a)}{=} (\psi^{(0)}, WP_n^\perp\psi^{(1)}). \end{aligned} \quad (73)$$

Na segunda equação inserimos  $P_n + P_n^\perp = \mathbf{1}$ . O segundo termo na segunda linha se anula por causa da Eq. (70),

$$(\psi^{(0)}, (W - E^{(1)})P_n\psi^{(1)}) = (P_n(W - E^{(1)})\psi^{(0)}, \psi^{(1)}) = 0$$

(observando que  $P_n$  e  $W$  são operadores auto-adjuntos). Na última equação, (73) (a), observamos que o termo com  $E^{(1)}$  não contribui devido ao fato  $(\psi^{(0)}, P_n^\perp\psi^{(1)}) \equiv (P_n^\perp\psi^{(0)}, \psi^{(1)}) = 0$ . Substituindo as Eqs. (71) e (72), respetivamente, obtemos

$$E^{(2)} = -(W\psi^{(0)}, (H_0 - E^{(0)})^{-1}P_n^\perp W\psi^{(0)}) \quad (74)$$

$$\equiv - \sum_{n' \neq n} \sum_{i=1}^{d_{n'}} (E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)})^{-1} |(\varphi_{n',i}, W\psi^{(0)})|^2. \quad (75)$$

Para determinar  $\psi^{(2)}$ , aplicamos  $P_n^\perp$  na equação (68), dando

$$P_n^\perp\psi^{(2)} = -(H_0 - E^{(0)})^{-1}P_n^\perp(W - E^{(1)})\psi^{(1)}. \quad (76)$$

Porém, a componente  $P_n\psi^{(2)}$  não é determinada. Para adiantar, consideramos

**O caso não-degenerado** ( $d_n = 1$ ). No caso não-degenerado, as componentes dos  $\psi^{(\nu)}$  em  $\mathcal{E}_n$ ,  $P_n\psi^{(\nu)} \equiv (\psi^{(0)}, \psi^{(\nu)})\psi^{(0)}$ , são fixadas pela convenção de normalização. Nos adotamos a seguinte **condição de normalização**

$$(\psi(0), \psi(\lambda)) = 1 \quad \forall \lambda \in [0, 1]. \quad (77)$$

(Pode ser satisfeita: Exercício! *Aviso:* O Cohen-Tannoudji usa a condição de normalização que  $\|\psi(\lambda)\| = 1$ !) Como se verifica facilmente, isso é equivalente a

$$(\psi^{(0)}, \psi^{(\nu)}) = \delta_{0,\nu} \quad \forall \nu \in \mathbb{N}_0, \quad (78)$$

o que implica  $P_n\psi^{(\nu)} = 0$  ou seja,  $P_n^\perp\psi^{(\nu)} = \psi^{(\nu)}$  para  $\nu \geq 1$ .

Agora a Eq. (70) vira simplesmente

$$E^{(1)} = (\psi^{(0)}, W\psi^{(0)}). \quad (79)$$

O vetor  $\psi^{(1)}$  é completamente determinado, a saber, dado pela Eq. (71). Também o lado esquerdo da Eq. (76) é justamente  $\psi^{(2)}$ :

$$\psi^{(2)} = -(H_0 - E_n^{(0)})^{-1}P_n^\perp(W - E_n^{(1)})\psi^{(1)}. \quad (80)$$



Analogamente, aplicando o projetor  $P_n^\perp$  em (69), obtem-se para  $\nu > 2$

$$\psi^{(\nu)} = (H_0 - E_n^{(0)})^{-1} \{ -P_n^\perp(W - E_n^{(1)})\psi^{(\nu-1)} + E^{(2)}\psi^{(\nu-2)} + \dots + E^{(\nu-1)}\psi^{(1)} \}. \quad (81)$$

Para a energia na  $\nu$ -ésima ordem ( $\nu > 2$ ), fazemos o produto escalar dos dois lados da Eq. (69) com  $\psi^{(0)}$ . Usando a condição (78), obtemos

$$E^{(\nu)} = (\psi^{(0)}, W\psi^{(\nu-1)}). \quad (82)$$

Com isso, a Eq. (64) pode ser resolvida até qualquer ordem  $\nu$ , a saber, determinando consecutivamente  $E^{(1)}$ ,  $\psi^{(1)}$ ,  $E^{(2)}$ ,  $\psi^{(2)}$ , etc., até  $E^{(\nu)}$ ,  $\psi^{(\nu)}$ .

### 3.2 Método variacional

Seja  $H$  o nosso Hamiltoniano. A aplicação  $\psi \mapsto \langle H \rangle_\psi$  (valor esperado) é um funcional não-linear de  $\mathcal{H}$  nos números reais.

**Definição 8** Seja  $F$  uma aplicação de  $\mathcal{H}$  em  $\mathbb{C}$  (um funcional), e  $\psi \in \mathcal{H}$ .

