

Picture de interacción y perturbación dependiente del tiempo

Estudiaremos perturbaciones dependientes del tiempo

$$H = H_0 + V(t), \quad H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

donde, no obstante, $|n\rangle$ no dependiente del tiempo. La idea es que hasta $t = 0$ no hay potencial V y luego al *encenderse* el potencial el estado pasará a otro

$$|i\rangle \longrightarrow |j\rangle.$$

Se estudiarán transiciones entre autoestados del mismo hamiltoniano H_0 (que son estacionarios). Un autoestado permanece en el tiempo como tal pero con fase oscilante (como veremos).

Esta deducción está diferente de la carpeta, confío en que sea una versión depurada. Se la analizará en la próxima fase.

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

es decir que se escriben los kets como

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

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* (o representación) de Dirac, también llamada “de interacción”, en la cual los estados evolucionan con $V(t)$. La siguiente tabla compara con las anteriores [atrasarla porque lo de los operadores aparece después]

	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

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

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

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

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

que es la ecuación de evolución de los kets, y es equivalente a la ecuación de Schrödinger.

La definición debe verificar asimismo que

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

lo cual conduce a

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

o bien a que 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

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

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

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

Finalmente, resta ver qué le sucede a los coeficientes.

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

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

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

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 $|n\rangle$. Resolver esto puede ser muy difícil, salvo

En la carpeta está primero lo de los kets base y luego la ecuación de movimiento que acá aparece inmediatamente debajo de la tabla. Aquí habrá que reordenar material.

en los casos en que es tan fácil que no nos sirve de nada ¹. Esto puede ponerse en forma matricial como

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

1.0.1 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

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

que viene de

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

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

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

Esta ecuación debe proporcionarnos la forma de hallar U_I . Se puede usar una iteración sencilla

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

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

y esto lleva a la serie de Dyson, casi una expresión formal,

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

que es una especie de exponencial $e^{T[-i/\hbar \int V(t) dt]}$.

La serie de Dyson puede verse como un desarrollo perturbativo.

¹Esto es un patrón que se observa a menudo en física teórica.

1.0.2 Transiciones entre autoestados del hamiltoniano

H_0

Veamos el detalle de las transiciones en el formalismo de Dirac.

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

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 $\tilde{C}_n(t) = \langle n | U_s(t) | i\rangle$, donde vemos que $\tilde{C}_n(t)$ y $C_n(t)$ difieren en una fase, 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.

$$\begin{aligned} C_n(t) &= \langle n | e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} | i\rangle \\ C_n(t) &= e^{-i/h[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \langle n | U_S(t, t_0) | i\rangle = e^{-i/h[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \tilde{C}_n(t) \end{aligned}$$

lo que lleva a

$$|C_n(t)|^2 = |\tilde{C}_n(t)|^2.$$

Para transiciones entre autoestados de H_0 los coeficientes dan la misma probabilidad (evaluados con el evolucionador de Dirac que con el de Schrödinger). Debe notarse que esto se cumple siempre y cuando la transición sea entre autoestados del hamiltoniano y la fase resulte así global.

Veamos las transiciones

$$\langle n | U_I(t, t_0) | i\rangle$$

a los diferentes órdenes en la perturbación

- orden 0

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

- orden 1

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

- 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 $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ con $i \neq n$, hasta orden dos, sería

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

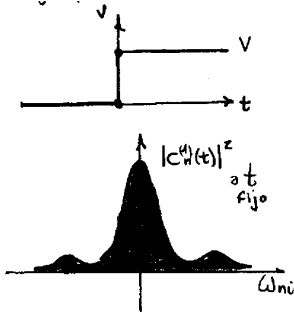
donde debe notarse que hay interferencia entre los diversos términos.

1.0.3 Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente

Sea un potencial que prendemos y apagamos luego, pero constante. Es decir

$$V(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ V(r, p, s, L, \dots) & t \geq 0 \end{cases}$$

donde $V \neq V(t)$, pero puede depender de cualquier otra cosa. La figurilla más abajo ilustra este *escalón*.



