

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.

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

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

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

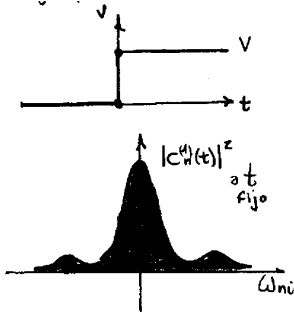
donde debe notarse que hay interferencia entre los diversos términos.

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

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

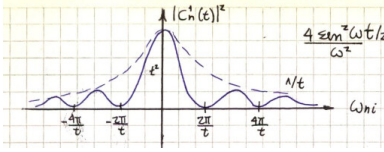
A orden uno es

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

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

Evalutando 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.

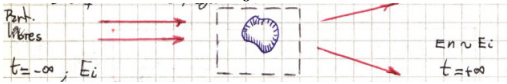
A tiempo largo la probabilidad es no nula para aquellos estados

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

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.

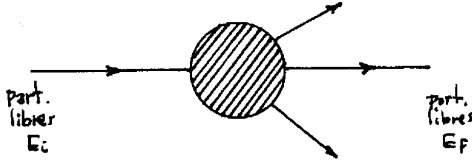


Figura 1.1

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 bracket 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

Para el coeficiente a orden 1 teníamos la regla de oro de Fermi. El coeficiente a orden dos es

$$C_n^{(2)} = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_{m \neq i} V_{nm} V_{mi} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ni}t''}$$

donde la integral más interna se aproxima como

$$\frac{i}{\omega_{mi}} [1 - e^{it'\omega_{mi}}]$$

y eso nos permite considerar el siguiente límite

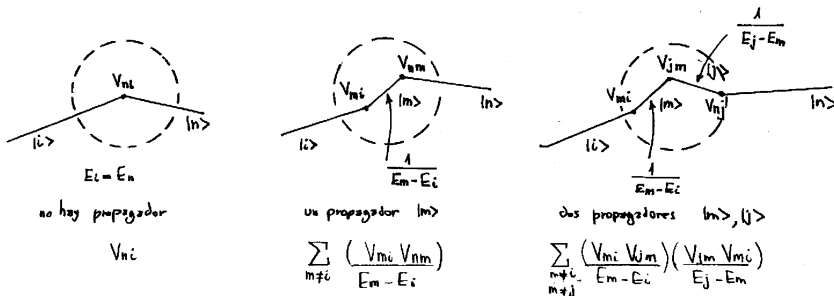
$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n^{(2)} = \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_n - E_i} \int_0^t dt' (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'}),$$

de manera que a orden dos es

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

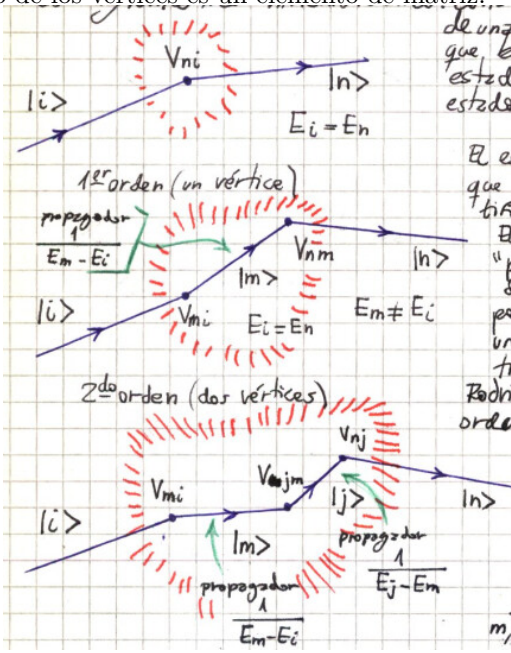
Para obtener los siguientes términos dentro del $||^2$ podemos emplear un ardid gráfico conocido como *Old Fashioned Perturbation Theory*, que no es más que un artificio diagramático mnemotécnico.

