

Capítulo 1

Picture de interacción y perturbación dependiente del tiempo

Puédese escribir perturbaciones dependientes del tiempo

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

con $|n\rangle$ no dependiente del tiempo. Se estudiarán transiciones entre autoestados del H_0 (que son estacionarios). Un autoestado permanece en el tiempo como tal pero con fase oscilante

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_s &= e^{-iH/\hbar(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle_s \\ &= e^{-iH/\hbar(t-t_0)} e^{-iV(t)/\hbar(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iH_0/\hbar t} e^{-iV(t)/\hbar t} |n\rangle \langle n | \alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n^0/\hbar t} |n\rangle e^{-iV(t)/\hbar t} \langle n | \alpha, t_0\rangle \\ e^{iH_0/\hbar t} |\alpha, t_0, t\rangle_s &= \sum_n \underbrace{e^{-iV(t)/\hbar t} \langle n | \alpha, t_0\rangle |n\rangle}_{C_n(t)} = |\alpha, t_0, t\rangle_I \end{aligned}$$

es decir

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0/\hbar t} |\alpha, t_0, t\rangle_s$$

Aquí se puede pensar que

- $C_n(t)$ evoluciona por $V(t)$

- $e^{-iE_n^0 t/\hbar}$ evoluciona por H_0

Esto introduce la *picture* de interacción de Dirac; en la cual los estados evolucionan con $V(t)$.

	Dirac	Schrödinger	Heisenberg
estados $ \alpha\rangle$	evolucionan con $V(t)$	evolucionan con H	fijos
operadores	evolucionan con H_0	fijos	evolucionan con H
base $ a'\rangle$	fijos	fijos	evolucionan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_s = H |\alpha, t_0, t\rangle_s$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I \right) = H e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar e^{-iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

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

que es la ecuación de evolución de los kets. Pediremos asimismo que

$${}_s \langle A_s \rangle_s = {}_I \langle A_I \rangle_I$$

$${}_I \langle \alpha, t_0, t | A_I | \alpha, t_0, t \rangle_I = {}_s \langle \alpha, t_0, t | e^{-iH_0 t/\hbar} A_I e^{iH_0 t/\hbar} | \alpha, t_0, t \rangle_s = {}_s \langle \alpha, t_0, t | A_s | \alpha, t_0, t \rangle_s =$$

Y los operadores evolucionan según

$$A_I = e^{iH_0 t/\hbar} A_s e^{-iH_0 t/\hbar}$$

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0]$$

que es igual que la ecuación de Heisenberg pero con \hat{H}_0 en lugar de H . Los kets base permanecen fijos, porque así lo hacen en Schrödinger, en realidad oscila su fase; entonces

$$|n, t_0, t\rangle_s = e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_s$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_s = e^{-iVt/\hbar} |n, t_0\rangle_s = e^{iH_0 t/\hbar} |n, t_0\rangle_s$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iE_0 t/\hbar} |n, t_0, t\rangle_s$$

1.0.1 Evolución de los coeficientes

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle$$

$$C_n(t) = e^{iVt/\hbar} \langle n | \alpha, t_0\rangle_s$$

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

con $|n\rangle, |m\rangle$ autoestados de H_0 , le pego un $\langle n|$ a la ecuación de evolución de kets,

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

$$= \sum_m \langle n | V_I(t) | m\rangle \langle m | \alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m C_m(t) \langle n | V_I(t) | m\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m C_m(t) \langle n | V_s | m\rangle e^{it(E_n - E_m)/\hbar}$$

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

donde $V_{nm}(t) \equiv \langle n | V(t) | m\rangle$ y $\omega_{nm} \equiv (E_n - E_m)/\hbar$. Esta es la ecuación que cumplen los coeficientes, donde $|C_n(t)|^2$ es la probabilidad de hallar al sistema en el autoestado $|n\rangle$. Es decir

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dots \\ \dot{c}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12}} & \dots \\ V_{21} e^{i\omega_{21}} & V_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_N \end{pmatrix}$$

que puede ser de difícil solución.