*i)* A derivada de  $F$  em  $\psi$ , em símbolos  $DF(\psi)$ , é a aplicação (funcional) linear de  $\mathcal{H}$  em  $\mathbb{C}$ ,  $DF(\psi) : \chi \mapsto \langle DF(\psi), \chi \rangle$  definida por

$$\langle DF(\psi), \chi \rangle \doteq \frac{d}{ds} F(\psi + s\chi)|_{s=0}.$$

*ii)*  $\psi$  é um ponto estacionário de  $F$  se a derivada de  $F$  em  $\psi$  é nula, ou seja, se para todos  $\chi \in \mathcal{H}$  vale  $\frac{d}{ds} F(\psi + s\chi)|_{s=0} = 0$ .

**Teorema 9 (Ritz)** *Seja  $H$  um operador auto-adjunto. O funcional  $\phi \mapsto \langle H \rangle_\phi$  (definido no domínio de  $H$ ) é estacionário em  $\psi$  se e somente se  $\psi$  é um autovetor de  $H$ .*

*Comprovante.* A direção “ $\Leftarrow$ ” é óbvia. Para mostrar “ $\Rightarrow$ ”, vamos supor que o valor esperado seja estacionário em  $\psi$ . Usando a regra de quociente para derivada, chegamos em

$$\frac{d}{ds} \langle H \rangle_{\psi+s\chi}|_{s=0} = \frac{2\Re(\psi, H\chi)\|\psi\|^2 - (\psi, H\psi)2\Re(\psi, \chi)}{\|\psi\|^4}.$$

Por hipótese, isso é zero para todos  $\chi$ . Substituindo  $\chi$  por  $i\chi$ , e usando o fato que  $H$  é auto-adjunto, isso implica  $(H\psi, \chi) = \langle H \rangle_\psi (\psi, \chi)$  para todos  $\chi$ , que por sua vez implica conclusão do teorema, com autovalor correspondente  $E = \langle H \rangle_\psi$ .  $\square$

**Princípio Minimax.** Vamos supor que o Hamiltoniano possui espectro puramente discreto, ou seja, que existe uma BON de autovetores  $\varphi_n$  com  $H\varphi_n = E_n \cdot \varphi_n$ . (Aqui denotamos o autovalor com o mesmo índice como o vetor: No caso de degenerescência pode acontecer que  $E_n = E_{n'}$  para  $n \neq n'$ .) Vamos ordenar os auto-valores  $E_n$  tal que  $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$ . Mostra-se facilmente que a energia fundamental  $E_0$  é dada pelo ínfimo dos valores esperados,

$$E_0 = \inf_{\psi \in D(H)} \langle H \rangle_\psi. \quad (83)$$

(Aqui,  $D(H)$  denota o domínio do operador  $H$ .) Se  $\varphi_0$  é conhecido, o próximo autovalor  $E_1$  pode ser encontrado pelo mesmo método, aplicado no complemento ortogonal de  $\varphi_0$ :

$$E_1 = \inf_{\psi \in \varphi_0^\perp} \langle H \rangle_\psi. \quad (84)$$

(Deixamos de anotar que  $\psi$  também deve ficar no domínio de  $H$ .) Mas até sem conhecer o autovetor  $\varphi_0$  dá para encontrar o autovalor  $E_1$ : Para todo  $\phi \in \mathcal{H}$  vale (*exercício!*)

$$\inf_{\psi \in \phi^\perp} \langle H \rangle_\psi \leq \inf_{\psi \in \varphi_0^\perp} \langle H \rangle_\psi.$$

Conclue-se que

$$E_1 = \sup_{\phi \in \mathcal{H}} \inf_{\psi \in \phi^\perp} \langle H \rangle_\psi. \quad (85)$$

Isso é o princípio minimax. Similarmente, mostra-se para todo  $n$ :

$$E_n = \sup_{\phi_1, \dots, \phi_n \in \mathcal{H}} \inf_{\psi \in (\phi_1, \dots, \phi_n)^\perp} \langle H \rangle_\psi, \quad (86)$$

onde  $(\phi_1, \dots, \phi_n)^\perp$  é o complemento ortogonal do span dos vetores  $\phi_1, \dots, \phi_n$ .

### 3.3 Exemplos: Estrutura fina e hiperfina do átomo de hidrogênio

## 4 Teoria de perturbação dependente de tempo

Consideramos um Hamiltoniano dependente do tempo  $H(t)$ , e procuramos a solução da equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_t = H(t) \psi_t. \quad (87)$$

Nesse caso, não é suficiente achar os auto-valores e vetores de cada  $H(t)$ . Um método perturbativo de achar soluções aproximativas é a série de Dyson, veja Seção 4.1. Ela funciona bem quando  $H(t)$  é da forma

$$H(t) = H_0 + W(t), \quad (88)$$

onde  $W(t)$  é uma família de operadores auto-adjuntos, e a diagonalização de  $H_0$  é conhecida. Nesse caso, a Série de Dyson será aplicada no chamado cenário de interação, veja Seção 4.2.

### 4.1 Série de Dyson

Literatura: Messiah, Vol. II, Cap. XVIII.

