



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E SOCIAIS APLICADAS – CCEA
CAMPUS VII – GOVERNADOR ANTÔNIO MARIZ
LICENCIATURA EM CIÊNCIAS EXATAS**

**CORREÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM EM TEORIA DE
PERTURBAÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO**

NATANA RODRIGUES DE MOURA

**PATOS-PB
2012**

NATANA RODRIGUES DE MOURA

**CORREÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM EM TEORIA DE
PERTURBAÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO**

Trabalho apresentado ao programa de Graduação em Ciências Exatas com habilitação em Física do Departamento de Ciências Exatas e Aplicadas da Universidade Estadual da Paraíba como requisito parcial para obtenção do grau de Licenciada em Ciências Exatas.

Orientador: Msc. Everton Cavalcante

**PATOS-PB
2012**

M929c MOURA, Natana Rodrigues de.

Correções de primeira ordem em teoria de perturbação independente do tempo / Natana Rodrigues de Moura. Patos: UEPB. 2012.
51f

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso - (TCC) - Universidade Estadual da Paraíba).
Orientador: Prof. Msc. Everton Cavalcante

1. Física 2. Mecânica quântica
I. Título II. Cavalcante, Everton.

CDD 530.12

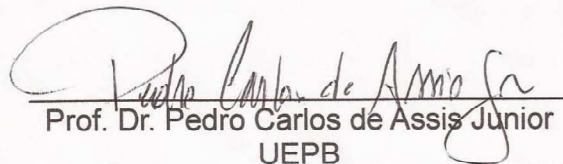
Natana Rodrigues de Moura

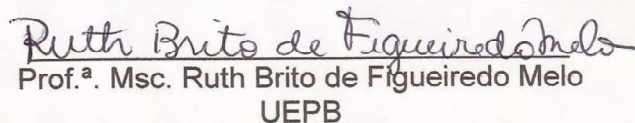
**Correções de Primeira Ordem em Teoria de Perturbação
Independente do Tempo**

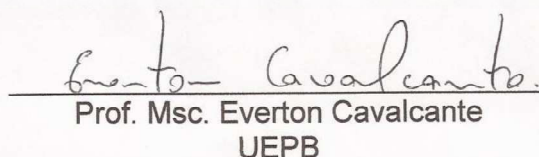
*Trabalho apresentado ao programa de
Graduação em Ciências Exatas com
habilitação em Física do Departamento de
Ciências Exatas e Aplicadas da
Universidade Estadual da Paraíba como
requisito parcial para obtenção do grau de
Licenciada em Ciências Exatas.*

Data de Aprovação 27/06/2012.

Banca Examinadora:


Prof. Dr. Pedro Carlos de Assis Junior
UEPB


Prof.^a. Msc. Ruth Brito de Figueiredo Melo
UEPB


Prof. Msc. Everton Cavalcante
UEPB

*Aos meus pais, Sebastião e Célia, ao
meu irmão, Gerson, e a meu
namorado Matheus, pelo amor e apoio de
todos.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Sebastião Rodrigues Lemos e Maria Célia Marques de Moura Rodrigues, pelo amor incondicional e a confiança em mim depositados; ao meu irmão, Gerson Rodrigues de Moura, por existir em minha vida e me proporcionar boas lembranças da infância; a meu filho Ricardo Vitor P. Rodrigues pelo carinho, amor e felicidade proporcionados; ao meu namorado Matheus pela paciência, carinho e companheirismo; as minhas amigas, Maria do Bonsucesso (Welma), Veridiana Matias, Audenora Dutra e Maílson Matos pelo afeto a mim, pelos bons conselhos, pelo carinho e por me proporcionar momentos tão felizes e inesquecíveis. Aos demais amigos e amigas, onde citações seriam inviáveis pela quantidade, vai o agradecimento pelos bons momentos.

Também não poderia faltar o agradecimento ao professor Everton Cavalcante, pelas preciosas orientações e pela paciência.

Enfim, agradeço a todos que de alguma forma apostaram nesse caminho por mim escolhido.

*“Quem não se chocar com a teoria quântica, é porque não a entendeu.”
(Niels Bohr)*

RESUMO

Neste trabalho de conclusão de curso apresentaremos o surgimento da Mecânica Quântica, no final do século XIX, para explicar fenômenos que a teoria clássica não era mais capaz de explicar satisfatoriamente. A Radiação do Corpo Negro é um dos problemas que só teve sua explicação com as teorias quânticas, como será mostrado, assim como o Efeito Fotoelétrico e o Efeito Compton. Utilizaremos a notação de Dirac no espaço de Hilbert, para simplificar os cálculos. Após descrever conceitos que alicerçam a teoria quântica, abordaremos a equação de Schroedinger, dando ênfase a sua forma independente do tempo, por ser de fundamental importância para o desenvolvimento desse trabalho. Por fim descreveremos uma importante aplicação da Mecânica Quântica: A Teoria da Perturbação Independente do Tempo, que pode ser observada em sistemas que tem uma pequena modificação em sua estrutura, chamada de perturbação, o que irá produzir modificação nos autoestado e autovalores do sistema. Neste trabalho realizaremos os cálculos apenas para as correções de primeira ordem tanto para os autovalores quanto para os autoestados, uma vez que são as correções mais importantes da perturbação.

Palavras Chave: Mecânica Quântica, Teoria de Perturbação, Correções de Primeira Ordem.

ABSTRACT

In this work of conclusion of course we present the appearance of quantum mechanics, in the late nineteenth century, to explain phenomena that classical theory was not able to explain satisfactorily. Black Body Radiation is one of the problems that just had your explanation with quantum theories, as will be shown, as well as the photoelectric effect and Compton effect. We will use the Dirac notation in Hilbert space, to simplify the calculations. After describing concepts that underpin quantum theory, we discuss the Schrodinger equation, emphasizing their shape independent of time, to be of fundamental importance for the development of this work. Finally we describe an important application of quantum mechanics: The Independent Perturbation Theory of Time, which can be observed in systems that have a short modification in their structure, called of disturbance, which will produce change in eigenstates and eigenvalues of the system. In this work we will do the calculations only for the first order correction as for eigenvalues as for eigenstates, since corrections are the most important pertubation.

Keywords: quantum mechanics, perturbation theory, corrections of First Order.

Lista de Figuras

Figura 1.1. Radiância espectral de um corpo negro à temperatura de 2000K (linha a cheio) e previsão da teoria eletromagnética clássica (linha a tracejado).	4
Figura 1.2. Efeito fotoelétrico.....	5
Figura 1.3. esquema do experimento com de fenda dupla com ondas.	7
Figura 1.4. esquema do experimento com de fenda dupla com elétrons sendo observados com fótons.	8
Figura 1.5. Espalhamento Compton.	9
Figura 2.1. Poço de potencial não perturbado.....	17
Figura 2.2. Poço de potencial perturbado.....	18

SUMÁRIO

Introdução	1
1 - Conceitos Básicos de Mecânica Quântica	3
1.1 - As Origens Históricas da Mecânica Quântica.....	3
1.2 - A Equação de Schroedinger e a Interpretação de Copenhagen.....	10
1.3 - Formalismo Vetorial da Mecânica Quântica	13
2 - Correções de Primeira Ordem em Teoria de Perturbação Independente do Tempo	16
2.1 Introdução.....	16
2.2 - Correção Para a Energia	21
2.3 - Correção Para o Autoestado	26
Considerações Finais.....	31
Referências	33
Apêndice.....	35

INTRODUÇÃO

Neste trabalho apresentamos as origens da teoria quântica, a partir da tentativa de solucionar problemas simples como a Radiação de Corpo Negro, que tem como consequência direta um fenômeno conhecido como Catástrofe Ultravioleta, que também será tratado no texto. Mostraremos que Planck, a partir de sua ideia de quantização, propõe uma explicação para tal problema. Logo em seguida abordarei o Efeito Fotoelétrico, que teve sua explicação em 1905 por Einstein, que tomou como suporte as ideias de Planck, deixando clara a natureza corpuscular da luz. Também será mostrado a partir das ideias de Einstein, que De Broglie, em sua tese de doutorado, propõe que a natureza corpuscular da luz faz parte de uma simetria entre matéria e radiação. Ou seja, a matéria também tem propriedades corpusculares, fenômeno conhecido como dualidade onda-partícula [2].

Posteriormente, falaremos a respeito das funções de onda descritas por De Broglie, mostrando que sua dinâmica é estabelecida pela equação de Schroedinger. Em sequencia, mostraremos por que à Interpretação de Copenhagen, e sua relação com as funções de onda, é a interpretação aceita atualmente [6]. A partir daí comentaremos o que é o hamiltoniano da equação, deixando claro que é a partir dele que podemos definir os estados estacionários das funções de onda. Serão demonstradas matematicamente as equações de Schroedinger dependente e a independente do tempo, explicando o porquê de apenas a independente do tempo nos interessar para determinar os estados estacionários quando o sistema é submetido a uma energia potencial (V) particular. Então comentaremos o que são autovalores e autovetores, e suas relações com o sistema estudado [7].