1.0.2 Método perturbativo (dependiente del tiempo)

Pensaremos en una serie perturbativa

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

El evolucionador temporal en la picture de interacción cumple

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

que viene de

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

con $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ la cual resolviendo nos hace llegar a

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

y esto lleva a la serie de Dyson:

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

1.0.3 Transiciones entre autoestados del hamiltoniano H_0

$$|i, t_0 = 0, t\rangle_I = U_I(t, 0) |i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | U_I(t) | i\rangle$$

y como se viera oportunamente

$$|i, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle = \sum_n (\langle n | U_I(t) | i\rangle) |n\rangle$$

La amplitud de transición será

$$C_n(t) = \langle n | U_I(t) | i\rangle$$

con $|i\rangle, |n\rangle$ autoestados de H_0 . Sea $\tilde{C}_n(t) = \langle n | U_S(t) | i\rangle$ y busquemos una expresión

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

y notemos que \hat{U} no obedece la ley de transformación de operadores.

$$C_n(t) = \langle n | e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} | i\rangle$$

$$C_n(t) = e^{-i/\hbar[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \langle n | U_S(t, t_0) | i \rangle = e^{-i/\hbar[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \tilde{C}_n(t) \\ \Rightarrow |C_n(t)|^2 = |\tilde{C}_n(t)|^2.$$

Para transiciones entre autoestados de H_0 los coeficientes dan la misma probabilidad (evaluados con el evolucionador de Dirac que con el de Schrödinger). Vamos a las transiciones a los tres

- orden 0

$$C_n^{(0)}(t) = \langle n | 1 | i \rangle = \delta_{ni}$$

- orden 1

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}} V_{ni}(t') dt' \quad V_{ni} \equiv \langle n | V(t) | i \rangle$$

- orden 2

$$C_n^{(2)}(t) = \sum_m \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{it'/\hbar(E_n - E_m)} V_{nm}(t') e^{it''/\hbar(E_m - E_i)} V_{mi}(t'')$$

y entonces la probabilidad de ir desde $|ket i\rangle \rightarrow |i\rangle$, hasta orden dos, sería

$$P_{i \rightarrow n}^{(2)} = |C_n^{(0)}(t) + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t)|^2$$

1.0.4 Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente

Notemos que $V \neq V(t)$. Dependerá de cualquier otra cosa.

$$C_n^0(t) = 0$$

$$C_n^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i/\hbar(E_n - E_i)t'} V_{ni} dt' = \frac{V_{ni}}{(E_n - E_i)} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

$$|C_n^1(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right)$$

Es máxima la probabilidad cuando $\Delta E \rightarrow 0$. En ese caso las transiciones son a estados de la misma energía. A tiempo largo la probabilidad es no nula para aquellos estados

$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega_{ni}|}$$

Hay probabilidad de transición $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ apreciable con $\Delta E \sim 0$.

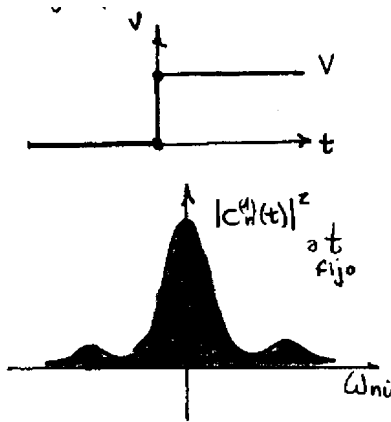


Figura 0.1

1.1 Scattering: orden 1

Este último ejemplo puede aplicarse a colisiones elásticas. Prendemos y apagamos un potencial que es el masacote al cual impactamos. De entrada ha partículas libres y de salida (lejos de V) partículas libres. Entonces $E_n - E_c \sim 0$ y consideraremos lo que sucede a tiempos largos. Interesará la probabilidad total de transicionar a estados de energía similares a E_i . Por ello se considera

$$\sum_{E_n \sim E_i} |C_n^1(t)|^2 \rightarrow \int dE_n \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2$$

donde el integrando es el número de estados dentro de un intervalo de energías $(E, E + dE)$. En tiempos muy largos la expresión [1] tiende a una delta de Dirac

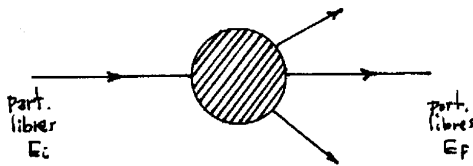


Figura 1.2

y se integra fácil,

$$\lim \int dE \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\bar{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i}$$

La probabilidad de transición es proporcional a t . Se suele definir una tasa de transición (probabilidad de transición por unidad de tiempo)

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{E_n \sim E_i} |C_n^{(1)}|^2 \right) = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\bar{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) = \omega_{i \rightarrow n}^{(1)}$$

que es la regla de oro de Fermi.