**Proposição 10** *Seja  $H(t)$  uma família de operadores auto-adjuntos satisfazendo certas condições [6]. Então a solução  $\psi_t$  da Equação de Schrödinger (87), com  $\psi_0$  dado, é única. Ela é da forma  $\psi_t = U(t, 0) \psi_0$ , onde  $U(t, s)$ ,  $s, t \in \mathbb{R}$ , é uma família de operadores unitários com as seguintes propriedades:*

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, s) = H(t) \circ U(t, s) \quad (89)$$

$$U(t, t) = \mathbf{1}, \quad (90)$$

$$U(t, r) \circ U(r, s) = U(t, s) \quad (91)$$

para todo  $t, r, s \in \mathbb{R}$ .

Observe que essas relações implicam  $U(t, s)^{-1} = U(s, t)$  e

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(s, t) = -U(s, t) \circ H(t). \quad (92)$$

A EDO (89) com condição inicial (90) possui uma única solução, e ela satisfaz a relação (91). Reciprocamente, a relação (91), sob a condição apropriada de diferenciabilidade, implica na EDO (89). (*Exercício*: Como definir  $H(t)$ ?)

Uma tal família  $\{U(t, s)\}_{t, s \in \mathbb{R}}$  é chamada de família de propagadores ou *evolução temporal* para a família  $H(t)$ .

Uma solução formal da EDO (89) com condição inicial (90) é dada pela série de Dyson,

$$\begin{aligned} U(t, s) &= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \cdots \int_s^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \cdots H(t_n) \\ &= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i/\hbar)^n}{n!} \int_s^t dt_1 \cdots \int_s^t dt_n T[H(t_1) \cdots H(t_n)]. \end{aligned} \quad (93)$$

Aqui,  $T[\dots]$  é o produto *temporalmente ordenado*,

$$T[H(t_1) \cdots H(t_n)] \doteq H(t_{\pi(1)}) \cdots H(t_{\pi(n)}) \quad (94)$$

quando  $\pi$  é uma permutação tal que  $t_{\pi(1)} \geq t_{\pi(2)} \cdots \geq t_{\pi(n)}$ . Obviamente, isso é uma função totalmente simétrica em  $t_1, \dots, t_n$ :  $T[H(t_1) \cdots H(t_n)] = T[H(t_{\sigma(1)}) \cdots H(t_{\sigma(n)})]$  para qualquer permutação  $\sigma$ . Na Eq. (93) temos usado que para uma função  $f$  totalmente simétrica vale

$$\int_{t_1, \dots, t_n \in [s, t]} d^n \underline{t} f(\underline{t}) \equiv \sum_{\pi \in S_n} \int_{t_{\pi(1)} \geq \dots \geq t_{\pi(n)}} d^n \underline{t} f(\underline{t}) \stackrel{(a)}{=} \sum_{\pi \in S_n} \int_{t_1 \geq \dots \geq t_n} d^n \underline{t} f(\underline{t}) = n! \int_{t_1 \geq \dots \geq t_n} d^n \underline{t} f(\underline{t}).$$

(A equação (a) vale por causa da simetria.) Porém, para grandes  $|t - s|$ , os primeiros termos dessa série *não* são uma boa aproximação: Por exemplo, se  $H$  é constante, temos

$$U(t, s) = e^{-i(t-s)H/\hbar} = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}(t-s)H + \dots,$$

que é uma péssima aproximação. Isso melhora em situações quando  $H(t)$  é da forma (88) e nos “subtraímos” a evolução livre descrita por  $H_0$ :

## 4.2 Cenário de interação

Consideramos uma família  $H(t)$  da forma (88). No princípio,  $H_0$  pode também depender do tempo. Denotamos por  $U(t, s)$  a evolução temporal para  $H(t)$ , e denotamos por  $U_0(t, s)$  a evolução temporal para  $H_0$ . A *evolução temporal no cenário de interação* é definida por

$$U^I(t, s) \doteq U_0(0, t) U(t, s) U_0(s, 0). \quad (95)$$

É simples verificar que essa família satisfaz as relações (90) e (91). Consequentemente, ela deve ser a evolução temporal para alguma família de Hamiltonianas. Vamos calculá-las:

Usando as EDO's (89) e (92) temos

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^I(t, s) = U_0(0, t) (-H_0 + H(t)) U(t, s) U_0(s, 0) \quad (96)$$

$$\equiv W^I(t) U^I(t, s), \quad \text{onde} \quad (97)$$

$$W^I(t) \doteq U_0(0, t) W(t) U_0(t, 0). \quad (98)$$

Concluimos que a família  $U^I(t, s)$  é a evolução temporal para  $W^I(t)$ , definido acima.