No tópico seguinte abordaremos o espaço de Hilbert, com os seus vetores de estados associados (KET). Esses vetores foram introduzidos na Mecânica Quântica por Dirac, dando margem a um formalismo vetorial aplicado na equação de Schroedinger. Faremos ainda um breve comentário sobre operadores hermitianos, comprovando matematicamente que esses operadores admitem apenas valores reais [9].

No segundo capítulo trataremos uma das aplicações da Mecânica Quântica: A Teoria da Perturbação Independente do Tempo. Calcularemos suas

autofunções e seus autovalores, primeiramente para os estados não perturbados. Em seguida, vamos supor a existência de uma pequena deformação (perturbação) no hamiltoniano do sistema. Com isso calcularemos as autofunções e seus autovalores para os estados perturbados. Nesse trabalho vamos considerar apenas as correções de primeira ordem, como veremos, justamente por serem as mais relevantes. Mostraremos que os valores encontrados para o estado perturbado serão sempre aproximados ao valor não perturbado. Em seguida demonstraremos matematicamente a expressão para a correção das autoenergias e dos autoestados [10].

Por fim, faremos alguns comentários sobre os resultados obtidos, e suas diversas aplicações em problemas da física quântica.

CAPÍTULO I

1. Conceitos Básicos da Mecânica Quântica

Todas as explicações físicas para fenômenos, até o final do século XIX, eram feitas a partir do determinismo clássico, por ser considerada quase completa para alguns físicos da época, porém surgiram experimentos que tal determinismo não era capaz de explicar satisfatoriamente, desafiando a percepção de que a física clássica seria completa. Teorias clássicas conseguiam explicar situações na escala humana de espaço e tempo, porém falhava para explicar situações de escalas atômicas que se moviam com a velocidade muito elevada.

Certos fenômenos passavam a funcionar, de maneira que os experimentos não podiam mais ser medidos com réguas nem o tempo podia ser cronometrado. O fóton ou elétron, por exemplo, não possuem uma posição mensurável nem uma trajetória, entre os pontos de emissão e onde são detectados, tal ponto de detecção não seria onde seria esperado encontrar a partícula caso tivesse sendo baseada em experimentos clássicos, pois por exemplo, com uma pequena probabilidade poderíamos encontrar a partícula do outro lado de uma barreira sólida.

A Mecânica Quântica rompe com o determinismo clássico, pois seus resultados são probabilísticos, determinando a probabilidade de se encontrar a partícula em um determinado volume. A partir da teoria quântica vários experimentos ganharam explicação, como quais eram as reais propriedades da luz, o problema da Radiação do Corpo Negro, o Efeito Fotoelétrico, entre muitos outros.

1.1- As Origens Históricas da Mecânica Quântica

No final do século XIX, a física tentava encontrar explicações para alguns fenômenos, sendo um desses a Radiação de Corpo Negro. Sabia-se que ao aquecer um corpo, ele passa a emitir uma radiação, denominada radiação térmica, tal radiação são ondas eletromagnéticas geradas pelas oscilações de partículas carregadas que compõem os corpos aquecidos, como exemplos têm o carvão em brasa e os filamentos da lâmpada incandescente, os quais são corpos que a alta

temperatura irradiam luz visível.

Tendo em vista que o espectro da radiação emitido por um objeto depende da sua composição, há espectros térmicos de carácter invisível, trata-se de um Corpo Negro, que são corpos que absorvem toda energia que o aquece, e que ao mesmo tempo, é um irradiador perfeito. Uma maneira de criar tal corpo é obtendo-se uma caixa com o interior irregular e fazendo-se um buraco muito pequeno nela. Como o interior é irregular, toda a energia que passa por este buraco permanecerá dentro da caixa sendo absorvida pela caixa [1].

Podemos considerar, ao mesmo tempo, que toda radiação que deixa o buraco termicamente foi criado dentro da caixa, teoricamente a radiação de cada comprimento de onda, que sai do buraco, tenderia a infinito com o aumento da temperatura, já experimentalmente observa-se que a radiação inicialmente cresce junto com a frequência, porém em determinado ponto a radiação decresce, tendo que para máximas frequências têm-se mínimas radiações, esse fenômeno ficou conhecido como Catástrofe Ultravioleta [2].

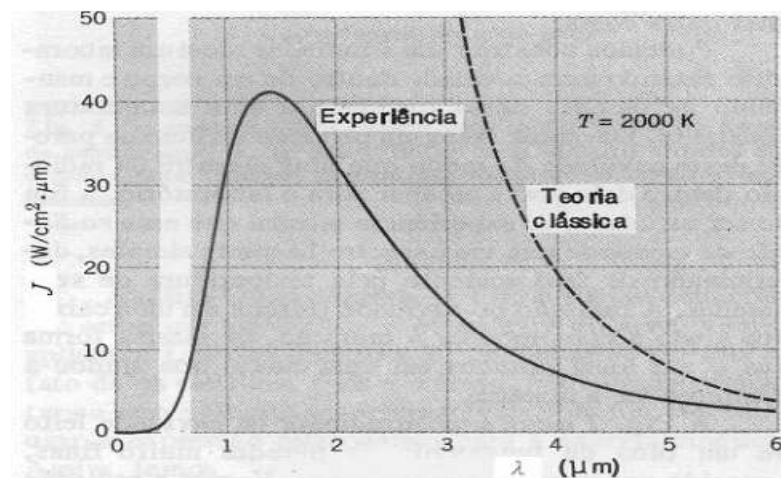


Figura 1.1: Radiação espectral de um corpo negro à temperatura de 2000K (linha a cheio) e previsão da teoria eletromagnética clássica (linha a tracejado) [3].

Percebe-se que apenas o início da curva obtida experimentalmente coincidi com a previsão teórica, pois para comprimento de ondas menores, a coincidência deixa de existir. Deixando claro que os dados obtidos, experimentalmente, nada tinham haver com os cálculos teóricos.

Planck realizou uma abordagem modificando algumas equações de modo que houvesse coincidência entre as curvas, teórica e experimental, propondo uma

explicação à problemática do corpo negro. Utilizando a ideia de quantização, na qual as partículas só podem absorver ou emitir energia em quantidades bem determinadas, ou seja, discretas. Portanto a energia seria uma função que dependeria da frequência, demonstrada através da relação matemática entre frequência e energia, dada por [2]:

$$E = h \vartheta \quad (1.1)$$

Onde h é a constante de Planck e ϑ é a frequência da onda eletromagnética. A principal mudança com relação à teoria clássica era que a energia deixava de ser vista como algo contínuo para se tornar uma grandeza transferida em forma de “pacotes” de quantidade definida, denominada quantum de energia.

Posteriormente foram realizados experimentos que identificaram um fenômeno denominado Efeito Fotoelétrico, que consiste em uma emissão de elétrons quando uma luz de certa frequência incide em uma superfície metálica. Essa emissão é percebida porque um campo elétrico age os elétrons emitidos, estabelecendo uma corrente elétrica mensurável.

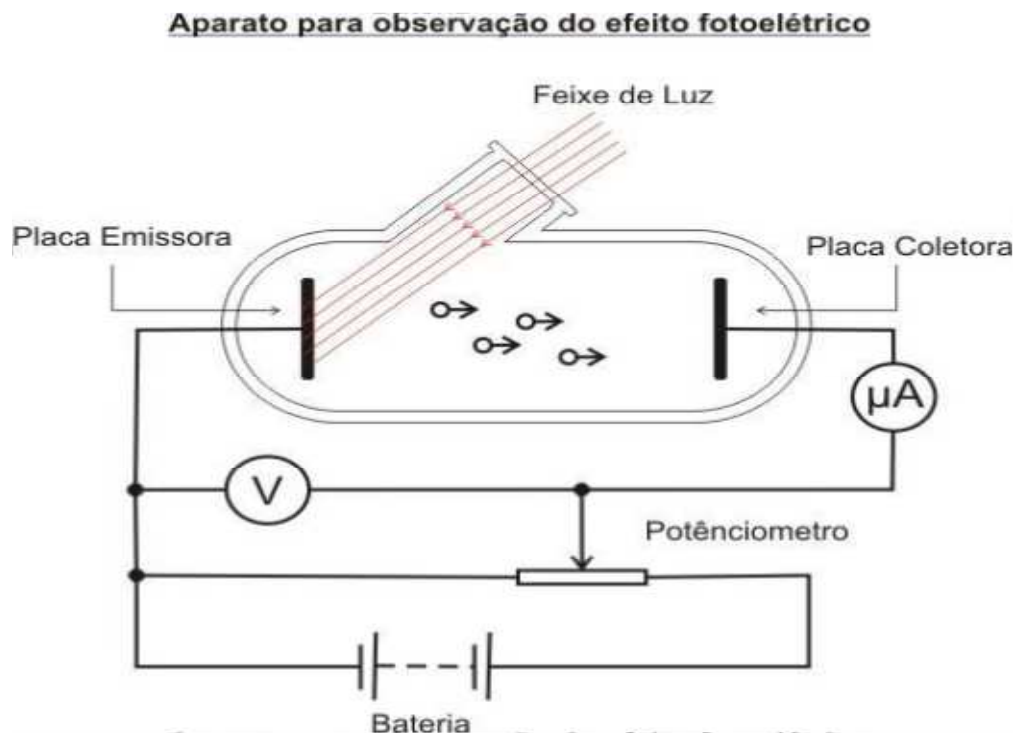


Figura 1.2: Efeito fotoelétrico [16].