A orden cero no vemos cambio pues

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

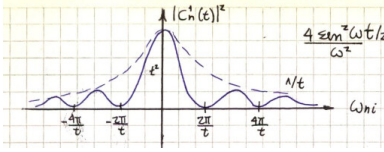
A orden uno es

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

donde debemos notar que si esto revienta porque $E_n \sim E_i$ entonces la teoría de perturbaciones no puede usarse aquí.

Evaluando la probabilidad se tiene

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



Es máxima la probabilidad cuando $\Delta E \rightarrow 0$. En ese caso las transiciones son a estados de la misma energía. El gráfico de arriba es a un dado t fijo. A medida que el tiempo transcurre el gráfico tiende a una delta de Dirac.

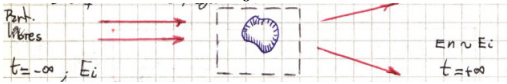
A tiempo largo la probabilidad es no nula para aquellos estados

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

Hay probabilidad de transición $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ apreciable donde $\omega = \frac{2\pi}{t} = \frac{\Delta E}{\hbar}$ dado que $\Delta t \Delta E \sim \hbar$. O bien, $\Delta E \sim 0$.

1.1 Scattering

Podemos pensarlo como el caso de un potencial que se prende y apaga, representando éste el objeto contra el cual se hace scattering.



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 transicionear a estados de energía similares a E_i . Por ello se considera

$$\sum_{E_n \sim E_i}^n |C_n^1(t)|^2 \rightarrow \int \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2 dE_n \quad (1.1)$$

donde el integrando es el número de estados dentro de un intervalo de energías $(E, E + dE)$ a los cuales se puede transicionar. Esta será la probabilidad de transición.

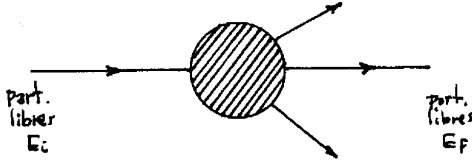


Figura 1.1

A primer orden la probabilidad será algo como

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int \rho(E_n) \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right) dE_n,$$

puesto que estamos considerando lo que sucede a tiempos muy largos. En esos casos, como la probabilidad tiende a una delta de Dirac,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right) = \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(E_n - E_i),$$

la integración es fácil y se obtiene

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

donde \bar{V}_{ni} es un potencial promedio. 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, y sirve para calcular cualquier transición entre estados para potenciales que no dependen del tiempo.

[reacomodar] La energía al final se mide con cierto error ΔE de modo que se obtendrá $E \pm \Delta E$ y deberá sumar [no sé bien qué se quiere decir acá]

$$\sum_n |C_n(t)|^2 \quad (E_n \sim E \pm \Delta E)$$

Pero si no es discreto necesitareé integrar (la integral (1.1))

1.2 El método variacional

Se puede usar para aproximar la energía del estado fundamental (el estado de energía mínima). No conocemos $|n\rangle$ ni E_n , pero $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ donde $\{|n\rangle\}$ es una base. Evaluamos

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

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

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

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

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

donde E_0 es la energía más baja. Esto no parece ser muy iluminador que digamos. Se considera que ψ es tal que

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)_{|x|\rightarrow\infty} \rightarrow 0$$

lo que significa que la función de onda es *well behaved* (bien comportada).