Observe que no caso quando  $H_0$  independe de  $t$ , temos  $U_0(t, 0) = e^{-itH_0/\hbar}$  e  $U_0(0, t) = e^{itH_0/\hbar}$ , e conseqüentemente

$$W^I(t) = e^{itH_0/\hbar} W(t) e^{-itH_0/\hbar}.$$

**Probabilidades de transição.** Sejam  $\varphi_n$  os autovetores de  $H_0$  com respectivos autovalores  $E_n$ ,  $H_0\varphi_n = E_n\varphi_n$ . Queremos calcular a probabilidade  $P_{i \rightarrow n}$  de transição de um estado inicial  $\varphi_i$  para um estado final  $\varphi_n$  sob a evolução temporal completa descrita por um Hamiltoniano da forma (88),  $H(t) = H_0 + W(t)$ . Mais explicitamente, seja  $\psi_t$  o estado do sistema no tempo  $t$ , evoluindo conforme  $H(t)$ . Consideramos que o sistema inicialmente está no estado  $\varphi_i$ ,  $\psi_0 = \varphi_i$ . Temos então

$$\psi_t = U(t, 0)\varphi_i,$$

onde  $U(t, s)$  é a evolução temporal para  $H(t)$ . Queremos calcular a probabilidade de transição

$$P_{i \rightarrow n}(t) \doteq |(\varphi_n, \psi_t)|^2 = |(\varphi_n, U(t, 0)\varphi_i)|^2 = |(U_0(t, 0)^*\varphi_n, U^I(t, 0)\varphi_i)|^2. \quad (99)$$

Na última equação escremos  $U(t, 0) = U_0(t, 0)U^I(t, 0)$ , e jogamos o primeiro fator ao outro lado do produto escalar. Usando  $U_0(t, 0)^*\varphi_n = e^{itH_0/\hbar}\varphi_n = e^{itE_n/\hbar}\varphi_n$ , chegamos em

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |(\varphi_n, U^I(t, 0)\varphi_i)|^2. \quad (100)$$

Como  $U^I$  é a evolução temporal para  $W^I(t) \equiv e^{itH_0/\hbar} W(t) e^{-itH_0/\hbar}$ , a série de Dyson dá

$$(\varphi_n, U^I(t, 0)\varphi_i) = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{it'(E_n - E_i)/\hbar} (\varphi_n, W(t')\varphi_i) + \dots \quad (101)$$

Para  $n \neq i$  concluímos

$$P_{i \rightarrow n}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{it'\omega_{ni}(t')} (\varphi_n, W(t')\varphi_i) \right|^2 + \dots \quad (102)$$

(mais termos da ordem  $W^3$ ), onde  $\omega_{ni}(t) \doteq (E_n - E_i)/\hbar$ . Essa aproximação é boa se

$$\frac{|t|}{\hbar} |(\varphi_n, W(t')\varphi_i)| \ll 1.$$

### 4.3 Absorção e emissão induzida

### 4.4 Regra de ouro de Fermi

Consideramos um Hamiltoniano  $H_0$  cuja decomposição espectral possui uma parte discreta  $\mathcal{H}_p(H_0)$  e uma parte absolutamente contínua  $\mathcal{H}_{ac}(H_0)$ . A parte discreta correspondente aos estados ligados, e a parte  $\mathcal{H}_{ac}(H_0)$  correspondente aos estados de espalhamento, veja Teorema 12. Queremos discutir a situação quando um estado ligado evolui com o tempo, por uma perturbação  $W$  da dinâmica, num estado de espalhamento.

Recordamos que o espaço de estados de espalhamento é gerado por uma BON contínua de autovetores impróprios [3,4]  $\{\chi_{k,j}, k \in \Omega \subset \mathbb{R}^n, j = 1, \dots, d(k)\}$  do Hamiltoniano  $H$ ,

$$\int_{\Omega} d^n k \sum_{j=1}^n |\chi_{k,j}\rangle \langle \chi_{k,j}| = \mathbf{1} \ , \quad H \chi_{k,j} = E(k) \cdot \chi_{k,j} \ .$$

Pegamos  $E(k)$  como uma das coordenadas em  $\Omega$ , fazemos transformação de variáveis  $(k, j) \rightarrow (E, \beta)$  e escrevemos  $\chi_{k,j} = |E, \beta\rangle$ . Com isso, temos

$$\int_0^{\infty} dE \int_{\Omega'} d^n \beta \varrho(E, \beta) |E, \beta\rangle \langle E, \beta| = \mathbf{1} \ , \quad H |E, \beta\rangle = E \cdot |E, \beta\rangle \ ,$$

onde  $\varrho(E, \beta)$  é a determinante Jacobiana da transformação, no contexto chamada de *densidade de estados*. Os variáveis  $\beta \in \Omega'$  são os autovalores de observáveis que completam  $\{H\}$  para um CSCO.<sup>8</sup>