É necessária uma frequência mínima para que os elétrons sejam emitidos, sendo que abaixo dessa frequência os elétrons não se desprendem mais da superfície metálica. Ao serem emitidos, os elétrons, possuem energia cinética constante, indiferente a intensidade da luz incidente. Portanto luz mais intensa implica em mais elétrons desprendidos com a mesma energia cinética.

A teoria ondulatória previa que deveria haver um tempo entre a incidência de luz e a emissão dos elétrons, assim quando a luz tinha baixa intensidade, o elétron acumulava energia vibracional durante um período de tempo para se desprender da placa. No entanto, esse intervalo de tempo nunca foi observado experimentalmente.

Tal fenômeno teve sua explicação em 1905 por Einstein, que utilizando-se da ideia de quantização da energia, propôs que a luz também possuía caráter corpuscular. Ou seja, as ondas eletromagnéticas podiam ser consideradas como energia em forma de “pacotes”, denominados fótons.

Einstein postulou que cada fóton é constituído por uma quantidade de energia definida pela equação [1]:

$$E = h \nu - E_0 \quad (1.2)$$

Onde E_0 é a energia mínima necessária para liberar um elétron de um material específico, e $h\nu$ é a energia do fóton associada à liberação desse elétron. O elétron para se desprender da chapa metálica, precisa de certa quantidade de energia fornecida pelo fóton, que por sua vez depende da frequência de luz incidente, e não de sua intensidade. O fóton é absorvido pelo elétron, que se desprende em seu processo praticamente instantâneo, não sendo mensurável nenhum intervalo de tempo entre a incidência da luz e a emissão da corrente.

Vemos com clareza que a luz mostra ambas as propriedades, tanto a ondulatória quanto a corpuscular, e que esta é uma das características fundamentais da física quântica, conhecida como *dualidade onda-partícula* [2].

De Broglie observou os resultados obtidos para a luz no fenômeno do efeito fotoelétrico e inverteu a ideia principal: se a luz, que era onda, podia apresentar um comportamento de partícula, então o elétron, que era uma partícula, poderia também apresentar um caráter ondulatório. Propondo sua teoria em sua

tese de Doutorado.

Em 1927, Germer e Davisson obtiveram evidências experimentais da teoria de De Broglie, partindo do princípio experimental da radiação eletromagnética, realizado por Thomas Young. O experimento da radiação eletromagnética consistiu em fazer com que raios de luz monocromática incidam através de duas fendas próximas para que, depois de passar pelas fendas, sofram interferência, que pode ocorrer de maneira construtiva (franjas claras) e destrutiva (franjas escuras). O resultado é um padrão de linhas paralelas com intensidade que diminui à medida que as linhas se afastam do centro [15].

Os experimentos que evidenciaram a natureza ondulatória do elétron tinham a mesma montagem, no entanto, em vez de se usar um feixe de luz, usou-se um feixe de elétrons para incidir nas duas fendas.

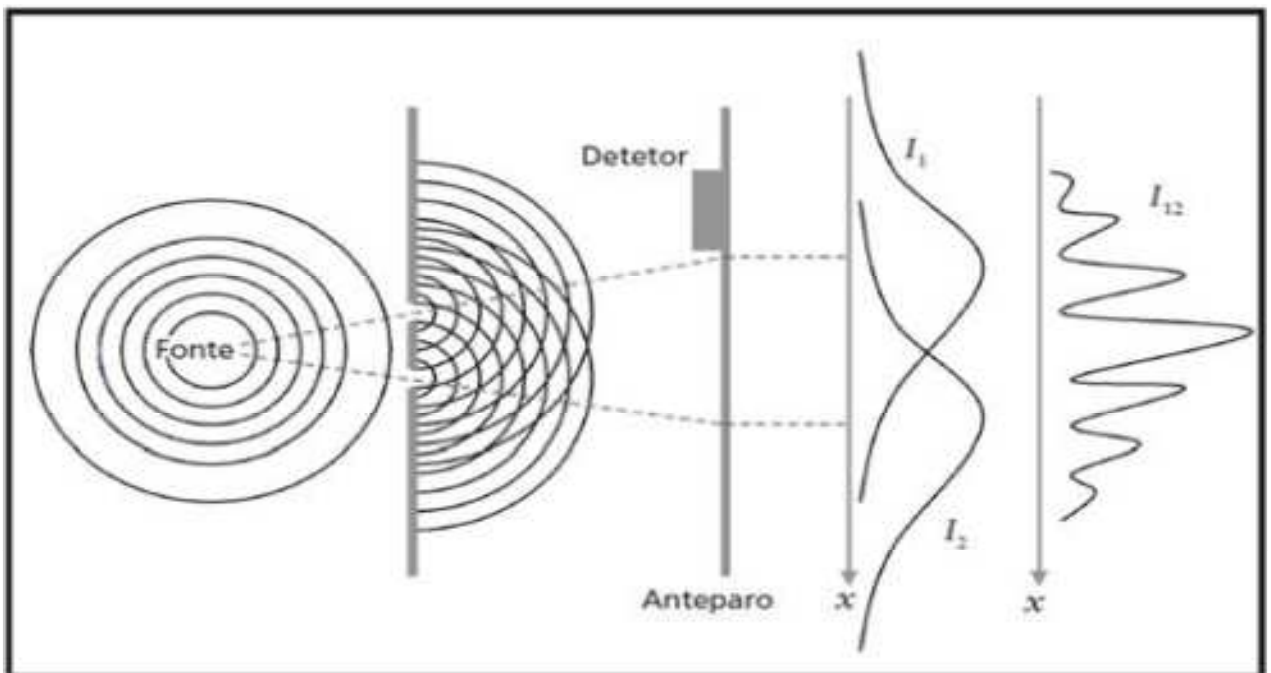


Figura 1.3: esquema do experimento com de fenda dupla com ondas [16].

As intensidades I_1 e I_2 corresponde a situação em que apenas os buracos 1 ou 2 estão abertos, respectivamente. Já a situação I_{12} corresponde a situação em que as duas fendas estão abertas, simultaneamente.

O resultado observado com a incidência dos elétrons foi exatamente igual ao resultado obtido com a incidência de radiação eletromagnética, isto é, foram

obtidos os mesmos padrões de interferência, evidenciando o comportamento de onda associado ao elétron, como havia previsto De Broglie alguns anos antes.

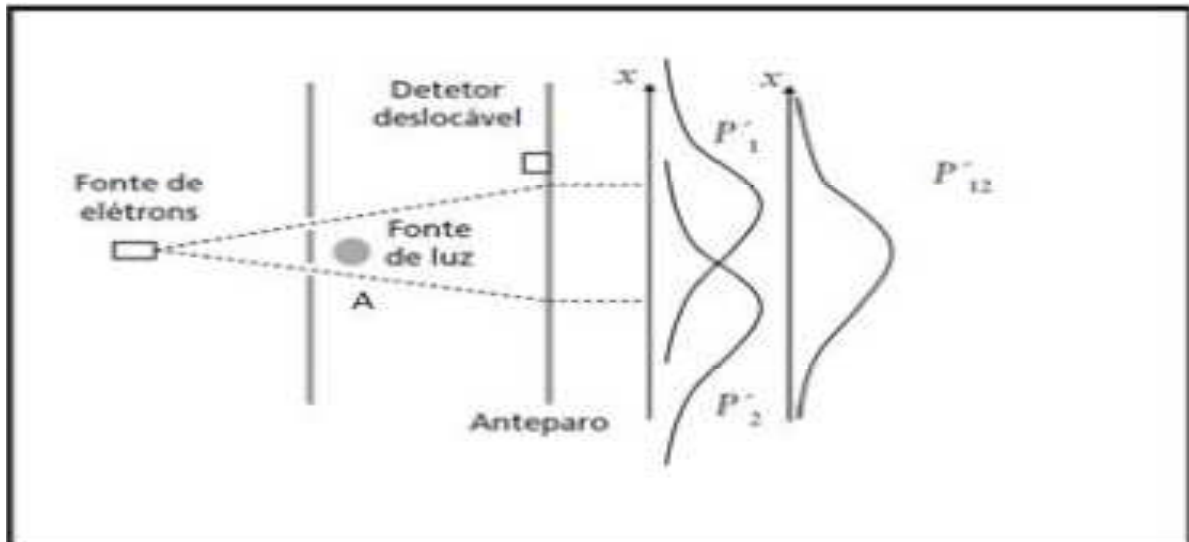


Figura 1.4: esquema do experimento com de fenda dupla com elétrons sendo observados com fótons [16].