1.2 El método variacional

Se puede usar para aproximar la energía del estado fundamental (el estado de energía mínima)

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi | n \rangle \langle n | H | m \rangle \langle m | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_n \langle \psi | n \rangle \langle n | m \rangle \langle m | \psi \rangle$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_n C_n^* \langle n | m \rangle C_m = \sum_n E_n |C_n|^2$$

$$\sum_n E_n |C_n|^2 \geq \sum_n E_0 |C_n|^2 = E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0 \langle \psi_n | \psi_n \rangle$$

y usamos

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle \quad \langle \psi | = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n |$$

para arribar a

$$\frac{\langle \psi_n | H | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \geq E_0.$$

1.2.1 Scattering a orden dos y OFPT

Continuando con el orden dos de scattering por un $V \neq V(t)$ se tiene:

$$\omega_{i \rightarrow n}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \overline{V_{ni} + \sum_{m \neq i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{(E_i - E_m)}} \right|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i}$$

Para obtener los siguientes términos dentro del $||^2$ podemos emplear un ardid gráfico conocido como *Old Fashioned Perturbation Theory*

Fijese que en los estados intermedios estados virtuales $|m\rangle, |j\rangle$ no se conserva la energía. Son propagadores.

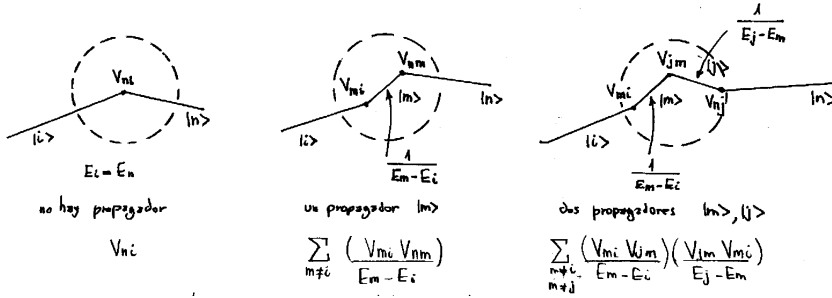


Figura 2.3

1.2.2 Perturbación armónica

Sea un potencial armónico y hermítico

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

quiero ver probabilidad de transición a orden uno,

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t (V_{ni} e^{i\omega t'} + V_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'}) e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

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

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ni} \frac{e^{i(\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(\omega + \omega_{ni})} + V_{ni}^\dagger \frac{e^{i(-\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(-\omega + \omega_{ni})} \right]$$

$$C_n(t)^1 = \frac{V_{ni}}{\hbar} \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{(\omega + \omega_{ni})} + \frac{V_{ni}^\dagger}{\hbar} \frac{1 - e^{i(-\omega + \omega_{ni})t}}{(-\omega + \omega_{ni})}$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n(t)^1 = \frac{1}{\hbar} [V_{ni} \delta(\omega_{ni} + \omega) + V_{ni}^\dagger \delta(\omega_{ni} - \omega)]$$

Luego será nulo sólo si

$$\omega_{ni} = -\omega \quad \rightarrow \quad \frac{E_n - E_i}{\hbar} = -\omega \quad E_n = E_i - \hbar\omega$$

$$\omega_{ni} = -\omega \quad \rightarrow \quad \frac{E_n - E_i}{\hbar} = \omega \quad E_n = E_i + \hbar\omega$$

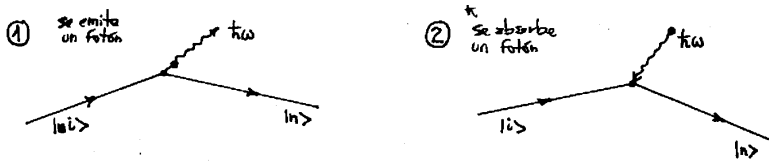


Figura 2.4

Luego,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n(t)^1$$

representa la probabilidad de emitir o absorber fotones en una interacción. Se puede asociar que V crea fotones y V^\dagger destruye fotones. Para un átomo se tiene

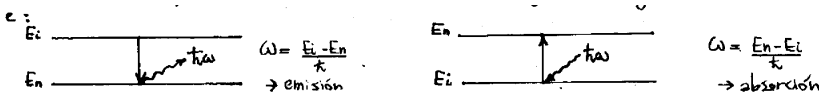


Figura 2.5

1.3 Despoblamiento de estados iniciales

Queremos ver con cual v se despoblan los $|i\rangle$. Para ello me construyo un potencial *suave*

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} V(t) = e^{\eta t} \Psi, \quad \forall \text{cte.}$$

donde η es un parámetro regularizador.

