

## Mecânica Quântica II

### Lista 7

1. Sabendo que probabilidade de transição entre dois estados  $|\psi_i\rangle$  e  $|\psi_f\rangle$  induzida por uma perturbação eletromagnética monocromática e polarizada numa dada direção  $\hat{n}$  é dada por

$$P_{if}(t, \omega) = \frac{|\mathbf{d}|^2 E_0^2 \sin^2[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)^2},$$

onde  $E_0$  é a amplitude da perturbação,  $\mathbf{d} = q\langle\psi_f|\mathbf{r}|\psi_i\rangle$ , mostre que

- (a) A probabilidade de transição para uma distribuição de frequências com densidade de energias  $\rho(\omega)d\omega$  correspondente à frequências no intervalo  $(\omega, \omega + d\omega)$  é dada por

$$P_{if}(t) = \frac{4\pi|\mathbf{d}|^2}{\hbar^2} \rho(\omega_{fi}) t$$

onde assumimos que a largura da função  $\rho(\omega)$ ,  $\Delta$ , satisfaz  $\Delta \gg 4\pi/t$ .

- (b) Se agora consideramos que a radiação é não-polarizada (polarização uniforme em todas as direções), a probabilidade de transição por unidade de tempo é

$$R_{if} = \frac{4\pi|\mathbf{d}|^2}{3\hbar^2} \rho(\omega_{fi})$$

2. Considere um sistema de dois níveis de energia, i.e.  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$ , com energias  $E_1$  e  $E_2$  respetivamente. O sistema é sujeito à radiação térmica a temperatura  $T$ , cuja distribuição é dada por

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^2} \frac{\omega^2}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1},$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $c$  a velocidade da luz no vácuo. Sabendo as probabilidades de transição por unidade de tempo para absorção e emissão estimulada,  $R_{12}$  e  $R_{21}$ , satisfazendo  $R_{12} = R_{21}$  e dadas no resultado do exercício acima, obtenha uma expressão para a probabilidade de transição por unidade de tempo associada à emissão espontânea. (**Dica:** Usar que o número de partículas de uma dada espécie é proporcional ao fator de Boltzmann, i.e.

$$N_i \propto e^{-E_i/k_B T},$$

onde  $E_i$  é a energia das partículas do tipo  $i$ .

3. Considere um elétron no estado  $n = 3$ ,  $\ell = 0$ ,  $m = 0$  do átomo de hidrogênio (i.e.  $|300\rangle$ ). Assumindo que ele decai através de uma sequência de transições dipolares elétricas até o estado fundamental  $|100\rangle$ ,

- (a) Quais as possíveis vias para o decaimento ocorrer. Especifique os estados intermediários quando seja necessário.
- (b) Assumindo um número inicial de átomos, qual fração deles decai por cada uma dessas vias ?
- (c) Qual o tempo característico de decaimento  $\tau$  do estado  $|300\rangle$  ? Lembre que uma vez que a primeira transição de cada via ocorre, o estado não é mais  $|300\rangle$ .

#### 4. Ionização por uma Onda Eletromagnética - Efeito Fotoelétrico :

Considere um átomo de hidrogênio no estado fundamental sob a ação de uma onda eletromagnética monocromática de frequência angular  $\omega$ . Considerando que o campo elétrico é dado por

$$\mathbf{E} = E_0 \cos(\omega t) \hat{z} .$$

Considere a situação na qual o estado final é o de um elétron livre de momento  $\mathbf{p}_e$  e função de onda

$$\psi_e = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}_e \cdot \mathbf{x} / \hbar}$$

Considerar o elétron no estado final como livre é uma aproximação válida quando a sua energia é muito maior que a energia de ligação no átomo. Portanto a energia do elétron livre deve ser igual à do fóton, i.e.  $p_\gamma c$ . Usando a regra de ouro de Fermi, obtenha a razão diferencial de ionização  $d\Gamma(1s \rightarrow \mathbf{p}_e)/d\Omega$ .

**Dicas:**

- (a) Dado que a energia do elétron deve ser igual à do fóton, i.e.

$$\frac{\mathbf{p}_e^2}{2m} = p_\gamma c ,$$

podemos simplesmente usar  $d^3p_e = p_e^2 d\Omega$  na expressão da regra de ouro de Fermi. Não precisamos definir uma densidade de estados.