As possibilidades P'_1 e P'_2 correspondem às situações nas quais apenas as fendas 1 ou 2 estão abertas, respectivamente. Já a probabilidade P'_{12} corresponde à situação em que as duas fendas estão abertas, simultaneamente.

No experimento de Young, para que aconteça a passagem pela dupla fenda, a onda deve atravessar as duas fendas simultaneamente. No caso dos elétrons, essa interpretação também tem que ser válida, ou seja, o elétron, mesmo sendo uma partícula, atravessa ambas as fendas ao mesmo tempo, comportando-se como uma onda.

Em 1923 a natureza corpuscular da radiação também foi comprovada por Compton, observando variações de comprimento de onda da radiação resultantes do espalhamento de elétrons. Ele observou que se o processo de difração fosse considerado uma “colisão” entre um fóton de energia hf_1 e um elétron, o elétron absorveria parte da energia inicial e, portanto a energia hf_2 do fóton difratado seria menor do que a do fóton incidente [18].

Para explicar seus resultados experimentais Compton supôs que os raios X incidentes que são radiações eletromagnéticas, fossem formados por fótons de

energia, Equação (1), os quais colidem com os elétrons livres causando um espalhamento de elétrons. Sobre a teoria ele comentou [19]:

De acordo com a teoria clássica, cada raio X afeta os elétrons na matéria atravessada e o espalhamento observado é devido aos efeitos combinados de todos os elétrons. Do ponto de vista da teoria quântica, podemos supor que qualquer quantum particular de raio X não é espalhado por todos os elétrons do irradiador mas gasta toda sua energia sobre elétrons particular. Este elétron por sua vez, desviará o raio em alguma direção definida em certo ângulo com o feixe incidente. Este desvio da trajetória do quantum de radiação resulta em uma mudança de seu momentum como consequência, o elétron desviador recuará com um momentum igual à mudança de momentum do raio X. A energia do raio desviado será igual a do raio incidente menos a energia cinética de recuo do elétron espalhador. E como o raio desviado deve ser um quantum completo, a frequência será reduzida na mesma razão que sua energia. Assim na teoria quântica deveríamos esperar que o comprimento de onda dos raios X espalhados seja maior do que o dos raios incidentes.

As intensidades I dos raios X espalhados foram medidos como função dos comprimentos de onda para vários θ de espalhamentos. O feixe incidente consiste de um único comprimento de onda λ_0 , os raios X espalhados têm máximos de intensidade em dois comprimentos de onda. Tendo um dos comprimentos de onda, o próprio λ_0 incidente e o outro representado por λ_1 que é maior favorecendo o deslocamento Compton $\Delta\lambda$ (ver Apêndice A).



Figura 1.5 :
 espalhamento
 Compton[20]

A figura 1.5 mostra que $\Delta\lambda$ depende do ângulo θ , onde os raios X espalhados são analisados.

As ondas descritas por De Broglie tenham seu comportamento ondulatório descrito por uma função de onda associada $\Psi(x, t)$, as quais determinam completamente o estado físico do sistema. Isto significa que, dada à função de onda de um sistema no instante t , todas as propriedades do sistema estarão descritas.

1.2 A Equação de Schroedinger e a Interpretação de Copenhagen

Inspirado nas evidências experimentais de que em sistemas microscópicos o movimento das partículas obedecia às leis do movimento ondulatório e não as leis do movimento de Newton. Em 1925, Erwin Schroedinger, propõe um novo formalismo para a teoria quântica, de modo que as partículas microscópicas teriam seu comportamento definido por funções de ondas representadas por ondas de De Broglie. Tais funções de onda tem sua dinâmica exposta pela equação de Schroedinger, dada por [5]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (1.3)$$

Determinar a posição $x(t)$ da partícula em função do tempo não é o objetivo principal da mecânica quântica, mas sim determinar a função de onda $\psi(x,t)$, cuja sua intensidade representa a probabilidade de se encontrar a partícula numa dada posição. Uma partícula que se encontra num volume $d^3\vec{x}$ e que é representada pela função de onda $\psi(\vec{x})$ tem seguinte probabilidade de ser encontrada nessa região do espaço [6]:

$$P = \int \psi^* \psi d^3 \vec{x} \quad (1.4)$$

Essa interpretação probabilística de onde a partícula poderia ser encontrada numa dada região caracteriza a Interpretação de Copenhague.

A energia total de um sistema é representada por um hamiltoniano definido pelas propriedades físicas do sistema, desse hamiltoniano podemos definir seus estados estacionários (ou autoestados), cujas suas autofunções não variam

com o tempo. Os mesmos saem da equação de Schroedinger independente do tempo, que caracteriza sistemas conservativos.

A equação de Schroedinger é uma equação diferencial, cujas soluções determinam a dependência espacial e temporal da função de onda, cujas variáveis são independentes. De modo geral, o potencial V que atua no sistema, pode ser uma função tanto de x quanto de t , entretanto devido os estado serem estacionários o potencial estará somente em função da variável x , assim teremos que:

$$V = V(x)$$

Como x e t são variáveis independentes, pode-se separar a dependência em x da dependência em t da função de onda $\Psi(x, t)$, escrevendo como o produto de duas funções de cada uma dessas variáveis, isto é [7]:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t) \quad (1.5)$$

Substituindo (1.5) em (1.3),obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \phi(t) + V(x) \psi(x) \phi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \phi(t) \quad (1.6)$$

Ou,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi(t) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) \phi(t) = i\hbar \psi(x) \frac{d}{dt} \phi(t) \quad (1.7)$$

Dividindo ambos os lados por $\psi\phi$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) = i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d}{dt} \phi(t) \quad (1.8)$$

Percebe-se que um lado da igualdade esta apenas em função de x , e o outro lado apenas em função de t . Então reescreveremos a equação acima da seguinte forma:

$$f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \quad (1.9)$$

E,

$$f(t) = i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d}{dt} \phi(t) \quad (1.10)$$

Isso só será possível se ambas funções forem igual a uma constante [$f(x) = E = f(t)$], onde essa constante E representa a energia do sistema, então substituindo em (1.8) e (1.9), teremos [7]:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \quad (1.11)$$

E,

$$E = i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d}{dt} \phi(t) \quad (1.12)$$

Temos então a equação de Schroedinger Independente do Tempo (1.9), utilizada para determinar os estados estacionários do sistema, descritos pelas autofunções ($\psi(x)$) quando o sistema é submetido a uma energia potencial ($V(x)$) particular. Para cada autovalor corresponde um autoestado e o número de pares autovalor-autovetor (ver Apêndice B) é igual à dimensão do espaço onde o sistema em questão está definido [6].

1.3 Formalismo Vetorial da Mecânica Quântica

Considerando um sistema físico, de acordo com sua natureza, podemos especificar suas dimensões. Quando tratarmos de um sistema quântico, as dimensões do sistema (ou números de grau de liberdade) são retratadas num espaço vetorial real ou complexo, composto por um conjunto de vetores mais um conjunto de escalares. Os espaços vetoriais complexos são conhecidos como espaços de Hilbert (ver Apêndice C).

O estado físico de um dado sistema são todas as informações possíveis que podemos obter desse sistema e que pode ser representado por uma função complexa de onda ou por um vetor de estado, que é um vetor contido no espaço vetorial complexo. A notação matemática usada para representar esses estados físicos foi introduzidas por Paul Dirac (KET $|\psi\rangle$, BRA $\langle\psi|$) que representa os vetores de estado. No espaço de Hilbert associamos a uma função de onda $\Psi(x, t)$, o vetor de estado $|\psi\rangle$, que contém toda informação sobre o estado do sistema. Para todo KET $|\psi\rangle$ existe um BRA $\langle\psi|$, seu dual existente num espaço de Hilbert dual [8].

No espaço de Hilbert, o que entendíamos da mecânica quântica usual como densidade de probabilidade, passa agora a ser um produto interno vetorial:

$$\psi^* \psi = \langle \psi(x) | \psi(x) \rangle \quad (1.13)$$

A partir da equação de Schroedinger independente do tempo (1.10), podemos reescrevê-la de acordo com a notação de Dirac e assim obter:

$$E_n |\psi_n \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} |\psi_n \rangle + V |\psi_n \rangle$$

$$E_n |\psi_n\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right] |\psi_n\rangle$$

Ou,

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (1.14)$$

Onde H é o operador Hamiltoniano (energia) do sistema [9].