$$C_n(t)^1 = \lim_{t \rightarrow \infty} -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{ni} e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{\eta t} e^{i\omega_{ni} t}}{\eta + i\omega_{ni}} \quad |C_n(t)^1|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

$$\frac{d}{dt} |C_n(t)^1|^2 = 2\eta \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

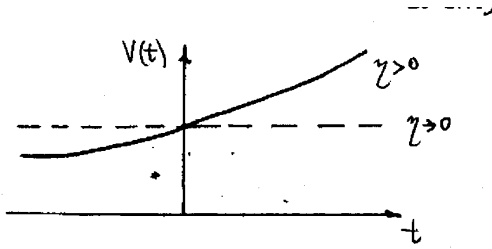


Figura 3.6

y tomando el límite $\eta \rightarrow 0$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{d}{dt} |C_n(t)|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega_{ni}^2 \neq 0 \\ \infty & \text{si } \omega_{ni}^2 = 0 \end{cases}$$

y llegamos a la regla de oro de Fermi,

$$\frac{d}{dt} |C_n(t)|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{ni}) \pi$$

1.3.1 Scattering sección eficaz

$|k\rangle, |k'\rangle$ son autoestados de momento (partículas libres),

$$|k| = |k'|$$

se conserva la energía. Consideraremos la aproximación más baja (aproximación de Born).

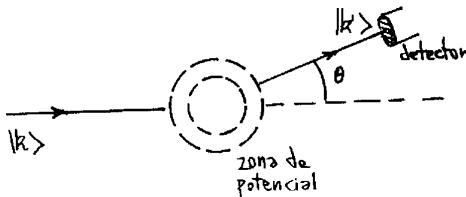


Figura 3.7

$$\omega = \int \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E' - E) |\langle k' | V | k \rangle|^2 \rho(E') dE'$$

queremos calcular la densidad de estados de energía entre $(E, E + dE)$. Pensamos en una partícula libre en una caja $1D$ de longitud L .

$$N e^{ik_x x/\hbar}, \quad \text{con } k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

pidiendo normalización unitaria $\langle k | k \rangle = 1$ se tiene

$$\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x/\hbar}$$

con $L \rightarrow \pm\infty$ son n_x, k_x continuas.

$$\begin{aligned} dk_x &= \frac{2\pi}{L} dn_x \quad \longrightarrow \quad dn_x = \frac{L}{2\pi} dk_x \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2 \quad \longrightarrow \quad n^2 = \frac{L^2}{(2\pi)^2} k^2 \\ dE &= \frac{\hbar^2}{m} k dk \quad \longrightarrow \quad dn = \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k} dE \\ n^2 dn d\Omega &= \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} dE d\Omega \end{aligned}$$

donde $n^2 dn d\Omega$ es la densidad de estados de energía $(E, E + dE)$ en $d\Omega$

$$n^2 dn d\Omega = \rho(E') dE'$$

Con esto sale la integral obteniéndose

$$\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^3} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 k' d\Omega$$

Esta es la probabilidad de transición entre los impulsos \mathbf{k}, \mathbf{k}' . Es el número de partículas en la unidad de tiempo por unidad de área

$$\text{seccion eficaz} \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\# \text{ de part en } d\Omega \text{ en la unidad de t}}{\# \text{ de part incidentes en la unidad de t por unidad de área}}$$

Un elemento de matriz $\langle k' | V | k \rangle$ será

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int dx' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{x}' \frac{1}{L^3} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}'),$$

la transformada de Fourier del potencial es, amén de constantes, la amplitud a

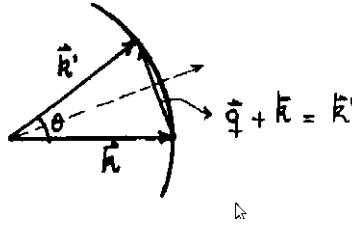


Figura 3.8

primer orden

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\theta/2) \quad \text{con } k = k'$$

Entonces para cualquier potencial esféricamente simétrico se puede hacer la integral

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \left(\frac{2m}{4\pi\hbar} \right)^2 \int d^3x' V(x) e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\cdot\mathbf{x}'} \right|^2$$

y expresamos todo en función de $q = q(\theta)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \sin(qr) dr \right|^2$$

Utilizando un potencial de Yukawa primero y tomando el límite para llegar al de Coulomb tenemos la sección eficaz de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2m^2 e^4}{\hbar^4} \frac{1}{16k^4 \sin^4(\theta/2)}$$

hay que tomar el potencial de Yukawa y luego el límite porque el de Coulomb diverge de entrada