EJEMPLO 2.1 Ejercicio 10

A partir de $\langle x|\psi\rangle = e^{-\beta|x|}$ se tiene, intercalando la completitud,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\beta|x|} dx = \frac{1}{\beta}$$

y del mismo modo

$$\begin{aligned} \langle\psi|H|\psi\rangle &= \left\langle\psi \left| \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right| \psi \right\rangle = \\ &= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2}{dx^2} (\langle\psi|x\rangle) \langle x'|\psi\rangle dx' + \frac{m\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi|x^2|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx', \end{aligned}$$

para finalmente

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-\beta|x|}) e^{-\beta|x|} dx' + \frac{m\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\beta|x|} x^2 dx'$$

Trabajaremos por partes esta cosa. Una integral con la doble derivada se convierte en

$$\int_{-\infty}^{\infty} u \frac{d^2 u}{dx^2} dx = u \frac{du}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du}{dx}\right)^2 dx$$

donde el primer término es nulo porque la función de onda es bien comportada. Con este enfoque resulta

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2 \beta}{2m} + \frac{m\omega^2}{4\beta^3},$$

Typo seguro.

y entonces

$$\mathcal{E}(\psi) = \beta \left(-\frac{\hbar^2 \beta}{2m} + \frac{m\omega^2}{4\beta^3} \right) \geq E_0$$

y entonces desde

$$\left. \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \beta} \right|_{\beta_{\min}} = 0$$

El único parámetro libre es β ; entonces se calcula el β que hace minimo esta cosa y ya está resuelto.

EJEMPLO 2.2 Ejercicio 11

Tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\lambda - |x|)\psi = 0,$$

con $\psi \rightarrow 0$ si $|x| \rightarrow \infty$. Se tiene

$$\begin{cases} C(\alpha - |x|) & |x| \leq \alpha \\ 0 & |x| > \alpha \end{cases}$$

Para el hamiltoniano en cuestión es

$$[\] |\psi\rangle = \mathcal{E} |\psi\rangle,$$

que conduce a la ecuación

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

la cual reescribimos como

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right] \psi = 0$$

e identificamos a ojo que

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} |x|, \quad \lambda = \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}$$

de manera que habría que minimizar λ haciendo mínimo \mathcal{E} respecto de α .

EJEMPLO 2.3 Ejercicio 7

Estamos en el átomo de hidrógeno. Es decir $|n, \ell, m\rangle$ donde $n \in \mathbb{N}$, $\ell < n$ y $-\ell \leq m \leq \ell$.

Tendremos

$$\begin{array}{ll} n = 1 & |100\rangle \\ n = 2 & |211\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle, |200\rangle \end{array}$$

donde los primeros tres del orden dos son $|2p\rangle = |21m\rangle$ y el último es $|2s\rangle$. La perturbación requerirá una matriz de 5×5 y habrá que diagonalizar $E_2^{(1)}$, que es el bloque inferior (ver ilustración). La perturbación es algo del tipo $V = -eEz$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Tenemos

$$\langle 2\ell m | -eEz | 2\ell' m' \rangle = -eE \langle 2\ell m | z | 2\ell' m' \rangle$$

y como el operador paridad cumple $\Pi z \Pi^{-1} = -z$ se da

$$\Pi |n\ell m\rangle = (-1)^\ell |n\ell m\rangle$$

lo cual no es otra cosa que usar reglas de selección. Luego,

$$\langle 2\ell m | -z | 2\ell' m' \rangle = (-1)^{\ell+\ell'} \langle 2\ell m | z | 2\ell' m' \rangle$$

y si $\ell + \ell' = L$ entonces el braket es nulo y sobreviven $\ell \neq \ell'$ de modo que $\langle 21m | z | 200 \rangle$ es el que permanece.

Por Wigner-Eckart $z = T_0^1$ de modo que

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^k | \alpha j m \rangle = \langle j k m q | j k j' m' \rangle$$

donde es una constante. Entonces

$$\langle 21m | T_0^1 | 200 \rangle = \langle 0100 | 011m \rangle$$

desde lo cual sobreviven $\langle 0100 | 011m \rangle$ si $m = 0$.

Entonces se tiene lo que ilustra la imagen

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

y como es una matriz de Pauli su diagonalización es un juego de niños. Se tienen

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle) \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle)$$

Si se cambia de base y se escribe el potencial V en la base $\{|100\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle, |21-1\rangle\}$ se tiene

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

que es una matriz diagonal por bloques.