Toda quantidade física mensurável observável é descrita por um operador atuando no espaço vetorial. Os observáveis são representados por operadores hermitianos, cujos possíveis resultados das medidas são os autovalores, os quais são sempre reais, assim passíveis de serem resultados de medidas físicas [10].

Para comprovar que os autovalores dos operadores hermitianos são reais, vejamos a equação de autovalor, definida como sendo:

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle \quad (1.15)$$

Onde $|a\rangle$ é um autovalor associado ao operador \hat{A} e a é o seu respectivo autovalor.

A correspondente dual à equação acima é dada por:

$$\langle a | \hat{A} = \langle a | a^* \quad (1.16)$$

Multiplicando a equação (1.16) por $|a\rangle$ à direita, a equação (1.15) por $\langle a|$ à esquerda e subtraindo uma da outra chegamos a:

$$\langle a | a \rangle (a - a^*) = 0 \quad (1.17)$$

Como $|a\rangle$ não é nulo, teremos que $\langle a | a \rangle > 0$, então para que a equação (16) seja verdadeira a tem que ser igual à a^* , confirmando que esses autovalores são reais e assim operadores hermitianos [9].

Além de serem reais, operadores hermitianos tem outra importante propriedade, que afirma que as autofunções pertencentes a autovalores distintos são ortogonais, para demonstrar que essa propriedade é verdadeira, suponha que:

$$\hat{Q}f = qf \text{ e } \hat{Q}g = q'g,$$

E \hat{Q} é hermitiano. Então:

$$\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle$$

Assim,

$$q'\langle f|g\rangle = q^*\langle f|g\rangle \quad (2.18)$$

Chegamos à conclusão de que o autovalor encontrado é igual ao seu complexo conjugado (q^*). Os produtos internos existem na equação porque supomos que as autofunções estejam no espaço de Hilbert. Porém como vimos anteriormente, q é real, portanto, $q' \neq q$.

A notação de Dirac torna-se uma importante ferramenta na obtenção de resultados mais robustos da mecânica quântica, por facilitar a obtenção dos resultados. Daremos seguimento ao texto tratando uma das aplicações da mecânica quântica, conhecida como Teoria de Perturbação Independente do Tempo.

CAPÍTULO II

2. Correções de Primeira Ordem em Teoria de Perturbação Independente do Tempo

2.1 Introdução

A teoria de perturbação é um conjunto de esquemas aproximados para descrever sistemas quânticos complexos em termos de outros mais simples. A ideia é iniciar com um sistema simples e gradualmente ir adicionando hamiltonianos "perturbativos", que representam pequenas alterações ao sistema. Se a alteração ou perturbação não é demasiado grande, as diversas magnitudes físicas associadas ao sistema perturbado, como seus níveis de energia e seus estados próprios, poderão ser gerados de forma contínua a partir dos do sistema simples. Desta forma, podemos estudar o sistema complexo baseando-nos no sistema simples.

A equação de Schroedinger independente do tempo unidimensional é dada por:

$$E_n \psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n + V(x) \psi_n \quad (2.1)$$

Sabendo que a hamiltoniana é da seguinte forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2.2)$$

Substituindo a equação (2.2) em (2.1), obtemos que:

$$H \psi_n = E \psi_n \quad (2.3)$$

Aplicando a notação de Dirac na equação (2.3), temos:

$$H |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle \quad (2.4)$$

Um sistema bem definido que possui um potencial atuante, sem dependência temporal, por ser conservativo, pode ter os valores exatos de seus autovalores e de seus autovetores encontrados e o número de pares autovalor-autovetor iguais à dimensão do espaço onde o sistema em questão está definido. Sendo, esse sistema, conhecido como um potencial não perturbado, como mostra a figura 2.1:

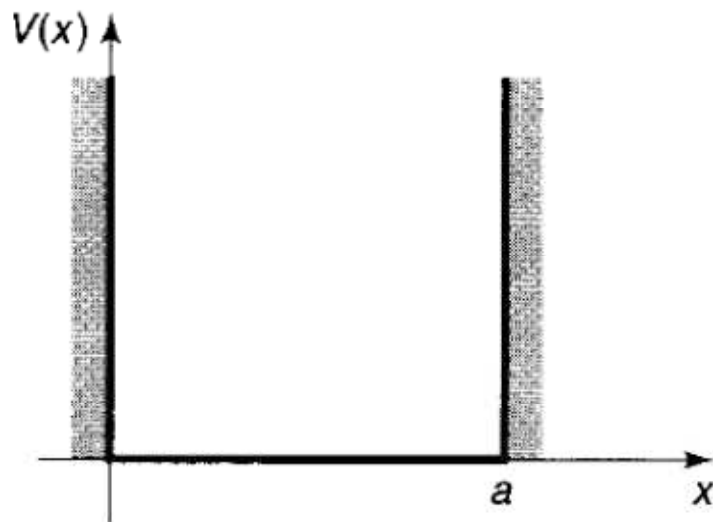


Figura 2.1 Poço de potencial não perturbado [10].

Na teoria da Perturbação temos que, para um operador hamiltoniano não perturbado:

$$H^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (2.5)$$

Onde $|\psi_n^{(0)}\rangle$ são os estados não perturbados associados, para um potencial, $H^{(0)}$ é o operador hamiltoniano não perturbado e $E_n^{(0)}$ é a energia não perturbada [10].

Ao perturbarmos levemente o potencial, colocando uma pequena saliência no fundo do poço, por exemplo, (Figura 2.2), os estados deixam de ser não

perturbados e passam a ter novos valores para seus autovalores e autofunções.

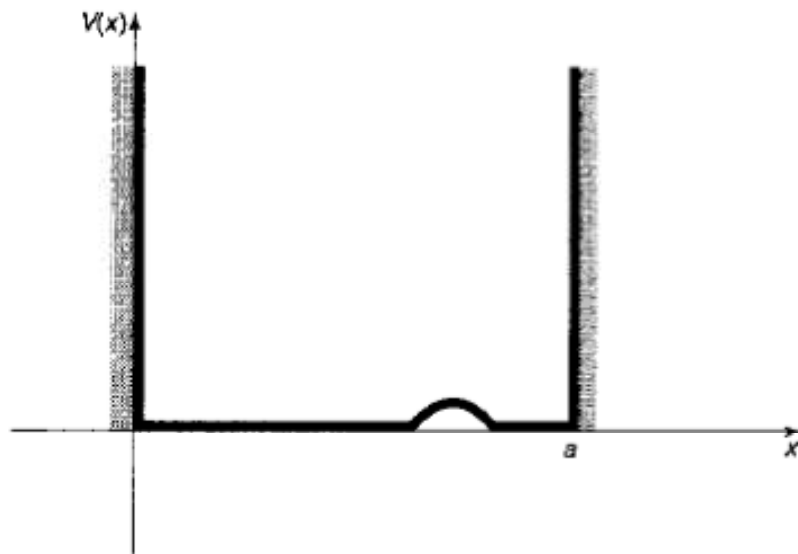


Figura 2.2: Poço de potencial perturbado [10]

Utilizando um procedimento sistemático na obtenção de soluções aproximadas, podemos calcular os novos valores aproximados para os autoestados e as autofunções, nesse potencial perturbado com base nas soluções exatas conhecidas para o caso não perturbado, sendo essas aproximações o valor esperado para as perturbações [9].

Para um hamiltoniano perturbado genérico temos a soma de dois termos:

$$H = H^{(0)} + \lambda H' \quad (2.6)$$

Em que $\lambda H'$ é o valor da perturbação.

Os respectivos autoestados e autofunções para o hamiltoniano perturbado serão escritos como séries de potenciais, onde cada novo termo da soma irá representar uma ordem de perturbação:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (2.7)$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots \quad (2.8)$$

Consideraremos λ como um número pequeno, $0 < \lambda < 1$, de tal modo que há sempre uma correção de ordem superior com o valor menor que a correção de ordem inferior. Serão feitos três exemplos, exemplo 1 para $\lambda = 0$, exemplo 2 para $\lambda = 0,5$ e exemplo 3 para $\lambda = 1$. Para que fique claro o que ocorre quando λ se igualar a 0 ou a 1, e o que acontece com o λ para explicar o valor decrescente das perturbações.