Consideramos agora a adição de uma perturbação  $W$ ,

$$H \doteq H_0 + W \ ,$$

e consideramos um estado  $\psi$  que inicialmente é um auto-estado de  $H_0$ ,  $\psi_0 = \varphi_i$  com  $H_0 \varphi_i = E_i \cdot \varphi_i$ . Para  $I$  no espectro de  $H_0$  e  $J \in \Omega'$ , seja  $p_{I,J}(t)$  a probabilidade de encontrar, no tempo  $t$ , um valor da energia  $E \in I$  e um valor de  $\beta \in J$ . Temos

$$p_{I,J}(t) = \int_I dE \int_J d\beta \varrho(E, \beta) |\langle E, \beta | \psi_t \rangle|^2 \quad (103)$$

onde  $\psi_t = U(t, 0) \varphi_i$ . Usando o raciocínio da seção anterior, isso é em primeira ordem em  $W$ :

$$p_{I,J}(t) \simeq \frac{1}{\hbar^2} \int_I dE \int_J d\beta \varrho(E, \beta) \frac{\text{sen}^2(\omega t/2)}{(\omega/2)^2} |\langle E, \beta | W \varphi_i \rangle|^2 \quad (104)$$

<sup>8</sup>Por exemplo, para o Hamiltoniano livre, temos  $\Omega = \mathbb{R}^3$ ,  $d(\mathbf{k}) = 1$  para todo  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ , e uma BON contínua de autovetores é dada por  $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \doteq (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ . Em particular, temos

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{k} |\chi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \chi_{\mathbf{k}}| = \mathbf{1} \ , \quad H \chi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k}) \cdot \chi_{\mathbf{k}} \quad \text{com} \quad E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ .$$

(A primeira equação é o Teorema de Fourier.) Chamamos  $\chi_{\mathbf{k}} \doteq |E, \mathbf{n}\rangle$  com  $E \doteq E(k)$  e  $\mathbf{n} \doteq \mathbf{k}/|\mathbf{k}| \in S^2$ . A transformação de variáveis  $\mathbf{k} \mapsto (E, \mathbf{n})$  resulta em

$$\int_0^{\infty} dE \int_{S^2} d\Omega(\mathbf{n}) \varrho(E) |E, \mathbf{n}\rangle \langle E, \mathbf{n}| = \mathbf{1} \ ,$$

com densidade de estados  $\varrho(E) = \frac{m\sqrt{2mE}}{\hbar^3}$ , onde  $d\Omega(\mathbf{n}) = \text{sen} \theta d\theta d\varphi$  é a medida na esfera.

onde  $\omega \doteq (E - E_i)/\hbar$ . Para grandes  $t$ , usamos a relação  $\frac{\text{sen}^2(\omega t/2)}{(\omega/2)^2} \rightarrow 2\pi t \delta(\omega) = 2\pi t \hbar \delta(E - E_i)$ , e concluímos

$$p_{I,J}(t) \simeq t \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \int_I dE \int_J d\beta \varrho(E, \beta) |\langle E, \beta | W \varphi_i \rangle|^2 \quad (105)$$

se  $E_i \in I$  ( $e = 0$  se  $E_i \notin I$ ). Isso é a *regra de ouro de Fermi*.

## 5 Teoria de espalhamento

### 5.1 Seção de choque

Discutimos o espalhamento elástico de duas partículas com massas  $m_1$  e  $m_2$ , interagindo por um potencial da forma  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ . Num primeiro momento, a discussão será clássica. O processo considerado corresponde, no referencial de centro de massa, ao espalhamento de uma partícula com massa  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  pelo potencial  $V(\mathbf{r})$  (o “alvo”). Supondo que o potencial  $V$  seja de curto alcance e concentrado perto da origem, para tempos muito antes e muito depois do choque, o movimento da partícula pode ser suposto como retilinear (“assíntotas entrando e saindo”).

Começamos com a descrição clássica da experiência de colisão. O estado incidente ( $t \rightarrow -\infty$ ) é caracterizado pelo momento  $\mathbf{p}$  e o parâmetro de impacto: Isso é o ponto onde a assíntota entrando perfura um plano  $S$  perpendicular a  $\mathbf{p}$  (antes do alvo). O estado final ( $t \rightarrow \infty$ ) é caracterizado pelo ângulo sólido da assíntota saindo com a assíntota entrando, o qual pode ser identificado com um vetor normalizado  $\mathbf{n} \in S^2$ . (A norma  $|\mathbf{p}|$  do momento deve ser inalterada pela conservação da energia.) No princípio queremos saber, para cada

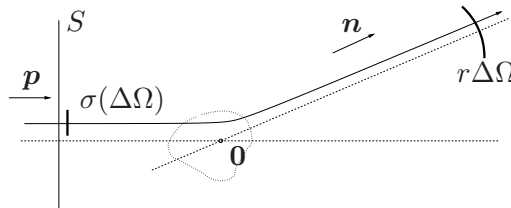


Figure 1: Visualização de  $\sigma(\Delta\Omega)$

$\mathbf{n} \in S^2$ , onde a partícula deve atravessar o plano  $S$  para que ela tenha a direção assintótica  $\mathbf{n}$  depois do espalhamento. Na prática, em vez de uma direção fixa  $\mathbf{n}$  consideramos um elemento de ângulo sólido  $\Delta\Omega \subset S^2$  e perguntamos qual elemento de superfície contida em  $S$  a partícula deve atravessar para que ela seja espalhada para dentro de  $\Delta\Omega \subset S^2$ . A área dessa superfície é a chamada *seção de choque*, em símbolos  $\sigma(\Delta\Omega)$ , ver figura 1. (A aplicação  $\Delta\Omega \mapsto \sigma(\Delta\Omega)$  é a maior informação sobre o potencial  $V$  que pode ser obtido por esse tipo de experiência.)