1.2.1 Scattering a orden dos y OFPT

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

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

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

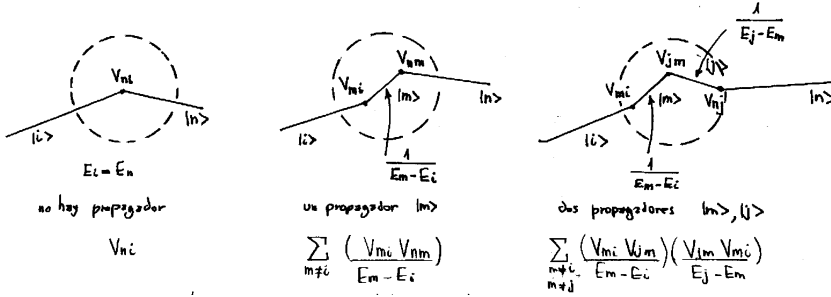


Figura 2.2

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

1.2.2 Perturbación armónica

Sea un potencial armónico y hermítico

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

quiero ver probabilidad de transición a orden uno,

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

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

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

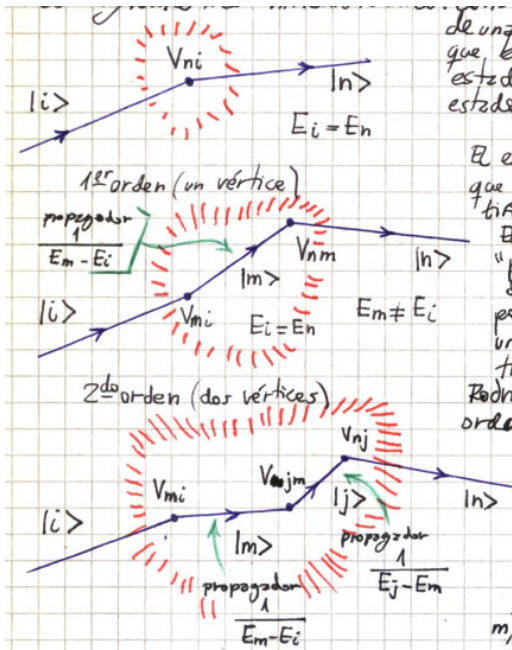
$$C_n(t)^1 = \frac{V_{ni}}{\hbar} \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{(\omega + \omega_{ni})} + \frac{V_{ni}^\dagger}{\hbar} \frac{1 - e^{i(-\omega + \omega_{ni})t}}{(-\omega + \omega_{ni})}$$

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

Luego será nulo sólo si

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

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



de una
que e
estad
estada
Ei e
que
fin
B
"f
d
pa
un
fi
Radi
orde

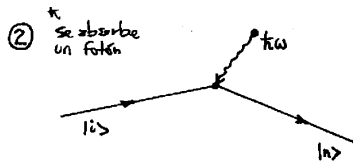


Figura 2.3

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

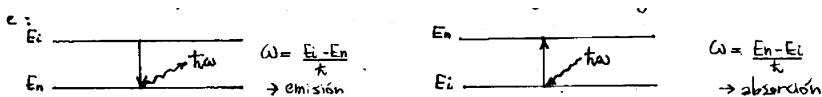
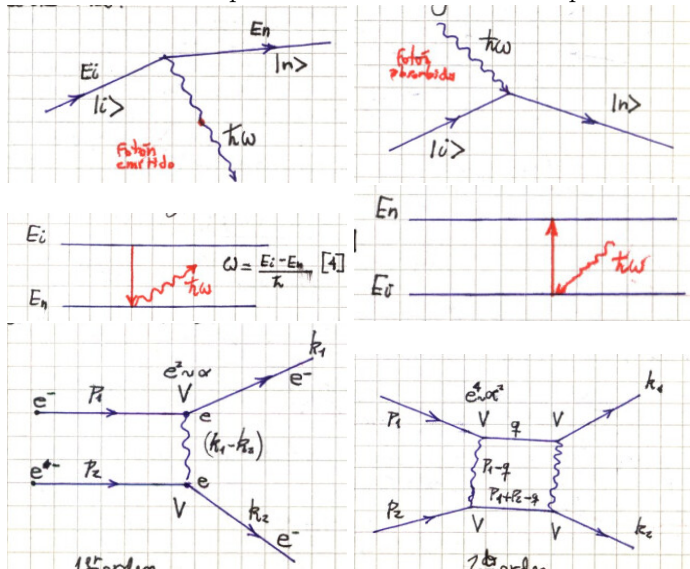