Exemplo 1:

Fazendo $\lambda = 0$ nas equações (2.7) e (2.8)

$$E_n = E_n^{(0)} + 0E_n^{(1)} + 0^2E_n^{(2)} + 0^3E_n^{(3)} \dots$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + 0\psi_n^{(1)} + 0^2\psi_n^{(2)} + 0^3\psi_n^{(3)} \dots$$

Resolvendo o produto em cada termo da soma tanto dos autovalores (E_n) quanto das autofunções (ψ_n), obtemos:

$$E_n = E_n^{(0)}$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)}$$

Podemos concluir que quando λ se iguala a 0 temos o estados não perturbados das autofunções e dos autoestados.

Exemplo 2:

Fazendo $\lambda = 0,5$ nas equações (2.7) e (2.8)

$$E_n = E_n^{(0)} + 0,5E_n^{(1)} + 0,5^2E_n^{(2)} + 0,5^3E_n^{(3)} \dots$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + 0,5\psi_n^{(1)} + 0,5^2\psi_n^{(2)} + 0,5^3\psi_n^{(3)} \dots$$

Resolvendo o produto em cada termo da soma tanto dos autovalores (E_n) quanto das autofunções (ψ_n), obtemos:

$$E_n = E_n^{(0)} + 0,5E_n^{(1)} + 0,25 E_n^{(2)} + 0,125 E_n^{(3)} \dots$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + 0,5\psi_n^{(1)} + 0,25\psi_n^{(2)} + 0,125\psi_n^{(3)} \dots$$

Podemos concluir que a medida e vai se aumentando a ordem de perturbação (identificada pelos índices), o valor de λ vai diminuído ate que chega um ponto em que λ se torna muito pequeno, comprovando que a correção de ordem superior com o valor que a correção de ordem inferior, chegando ao ponto da perturbação ser insignificante.

Exemplo 3:

Fazendo $\lambda = 1$ nas equações (2.7) e (2.8)

$$E_n = E_n^{(0)} + 1E_n^{(1)} + 1^2E_n^{(2)} + 1^3E_n^{(3)} \dots$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + 1\psi_n^{(1)} + 1^2\psi_n^{(2)} + 1^3\psi_n^{(3)} \dots$$

Resolvendo o produto em cada termo da soma tanto dos autovalores (E_n) quanto das autofunções (ψ_n), obtemos:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} \dots$$

E,

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \psi_n^{(3)} \dots$$

Podemos concluir que quando λ se iguala a 1 temos o estado perturbado, com o valor máximo da perturbação das autofunções e dos autoestados.

Assim $E_n^{(1)}$ é a correção de primeira ordem para o enésimo autovalor, e $\psi_n^{(1)}$ é a correção de primeira ordem para enésima autofunção, e assim por diante

sendo usadas para calcular a correção sofrida tanto na energia quanto nos autoestados para cada ordem de perturbação [10].

2.2 Correção Para a Energia

Iremos calcular as correções ocorridas na energia ao perturbamos o potencial. Partindo de (2.4) podemos adicionar a ela as equação (2.6), (2.7) e (2.8) e reescrevê-la da seguinte maneira[8]:

$$H |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle$$

$$(H^{(0)} + \lambda H') |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle$$

$$\begin{aligned} & (H^{(0)} + \lambda H') (|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) = \\ & = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) (|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} & H^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda H^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 H^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots + \\ & + \lambda H' |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda^2 H' |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^3 H' |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots = \\ & = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots + \\ & + \lambda E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda^2 E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^3 E_n^{(1)} |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots + \\ & + \lambda^2 E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda^3 E_n^{(2)} |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^4 E_n^{(2)} |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

Rearranjado os termos como potências de λ :

$$\begin{aligned}
& H^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \\
& + \lambda \left(H^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + H' \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) + \\
& + \lambda^2 \left(H^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + H' \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle \right) + \\
& + \lambda^3 H' \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots = \\
& = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \\
& + \lambda \left(E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) + \\
& + \lambda^2 \left(E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) + \\
& + \lambda^3 \left(E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle \right) + \\
& + \lambda^4 E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Podemos estabelecer da equação encontrada que a menor ordem (λ^0) leva a equação (2.5) que representa o estado não perturbado:

$$H^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle$$

Para a primeira ordem, representada por λ^1 , temos a seguinte equação:

$$\lambda \left(H^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + H' \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) = \lambda \left(E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) \tag{2.12}$$

Para a segunda ordem, representada por λ^2 , temos a seguinte equação:

$$\lambda^2 \left(H^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + H' \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle \right) = \lambda^2 \left(E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) \tag{2.13}$$

E assim por diante até se encontrar a equação q irá representar a enésima ordem de perturbação.

Nesse trabalho consideraremos apenas correções de primeira ordem,

equação (2.12), uma vez que estas são as correções mais relevantes na perturbação, por ser a correção de maior valor e assim o valor esperado para a perturbação, portanto utilizaremos a equação:

$$\lambda \left(H^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + H' \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right) = \lambda \left(E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right)$$

$$H^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + H' \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (2.14)$$

Observe que o λ não é mais utilizado, por ser um mecanismo que nos mantinha cientes das diferentes ordens, de modo que podemos elevar seu valor a 1 e admitir que a perturbação é máxima.

Fazendo o produto da equação (2.12) interno com $\left\langle \psi_n^{(0)} \right|$:

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \right| H^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \right| H' \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \left\langle \psi_n^{(0)} \right| E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \right| E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (2.15)$$

Como $E_n^{(0)}$ e $E_n^{(1)}$ são escalares saem do produto interno dos vetores de estado, reescrevemos a equação da seguinte forma:

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \right| H^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \right| H' \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(0)} \right| \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left\langle \psi_n^{(0)} \right| \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (2.16)$$

Uma vez que autofunções distintas são ortogonais obedecem a seguinte condição: temos que o produto interno dos vetores será igual ao delta de Kronecker:

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.17)$$

Onde,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Normalizando a função de onda, para que termos o máximo de probabilidade de encontrar os autovalores no espaço em questão, exigiremos que:

$$\int_0^1 |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (2.18)$$

Admitindo na equação (2.15) a ortogonalidade, e que os autoestados estejam normalizados, temos:

$$\begin{cases} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = \delta_{01} \\ \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = \delta_{00} \end{cases}$$

Utilizando as condições do delta de Kronecker, equação (2.17), encontramos que o produto interno será:

$$\begin{cases} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = 0 \\ \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 1 \end{cases}$$

Assim obtemos da equação (2.16):

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (2.19)$$

Dessa mesma forma podemos dizer que um operador é dito hermitianos se for igual ao seu conjugado hermitianos:

$$\left(H^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right. \right)^+ = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| H^{(0)+} \right. \right\rangle = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| H^{(0)} \right. \right\rangle \quad (2.20)$$

Temos:

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle \in \mathbb{R} \text{ (Reais)} \quad (2.21)$$

Assim, tomando o conjugado da equação (2.21):

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle^* = \left\langle \psi_n^{(1)} \left| H^{(0)+} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \left\langle \psi_n^{(1)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (2.22)$$

De acordo com a equação (2.4) temos que:

$$\left\langle \psi_n^{(1)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \left\langle \psi_n^{(1)} \left| E_n^{(0)} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle$$

Como $E_n^{(0)}$ é uma escalar:

$$\left\langle \psi_n^{(1)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right. \right\rangle \quad (2.23)$$

Logo,

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \left| H' \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle$$

Tomando o conjugado, equação (2.18):

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(1)} \left| H^{(0)} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \left| H' \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle$$

Substituindo a equação (2.23), obtemos:

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Aplicando a ortogonalidade, equação (2.17), obtemos finalmente:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (2.24)$$

Onde essa equação é o resultado fundamental da teoria de perturbação de primeira ordem, composta por um produto interno dos vetores de estado (braket). O H' é o valor esperado para a perturbação do hamiltoniano e $E_n^{(1)}$ é a correção de primeira ordem da energia para o n ésimo termo do hamiltoniano perturbado.

Interpretando a equação (2.24) percebemos que a correção de primeira ordem para a energia é o valor esperado da perturbação no estado não perturbado, uma vez que estas são as correções mais relevantes na perturbação, por ser a correção de maior valor [10].

2.3 Correção Para o Autoestado

Para encontrar a correção de primeira ordem para a função de onda, iremos novamente utilizar a expressão (2.14) para a expansão de primeira ordem:

$$H^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + H' | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Ajustando a equação para que os termos “não perturbados” fiquem

apenas do lado esquerdo da equação e os termos que representam as perturbações fiquem do outro lado, temos:

$$H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = -H'|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Colocando em evidencia $|\psi_n^{(1)}\rangle$ no primeiro termo e $|\psi_n^{(0)}\rangle$ no segundo membro teremos:

$$\left(H^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|\psi_n^{(1)}\rangle = \left(-H' + E_n^{(1)}\right)|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Por comodidade iremos colocar o sinal negativo do segundo membro em evidencia para que os termos fiquem semelhantes:

$$\left(H^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|\psi_n^{(1)}\rangle = -\left(H' - E_n^{(1)}\right)|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (2.25)$$

As funções de onda não perturbadas constituem um conjunto completo, portanto $\psi_n^{(1)}$, assim como qualquer outra função pode ser expressa como uma combinação linear delas. Então, pelo princípio da superposição, podemos escrever uma combinação linear das autofunções não perturbadas:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = C_n^{(1)}|\psi_1^{(0)}\rangle + C_2^{(1)} + \dots + C_m^{(1)}|\psi_m^{(0)}\rangle$$

Assim,

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} C_m^{(n)} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (2.26)$$

Essa é a Equação Geral para a correção dos autoestados, logo veremos o porquê de $m \neq n$.