Para determinar a seção de choque, a experiência é repetida um grande número  $N$  de vezes, com frequência constante e com o parâmetro de impacto variando aleatoriamente, de tal maneira que o fluxo incidente  $F_{\text{in}}$  é homogêneo. Isso é o número de partículas que atravessam  $S$  por unidade de área e de tempo: Para uma pequena superfície  $\Delta S \subset S$

e um intervalo de tempo  $\Delta t$ , seja  $N_{\text{in}}(\Delta S, \Delta t)$  o número de partículas que atravessam a superfície  $\Delta S$  em  $\Delta t$ , e

$$n_{\text{in}}(\Delta S) \doteq \frac{N_{\text{in}}(\Delta S, \Delta t)}{\Delta t} \quad (106)$$

a taxa com qual as partículas atravessam  $\Delta S$ . (Suposto independente de  $t$ .) O fluxo é definido por

$$F_{\text{in}} := \frac{n_{\text{in}}(\Delta S)}{|\Delta S|} \equiv \frac{N_{\text{in}}(\Delta S, \Delta t)}{|\Delta S| \Delta t}, \quad (107)$$

onde  $|\Delta S|$  é a área de  $\Delta S$ . (Ele é suposto a ser homogêneo, ou seja, independente de  $\Delta S$ .)

Similarmente, seja  $N_{\text{out}}(r\Delta\Omega, \Delta t)$  o número de partículas que são detectadas em  $\Delta t$  pelo detetor localizado no ângulo sólido  $\Delta\Omega$ , numa grande distância  $r$  da origem – ou seja, detectadas na superfície  $r\Delta\Omega$  contida na esfera concentrada na origem com raio  $r$ . Definimos a taxa

$$n_{\text{out}}(\Delta\Omega) := \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{N_{\text{out}}(r\Delta\Omega, \Delta t)}{\Delta t}.$$

Esperamos que para todo elemento de ângulo sólido  $\Delta\Omega \subset S^2$  existe um elemento de superfície  $S(\Delta\Omega) \subset S$  tal que toda partícula que está espalhada para dentro de  $\Delta\Omega$  deve ter atravessado a superfície  $S(\Delta\Omega)$ . Daí, vale

$$n_{\text{out}}(\Delta\Omega) = n_{\text{in}}(S(\Delta\Omega)).$$

Pela definição (107) do fluxo, isso é

$$n_{\text{out}}(\Delta\Omega) = F_{\text{in}} \sigma(\Delta\Omega), \quad (108)$$

onde  $\sigma(\Delta\Omega) \doteq |S(\Delta\Omega)|$  é a área de  $S(\Delta\Omega)$ . Isso é a definição operacional da seção de choque. Ela faz sentido na mecânica quântica também, e nossa tarefa é agora calculá-la na mecânica quântica para um dado potencial.

Na mecânica quântica, recordamos que a densidade de corrente correspondente correspondente a um estado  $\psi$  é dada por

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) \doteq \frac{\hbar}{m} \Im(\overline{\psi(\mathbf{r})} \nabla \psi(\mathbf{r})).$$

Para o estado incedente, a expressão  $j_{\text{in}}|S|$  é a derivada temporal da probabilidade que a partícula se encontra na região  $G_+$  atrás da superfície  $S$ .<sup>9</sup> Essa derivada pode ser escrita como

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{N \Delta t} \left( \underbrace{N_{t+\Delta t}(G_+) - N_t(G_+)} \right),$$

onde  $N_t(G_+)$  é o número de partículas na região  $G_+$  no tempo  $t$ . Mas a diferença em parenteses é justamente o número de partículas atravessando a superfície  $S$  no intervalo de tempo  $\Delta t$ , a saber  $N_{\text{in}}(S, \Delta t)$ . Temos então  $j_{\text{in}}|S| = \frac{1}{N} n_{\text{in}}(S)$ , ou seja,

$$N j_{\text{in}} = \frac{n_{\text{in}}(S)}{|S|} \equiv F_{\text{in}}. \quad (109)$$

<sup>9</sup>Essa interpretação segue da relação de continuidade,

$$\oint_{\partial G_+} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{a} = -\frac{d}{dt} P_t(\mathbf{X} \in G_+),$$

e a hipótese que a corrente incidente seja perpendicular à superfície  $S$ .