- (b) É necessário calcular  $|V_{fi}|^2$ , onde

$$V_{fi} = \langle \psi_e | (-eE_0 Z) | \psi_{100} \rangle$$

o que define uma integral a ser feita com algum cuidado. Para isso use que

$$\int d^3r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(r) = \frac{1}{k} \int_0^\infty 4\pi f(r) \sin(kr) dr$$

o que implica que derivando dos dois lados em relação à  $k_z$  temos que

$$-i \int d^3r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(r) z = \frac{k_z}{k^3} \int_0^\infty 4\pi f(r) [-\sin(kr) + kr \cos(kr)] dr$$

5. Considere um sistema descrito por um hamiltoniano dependente do tempo,  $H(t)$ . Mostre que se a solução mais geral da equação de Schrödinger,  $|\Psi(t)\rangle$  e expandida na base de autoestados de  $H(t)$  da seguinte forma

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle ,$$

com

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' ,$$

- (a) Os coeficientes  $c_n(t)$  satisfazem a equação diferencial

$$\dot{c}_m = - \sum_n c_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}$$

onde o ponto denota derivada temporal.

- (b) Usando a equação de Schrödinger para os autoestados dependentes do tempo

$$H(t) |\psi_n(t)\rangle = E_n(t) |\psi_n(t)\rangle ,$$

mostre que a equação acima pode ser rescrita como

$$\dot{c}_m = -c_m(t) \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle + \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle \psi_m | \dot{H}(t) | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} .$$

- (c) **Aproximação Adiabática:** Mostre que, quando os elementos de matriz das derivadas do hamiltoniano podem ser negligenciados, i.e.

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

as soluções da equação de Schrödinger podem ser escritas como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle ,$$

onde definimos

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n(t') | \dot{\psi}_n(t') \rangle dt' .$$

Mostre que  $\gamma_n(t)$  é real.

6. Se o hamiltoniano do sistema depende do tempo através de um conjunto de parâmetros  $\mathbf{R} = (R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(t))$ ,

- (a) Mostre que a fase  $\gamma_n(t)$  pode ser rescrita como

$$\gamma_n(t) = i \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \langle \psi_n | \nabla_{\mathbf{R}} \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R} ,$$

onde  $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}(0)$  e  $\mathbf{R}_f = \mathbf{R}(t)$ .

- (b) **Fase de Berry:** Mostre que a fase definida por uma trajetória fechada  $C$  no espaço de parâmetros  $\mathbf{R}$ ,

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R}$$

é invariante sob transformações de fase dos autoestados definidas por

$$|\psi_n\rangle \rightarrow e^{i\alpha_n(\mathbf{R})} |\psi_n\rangle .$$

**Dica:** Defina o vetor

$$\mathbf{A}_n = i \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle .$$

Mostre que sob as transformações de fase acima ele se transforma como

$$\mathbf{A}_n \rightarrow \mathbf{A}_n - \nabla_R \alpha_n(\mathbf{R}) .$$

Use o teorema de Stokes.

7. Mostre que a fase de Berry pode ser escrita como

$$\gamma_n(C) = - \iint_{S(C)} \mathbf{V}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} ,$$

onde  $S(C)$  é uma superfície delimitada pela curva fechada  $C$  no espaço de parâmetros, e o vetor  $\mathbf{V}_n(\mathbf{R})$  é

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = \text{Im} \left[ \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \nabla_R H | \psi_m \rangle \times \langle \psi_m | \nabla_R H | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \right] ,$$

onde  $\times$  denota o produto vetorial no espaço de parâmetros.

8. Considere uma partícula de spin 1/2 na presença de um campo magnético  $\mathbf{B}$  que forma um ângulo  $\theta_0$  constante com  $\hat{z}$ , e rota lentamente a seu redor. O hamiltoniano relevante é

$$H(\mathbf{B}) = \kappa \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} ,$$

onde a constante  $\kappa$  contém informação sobre o momento magnético da partícula, mas será irrelevante no resultado final. Calcule a fase de Berry definida por uma revolução do  $\mathbf{B}$ . Mostre que é dada por

$$\gamma(C) = -m2\pi (1 - \cos \theta_0) ,$$

onde  $m = \pm 1/2$  corresponde às possíveis projeções do spin em  $\hat{z}$ .