Não há a necessidade de incluir $m = n$ na somatória, pois se $\psi_n^{(1)}$ satisfaz a equação (2.25), então $(\psi_n^{(1)} + \alpha\psi_n^{(0)})$ também o faz para qualquer constante α , e podemos usar essa liberdade para subtrair o termo $\psi_m^{(0)}$. Determinaremos o coeficiente $C_m^{(n)}$, pra que ao substituirmos na equação (2.26), obtemos a equação geral para a correções de primeira ordem para os autoestados.

Substituindo a equação (2.26) na equação (2.25), temos:

$$\sum_{m \neq n} (H^{(0)} - E_n^{(0)}) C_m^{(n)} |\psi_m^{(0)}\rangle = -(H' - E_n^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (2.27)$$

Tomando o produto interno com $\langle \psi_l^{(0)} |$:

$$\sum_{m \neq n} \langle \psi_l^{(0)} | (H^{(0)} - E_n^{(0)}) C_m^{(n)} |\psi_m^{(0)}\rangle = -\langle \psi_l^{(0)} | (H' - E_n^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\sum_{m \neq n} [\langle \psi_l^{(0)} | H^{(0)} C_m^{(n)} |\psi_m^{(0)}\rangle - \langle \psi_l^{(0)} | E_n^{(0)} C_m^{(n)} |\psi_m^{(0)}\rangle] = -\langle \psi_l^{(0)} | H' |\psi_n^{(0)}\rangle + \langle \psi_l^{(0)} | E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \rangle$$

Separando os somatórios e pondo as constantes para fora do produto interno, obtemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{m \neq n} C_m^{(n)} \langle \psi_l^{(0)} | H^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle - \sum_{m \neq n} C_m^{(n)} E_n^{(0)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle = \\ & = -\langle \psi_l^{(0)} | H' |\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle \end{aligned}$$

Aplicando a equação (2.23) na equação acima:

$$\begin{aligned} & \sum_{m \neq n} C_m^{(n)} E_m^{(0)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle - \sum_{m \neq n} C_m^{(n)} E_n^{(0)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle = \\ & = -\langle \psi_l^{(0)} | H' |\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (2.28)$$

Tomando $m = l \neq n$, temos:

$$C_l^{(n)} E_l^{(0)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_l^{(0)} \rangle - C_l^{(n)} E_n^{(0)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_l^{(0)} \rangle = - \langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_l^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Sabendo que as autofunções são ortogonais, podemos reescrever a equação acima como:

$$C_l^{(n)} E_l^{(0)} - C_l^{(n)} E_n^{(0)} = - \langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Colocando $C_l^{(n)}$ e evidenciando:

$$C_l^{(n)} [E_l^{(0)} - E_n^{(0)}] = - \langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$C_l^{(n)} = \frac{\langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \quad (2.29)$$

Obtemos, na equação (2.29), o coeficiente de perturbação para as autofunções. Esse coeficiente representa a perturbação em cada ordem, sendo, seu valor, diminuído a medida q se aumenta a ordem de perturbação.

Para defini a equação de correção para primeira ordem dos autoestados basta substituir o coeficiente de perturbação, encontrado na equação (2.29) na equação geral (2.26) temos:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_l^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} |\psi_l^{(0)}\rangle \quad (2.30)$$

Que dá as correções de primeira ordem para os autoestados em teoria de

perturbação independente do tempo [8]. Como $l = m$ e, para que tenhamos um denominador não nulo, temos o porquê de $m \neq n$ na expressão (2.30).

3. CONSIDERAÇÕES FINAIS

No trabalho apresentado mostrou o quanto se fazia necessário novas propostas para explicar problemas existentes no final do século XIX, sendo mostrado o surgimento de uma teoria que fosse capaz de explicar satisfatoriamente os problemas da época, como a Radiação do Corpo Negro, o Efeito Fotoelétrico, entre outros. Tais explicações rompiam com o determinismo clássico, surgindo teorias probabilísticas.

Indagações e descobertas feitas por célebres personagens que constituíram e contribuíram significativamente para a história da Mecânica Quântica, como Planck e tantos outros. Em seguida tratamos da equação de Schroedinger, que como foi mostrado representa a dinâmica do comportamento das funções de onda no mundo quântico, a partir do método de separação de variáveis obtemos a equação na sua forma independente do tempo, que foi de suma importância para a evolução desse trabalho.

Tomando como princípio a equação de Schroedinger independente do tempo, vimos que é possível calcular valores exatos para as autofunções e para os autovalores de um potencial em específico. Tais estados são denominados não perturbados. Contudo vimos, que ao provocar certas alterações no potencial do problema, produzimos uma alteração em suas autofunções e em seus autovalores. Induzindo uma alteração de seus módulos, que deixam de ser exatos e passam a ser aproximados de acordo com cada correção sofrida. Esses estados passam a ser denominados perturbados.

Este trabalho esteve voltado principalmente para a correção de primeira ordem, uma vez que estas são as correções mais relevantes na perturbação, pois à medida que se aumenta a ordem das perturbações os valores irão diminuir até que a correção na perturbação torne-se insignificante. Como vimos a correção de primeira ordem para a energia é justamente o valor esperado da perturbação no estado não perturbado. Isso é um resultado característico da Teoria da Perturbação Independente do Tempo.

Para trabalhos futuros buscaremos encontrar as expressões para as demais ordens de perturbação, bem como aplicar a teoria em problemas da

mecânica quântica, como: O poço de potencial, o potencial tipo delta, entre outros.

4. Referências

- [1] MAIA, Nelson B. **O caminho para a física quântica**/ Nelson B. Maia. São Paulo: Livraria da Física, 2009.
- [2] LIMA, Carlos R. A.. **Notas de aula de Física Moderna**. [S.l.:s.n.], 2008.
- [3] EBAH. <http://www.ebah.com.br/content/ABAAABoyMAA/introducao-fisica-quantica>. Acessado em 29 de abril de 2012 às 11h.
- [4] CROCA, J. R.. **A Razão e o Espírito Científico**. PALESTRA NO SIMPÓSIO, Universidade de Lisboa, Ed. C8, Campina Grande, 2002.
- [5] MANIERO, Angelo Marconi. **Notas de Aula do Curso: Introdução à Mecânica Quântica**. Versão 7.0, [S.l.:s.n.], 2006.
- [6] TEOTÓNIO, Marcos D. N. Pereira. **Mecânica Quântica**. [S.l.:s.n.], 2003.
- [7] ARFKEN, G. B. & WEBER, J. H.; **Física Matemática para engenharia e Física**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- [8] ZETTILI, Nouredine. **Quantum Mechanics Concepts and Applications**. 2nd ed. Jacksonville, USA. [s.n.], 2009.
- [9] FLEMING, Henrique. **Mecânica Quântica. Obra Coletiva**. [S.l.:s.n.], [2000?].
- [10] GRIFFITHS, David J. . **Mecânica Quântica**. 2^a ed. – São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- [11] PLENIO, Martin. **Quantum Mechanics II**. Lectures Notes at imperial Collegi. [S.l.:s.n.], 2000.
- [12] EISBERG, R. & RESNICK, R.. **Quantum Physics: of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles**. 2nd ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1985.
- [13] DIONÍSIO, P. H.. **Albert Einstein e a Física Quântica**. Instituto de Física – UFRGS; Porto Alegre. [s.n.], [2002?]
- [14] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J.. **Fundamentos de Física 4 – Ótica e Física Moderna**. Tradução de Denise Helena da Silva Sotero, Gerson Bazo Costamilan, Luciano Videira Monteiro e Ronaldo Sérgio de Biasi. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1995. Título original: Fundamentals of Physics, 4th edition, Extended Version.
- [15] YOUNG, H. D.. **Ótica e Física Moderna**. Tradução de Cláudia Martins, 12 ed. São Paulo: Pearson, 2009. Título original: Searand Zemansky's University Physics, 12 edition, americana.