Pelo mesmo raciocínio concluímos, sob a hipótese que  $\mathbf{j}_{\text{out}}(\mathbf{r})$  tem a direção radial  $\hat{\mathbf{r}}$  para grandes  $r$ :

$$n_{\text{out}}(\Delta\Omega) = \lim_{r \rightarrow \infty} N \int_{r\Delta\Omega} \mathbf{j}_{\text{out}} \cdot d\mathbf{a} = \lim_{r \rightarrow \infty} N \int_{\Delta\Omega} j_{\text{out}}(\mathbf{r}) r^2 d\Omega.$$

Usando Eq. (109), concluímos que

$$\sigma(\Delta\Omega) \equiv \frac{n_{\text{out}}(\Delta\Omega)}{F_{\text{in}}} = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{\Delta\Omega} \frac{j_{\text{out}}(\mathbf{r})}{j_{\text{in}}} r^2 d\Omega,$$

ou seja,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{n}) = \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \frac{j_{\text{out}}(r\mathbf{n})}{j_{\text{in}}}. \quad (110)$$

## 5.2 Teoria de espalhamento independente de tempo

Na mecânica quântica, na abordagem independente do tempo, consideramos como estado incidente uma onda plana com momento  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ . Desprezaremos o spin; então o espaço de estados é  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ .

**Definição 11** Um estado de uma partícula é chamado de

- *estado ligado* sse para todo  $\varepsilon > 0$  existe uma região  $G$  limitada tal que para todo  $t$  a probabilidade de encontrar a partícula em  $G$  é maior o igual a  $1 - \varepsilon$ ;
- *estado de espalhamento* sse para toda região limitada  $G$ , a probabilidade de encontrar a partícula em  $G$  cai para zero para  $t \rightarrow \pm\infty$ .

**Teorema 12** *Um estado é ligado se, e somente se, ele está no subespaço  $\mathcal{H}_p(H)$  gerado pelos auto-vetores (próprios) do Hamiltoniano  $H$ .*

*Ele é um estado de espalhamento se, e somente se, ele está no subespaço  $\mathcal{H}_{ac}(H)$  associado com o espectro absolutamente contínuo.*

$\mathcal{H}_{ac}(H)$  é aquele subespaço que possui uma BON contínua de auto-vetores impróprios do Hamiltoniano  $H$ , (veja [3, Tma. 21]). Para os Hamiltonianos “não-patológicas” o chamado espectro singular-contínuo é vazio, e nesse caso  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p(H) \oplus \mathcal{H}_{ac}(H)$ .

Seja agora o Hamiltoniano da forma  $H_0 + V$ , onde  $H_0$  é o Hamiltoniano livre em  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . Para uma grande classe de potenciais de curto alcance vale o seguinte:

**Teorema 13** *Seja  $V \in L^1(\mathbb{R}^3)$  tal que<sup>10</sup>*

$$\int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \frac{|V(\mathbf{x})V(\mathbf{y})|}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2} < \infty.$$

*Então existe uma BON contínua  $\{\chi_{\mathbf{k}}, \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3\}$  de autovetores generalizados de  $H_0 + V$  com autovalor (generalizado)  $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , tal que para grandes  $r$  vale*

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\mathbf{k}, \hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} + O(r^{-2}), \quad \hat{\mathbf{r}} \doteq \mathbf{r}/r. \quad (111)$$

<sup>10</sup> Isso caracteriza a classe de Rollnick. Veja [8] para outras condições suficientes.



Esse fato é implícito no Thm. XI.41 em [7]. O primeiro termo descreve uma onda plana incidente, e o segundo termo descreve uma onda esférica saindo. A função  $f$  é chamada de *amplitude de espalhamento*. Se o potencial for radial (ou seja, invariante sob rotações), ela é da forma

$$f(\mathbf{k}, \hat{\mathbf{r}}) = f(k, \theta), \quad k \doteq \|\mathbf{k}\|, \theta \doteq \angle(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (112)$$

Vamos supor que o nosso Hamiltoniano seja da forma anunciada no Teorema 13. A evolução temporal de um estado inicialmente descrito por  $\psi_0 = \int d^3\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \chi_{\mathbf{k}}$  é dada, para grandes  $r$ , por

$$\psi_t(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-it\omega(\mathbf{k})} \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \int d^3\mathbf{k} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - t\omega(\mathbf{k}))} + \int d^3\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \frac{f(\mathbf{k}, \hat{\mathbf{r}})}{r} e^{i(kr - t\omega(\mathbf{k}))},$$

onde  $\omega(\mathbf{k}) \doteq \hbar k^2/2m$ . O primeiro termo é um pacote de onda livre, e o segundo termo descreve para grandes  $t$  o estado saindo espalhado pelo alvo  $V$  (e vai para 0 se  $t \rightarrow -\infty$ ).

A densidade de corrente correspondente à  $\chi_{\mathbf{k}}$ ,

$$\mathbf{j} \doteq \frac{\hbar}{m} \Im(\overline{\chi_{\mathbf{k}}} \nabla \chi_{\mathbf{k}}),$$

é da forma

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{in}} + \mathbf{j}_{\text{out}} + \mathbf{j}_{\text{interf}}, \quad \text{onde } \mathbf{j}_{\text{in}} \doteq \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}, \quad \mathbf{j}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \doteq \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\mathbf{k}, \hat{\mathbf{r}})|^2}{r^2} \hat{\mathbf{r}} + O(r^{-3}), \quad (113)$$

enquanto que  $\mathbf{j}_{\text{interf}}$  não contribui para a seção de choque  $\sigma(\Delta\Omega)$  dado que  $\mathbf{k}/k \notin \Delta\Omega$ . (Demonstração na aula.) Com isso, pela Eq. (110) temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{n}) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \frac{j_{\text{out}}(r\mathbf{n})}{j_{\text{in}}} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{n})|^2. \quad (114)$$

### Teorema ótico.

**Série de Born.** Vamos agora construir os auto-vetores (generalizados)  $\chi_{\mathbf{k}}$  do Teorema 13 para um dado potencial, verificar que eles se comportam como (111) para grandes  $r$ , e calcular a amplitude de espalhamento  $f$ .