Figura 2.4

Acá la sucesión de pictures como están en la carpeta:



1.3 Desplazamiento de estados iniciales

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

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

donde η es un parámetro regularizador.

Previa a la picture del desdoblamiento de estados iniciales estaban estas

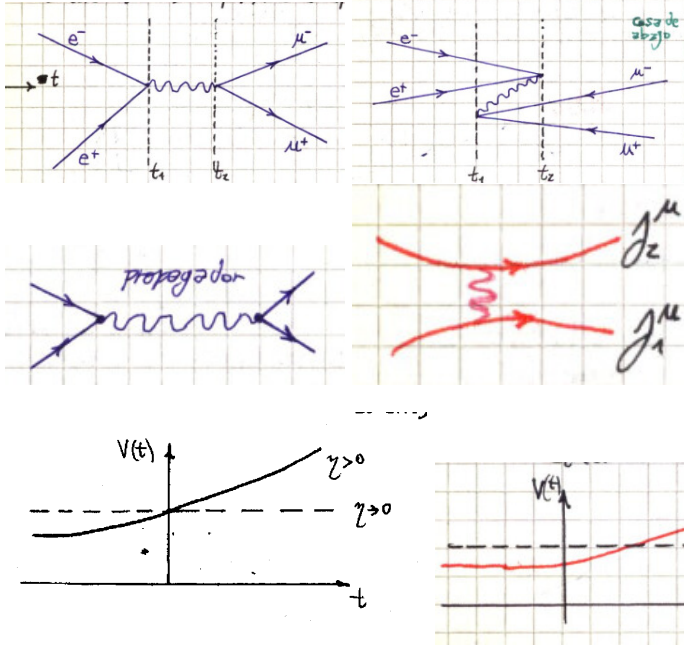


Figura 3.5

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

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

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

y tomando el límite $\eta \rightarrow 0$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{d}{dt} |C_n(t)^1|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega_{ni}^2 \neq 0 \\ \infty & \text{si } \omega_{ni}^2 = 0 \end{cases}$$

y llegamos a la regla de oro de Fermi,

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

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).

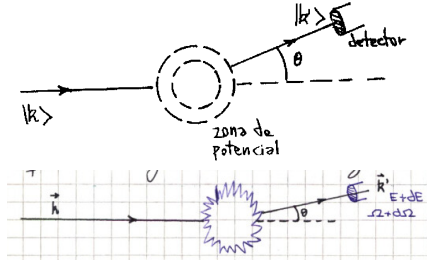


Figura 3.6

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

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.

$$dk_x = \frac{2\pi}{L} dn_x \quad \rightarrow \quad dn_x = \frac{L}{2\pi} dk_x$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2 \quad \rightarrow \quad n^2 = \frac{L^2}{(2\pi)^2} k^2$$

$$dE = \frac{\hbar^2}{m} k dk \quad \rightarrow \quad dn = \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k} dE$$

$$n^2 dn d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} dE d\Omega$$

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

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

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

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

la transformada de Fourier del potencial es, amén de constantes, la am-

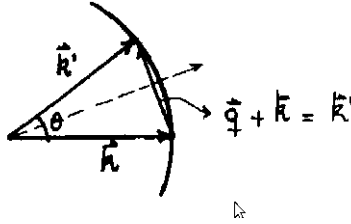


Figura 3.7

plitud a 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