- [16] WIKIPEDIA. http://pt.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Efeitofotoeletrico_-_Thiago_-_UNIFEI.jpg. Acessado em 01 de junho de 2012 às 9h40min.
- [17] THIBES, Ronaldo. **Álgebra Linear e Mecânica Quântica**. V bienal de SBM. 2010. Artigo.
- [18] TIPLER, P.A. & LLEWELLYN, R.A. **Física Moderna**; tradução Ronaldo Sérgio e Biasi - Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [19] ROSA, P. S. **Louis De Broglie e as ondas de matéria**. Campinas: IFGW – Unicamp, 2004. Dissertação de mestrado.
- [20] UNICAMP. <http://www.ifi.unicamp.br/~jmoreira/gama.html>. Acessado em 02 de julho de 2012 às 16h.
- [21] HOSSRI, I. M. **O Limite Clássico da Mecânica Quântica**. 2008. 71 f. Tese (Monografia em Física)- Pontifca Universidade Católica de São Paulo-PUC, São Paulo. 2008.

APÊNDICE

Apêndice A

Efeito Compton

Para analisar o Efeito Compton, é necessário levar em conta que o efeito é relativístico já que o fóton é uma partícula relativística e viaja à velocidade da luz. Então devemos usar as equações da relatividade para a variação da massa, da energia e do momento linear. A massa m de uma dada partícula é dada por $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ sendo m_0 a massa de repouso, c a velocidade da luz.

As energias totais antes e depois do choque são dadas respectivamente por;

$$E = hv + mc^2 \quad \text{e} \quad E = hv' + mc^2$$

Aplicando a conservação da energia e momento linear, obtém-se:

- Sobre a conservação da energia

$$hv + m_0c^2 = hv' + mc^2$$

$$h \frac{c}{\lambda} + m_0c^2 = h \frac{c}{\lambda'} + mc^2$$

Reorganizando a equação acima e elevando ambos os lados ao quadrado obtém-se:

$$\left[hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) + m_0c^2 \right]^2 = m^2c^4$$

Ou,

$$h^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right)^2 + 2 h c^3 m_0 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) + m_0^2 c^4 = m^2 c^4$$

- Sobre a conservação do momento linear

Conservação do momento linear componente x e componente y respectivamente:

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \phi + mv \cos \theta \quad e \quad 0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \phi + mv \sin \theta$$

Eliminando os termos contendo θ nas equações acima. Para isto faz-se o quadrado de ambos lados das duas equações acima.

$$h^2 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{\cos \phi}{\lambda'} \right)^2 = m^2 v^2 \cos^2 \theta \quad e \quad \frac{h^2}{\lambda'^2} \sin^2 \phi = m^2 v^2 \sin^2 \theta$$

Somando ambas as equações:

$$h^2 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{\cos \phi}{\lambda'} \right)^2 + \frac{h^2}{\lambda'^2} \sin^2 \phi = m^2 v^2 \cos^2 \theta + m^2 v^2 \sin^2 \theta = m^2 v^2$$

Multiplicando por c^2 ambos os lados da equação acima, chega-se a:

$$c^2 h^2 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{\cos \phi}{\lambda'} \right)^2 + \frac{c^2 h^2}{\lambda'^2} \sin^2 \phi = c^2 m^2 v^2$$

$$\frac{c^2 h^2}{\lambda^2} - \frac{2 c^2 h^2 \cos \phi}{\lambda \lambda'} + \frac{c^2 h^2}{\lambda'^2} = c^2 m^2 v^2$$

Subtraindo as duas equações acima:

$$-\frac{2 c^2 h^2}{\lambda \lambda'} + m_0^2 c^4 + 2 h c^3 m_0 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) + \frac{2 c^2 h^2}{\lambda \lambda'} \cos \phi = m^2 c^4 - m^2 v^2 c^2$$

O segundo membro da equação acima pode ser reescrito:

$$m^2 c^4 - m^2 v^2 c^2 = m^2 c^2 (c^2 - v^2) = \frac{m_0^2 c^2}{\frac{(c^2 - v^2)}{c^2}} (c^2 - v^2) = m_0^2 c^4$$

Com isto a equação acima assume a forma

$$\frac{2 c^2 h^2}{\lambda \lambda'} (1 - \cos \phi) = 2 h c^3 m_0 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = 2 h c^3 m_0 \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda \lambda'}$$

Simplificando ambos os lados da equação acima:

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{c m_0} (1 - \cos \phi) = \frac{2h}{c m_0} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\phi}{2} \right)$$

Onde foi usada a relação trigonométrica:

$$1 - \cos \phi = 1 - \cos \left(\frac{\phi}{2} + \frac{\phi}{2} \right) = 1 - \cos^2 \left(\frac{\phi}{2} \right) + \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\phi}{2} \right)$$

Definido $\lambda_0 = \frac{2h}{c m_0}$ como sendo o comprimento de onda de Compton,

temos que:

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_0 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\phi}{2} \right)$$

Apêndice B

Autovalores e Autofunções

Para esclarecer estes novos conceitos serão mostrados que a função $\psi = Ae^{ikx}$ é uma autofunção do operador momento linear (\hat{p}) e que a função $\psi = Ae^{ikx^2}$ não é autofunção de \hat{p} . Para verificar isto basta aplicar o operador \hat{p} na função de onda, como a seguir. Por definição o operador momento é igual a:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

Portanto;

$$\hat{p}_x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (Ae^{ikx}) = \frac{\hbar}{i} ik Ae^{ikx} = \hbar k (Ae^{ikx}) = \hbar k \psi$$

Que pode ser escrita na forma;

$$\hat{p}_x \psi = \hbar k \psi = p \psi$$

Assim é possível dizer que a função de onda $\psi = Ae^{ikx}$ é autofunção do operador \hat{p} com autovalor $\hbar k$. Como o número de onda k pode ser escrito em termos do comprimento de onda λ , temos que:

$$p = \hbar k = \frac{\hbar}{2\pi} k = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\hbar}{\lambda}$$

Que é equivalente ao resultado obtido por Bohr na quantização do átomo de hidrogênio. A agora será verificando que a função $\psi = Ae^{ikx^2}$ não é autofunção do

operador \hat{p} .

$$\hat{p}_x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (Ae^{ikx^2}) = \frac{\hbar}{i} 2ikx(Ae^{ikx^2}) = (2\hbar kx)\psi$$

Analisando o último termo entre parêntese na equação acima nota-se que ele não é uma constante, mas sim depende da posição. E se esta equação fosse escrita por:

$$\hat{p}_x \psi = (2\hbar kx)\psi = (2\hbar kx)\psi'$$

Ela seria uma equação de autovalor? Não, mesmo nesta forma ela não é uma equação de autovalor por que as funções ψ e ψ' são diferentes.

Apêndice C

Espaço de Hilbert

As operações no espaço de Hilbert seguem as seguintes regras: H é um conjunto de objetos, com uma operação de soma de vetores definida de tal forma que:

- Se dois vetores $|f\rangle$ e $|g\rangle \in H$ então a soma $|f\rangle + |g\rangle$ também é um vetor de H .
- A soma é comutativa e associativa: $|f\rangle + |g\rangle = |g\rangle + |f\rangle$ e $(|f\rangle + |g\rangle) + |h\rangle = |f\rangle + (|g\rangle + |h\rangle)$.
- Existe em H um vetor chamado nulo de tal forma que: $|f\rangle + 0 = |f\rangle$ para qualquer $|f\rangle \in H$.

Também está definida uma operação de produto escalar de tal forma que, se α e β pertencem ao conjunto dos complexos, e $|f\rangle$ e $|g\rangle$ são elementos de H então:

$$\begin{aligned} \alpha|f\rangle &\in H \\ (\alpha\beta)|f\rangle &= \alpha(\beta|f\rangle) \\ (\alpha + \beta)|f\rangle &= \alpha|f\rangle + \beta|f\rangle \\ \alpha(|f\rangle + |g\rangle) &= \alpha|f\rangle + \alpha|g\rangle \\ 1 \cdot |f\rangle &= |f\rangle \end{aligned}$$

Onde temos que H tem um produto interno, ou seja, pode-se definir uma operação entre dois vetores $|f\rangle$ e $|g\rangle$ que fornece um escalar, denotada por, $|f\rangle \cdot |g\rangle$, sendo que ele possui as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} (|f\rangle \cdot |g\rangle) &= (|g\rangle \cdot |f\rangle)^* \\ (|f\rangle \cdot |g\rangle + |h\rangle) &= (|f\rangle \cdot |g\rangle) + (|f\rangle \cdot |h\rangle) \\ (|f\rangle \cdot \alpha|g\rangle) &= \alpha(|f\rangle \cdot |g\rangle) \\ (\alpha|f\rangle \cdot |g\rangle) &= \alpha'(|f\rangle \cdot |g\rangle) \\ (|f\rangle \cdot |f\rangle) &\geq 0 \text{ e } (|f\rangle \cdot |f\rangle) = 0 \text{ se e somente se } |f\rangle = 0 \text{ (vetor nulo)} \end{aligned}$$