A equação de Schrödinger independente de tempo e com auto-energia  $E = \hbar^2 k^2/2m$ , pode ser escrita como

$$(\Delta + k^2)\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} V(\mathbf{r})\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (115)$$

Recordamos que a função

$$G(r) \doteq \frac{-1}{4\pi r} e^{ikr} \quad (116)$$

é uma função de Green para o operador  $\Delta + k^2$ , i.e.,  $(\Delta + k^2)G = \delta^{(3)}$ , ou seja, a EDO  $(\Delta + k^2)u = h$  possui a solução  $u = G * h$  (veja [2]). Isso implica que toda solução da EDP (115) é da forma

$$\chi_{\mathbf{k}} = \chi_{\mathbf{k}}^0 + I\chi_{\mathbf{k}}, \quad \text{onde } I\chi \doteq \frac{\hbar^2 k^2}{2m} G * (V \cdot \chi) \quad (117)$$

e  $\chi_{\mathbf{k}}^0$  é uma solução da equação correspondente homogênea,  $(\Delta + k^2)\chi_{\mathbf{k}}^0 = 0$ . Para descrever situações de espalhamento, pegamos a onda plana,

$$\chi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) \doteq e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

Formalmente, a solução da equação (117) é

$$\chi_{\mathbf{k}} = \chi_{\mathbf{k}}^0 + \sum_{n=1}^{\infty} I^n \chi_{\mathbf{k}}^0, \quad (118)$$

onde  $I^n \doteq I \circ \dots \circ I$ . Isso é a *série de Born*. Para potenciais centrais, dá para mostrar que essa série converge se<sup>11</sup>

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r |V(r)| < 1. \quad (119)$$

Se esse número é  $\ll 1$ , os primeiros termos são uma boa aproximação. (*Referência?*) A aproximação com  $n = 1$ ,

$$\chi_{\mathbf{k}} \simeq \chi_{\mathbf{k}}^0 + I\chi_{\mathbf{k}}^0, \quad (120)$$

é chamada de *aproximação de Born*. Vamos calculá-la.

Para uma função qualquer  $\chi$ , temos

$$\begin{aligned} (I\chi)(\mathbf{r}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}') \\ &\simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\mathbf{r}' e^{-ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}') + O(r^{-2}) \end{aligned}$$

onde  $\mathbf{n} \doteq \mathbf{r}/r$ . (Usamos a expansão  $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = r - \mathbf{n}\cdot\mathbf{r}' + O(r^{-1})$  para  $r/r' \rightarrow \infty$ .) Para uma onda plana,  $\chi = \chi_{\mathbf{k}}^0 = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , a integral é justamente a transformada de Fourier do potencial no ponto  $\mathbf{k} - k\mathbf{n}$ ,

$$\hat{V}(\mathbf{k} - k\mathbf{n}) \doteq \int d^3\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-k\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}')}\chi(\mathbf{r}').$$

Resumindo, achamos uma solução  $\chi_{\mathbf{k}}$  da Equação de Schrödinger com energia  $\hbar^2 k^2/2m$  que se comporta como (111), onde a amplitude de espalhamento é dada, em primeira ordem, por

$$f^B(\mathbf{k}, \mathbf{n}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\mathbf{k} - k\mathbf{n}). \quad (121)$$

**Método de ondas parciais.**

### 5.3 Teoria de espalhamento dependente de tempo

(Equação de Lippmann-Schwinger...)

<sup>11</sup>Pois (119) estabelece uma norma para o operador  $I$ . Se essa norma for menor que 1, o operador  $\mathbb{1} - I$  possui o inverso  $\mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} I^n$  pelo argumento padrão da análise.

## References

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum mechanics*, vol. 1, J. Wiley, 1977.
- [2] J. Mund, *Distribuições e Transformada de Fourier*, UFJF, 2021, Notas de aula.
- [3] ———, *Espaços de Hilbert, espectro, EDP's*, UFJF, 2021, Notas de aula.
- [4] ———, *Mecânica quântica I*, UFJF, 2021, Notas de aula.
- [5] M. Reed and B. Simon, *Methods of modern mathematical physics I*, Academic Press, New York, 1975.
- [6] ———, *Methods of modern mathematical physics II*, Academic Press, New York, 1980.
- [7] ———, *Methods of modern mathematical physics III*, Academic Press, New York, 1980.
- [8] J.R. Taylor, *Scattering theory: The quantum theory on nonrelativistic collisions*, John Wiley, 1972.