Consideramos un caso como el scattering de una zona donde existe un potencial al que bombardeamos con partículas en estados $|i\rangle$ y que salen partículas con estados $|n\rangle$ de la misma energía. Ver figura inicial en Fig siguiente.



Luego, el estado $|m\rangle$ es un pseudoestado virtual que no conserva la energía y es un artificio surgido del cálculo (ver figura intermedia). El

segmento entre los vértices es un *propagador* y de alguna manera podemos hacernos la idea de que transporta la perturbación entre vértices. Cada uno de los vértices es un elemento de matriz...



Podríamos avanzar con este grafismo y especular con lo que sucede a tercer orden. Este término será sumar sobre todos los caminos posibles

$$\sum_{m, j \neq i, m \neq j} V_{nj} \frac{1}{E_j - E_m} V_{jm} \frac{1}{E_m - E_i} V_{mi}.$$

Estos diagramas son los que llevan el nombre de OFPT. Es importante notar que implica que entre los estados intermedios estados virtuales $|m\rangle, |j\rangle$ no se conserva la energía; son propagadores. La energía se conserva solo en el inicial y el final. Si la energía se conservase reventarían los denominadores.

Consideremos ahora una perturbación armónica dada en términos de un potencial escrito de forma hermítica

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

Encendemos este potencial y queremos pasar de estados $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ viendo su probabilidad de transición a orden uno,

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

donde la diferencia con un potencial constante es el primer término del paréntesis [?]. Entonces,

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

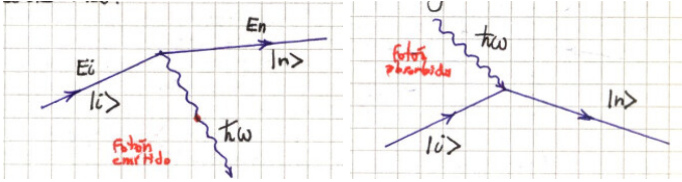
$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ni} \frac{e^{i(\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(\omega + \omega_{ni})} + V_{ni}^\dagger \frac{e^{i(-\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(-\omega + \omega_{ni})} \right]$$

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

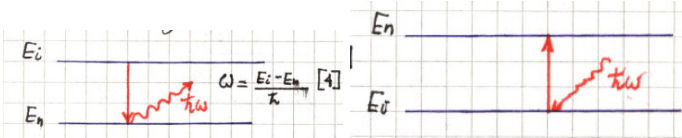
donde se ve que el primer término es similar a $\delta(\omega_{ni} + \omega)$ y el segundo a $\delta(\omega_{ni} - \omega)$ de suerte que

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

Esto representa $E_n = E_i - \hbar\omega$ en el primer término y $E_n = E_i + \hbar\omega$ en el segundo que pueden asociarse a la emisión de un cuanto de energía en la interacción o a la absorción, respectivamente.



Entonces todo el término representa la probabilidad de emitir o absorber fotones. Veamos el ejemplo de emisión o absorción que ocurre en un átomo.



Los V, V^\dagger se puede asociar como que aniquilan o crean fotones. Otro asunto es que al descomponer un campo EM en Fourier tengo las frecuencias ω separadas y debería sumar entre todas las frecuencias, pero se ve que no es necesario y la única que debo considerar es [4] (número dentro de la figura!).

Luego será nulo sólo si

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

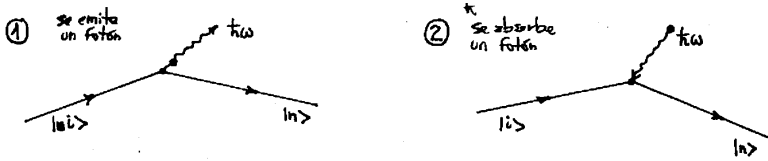


Figura 2.2

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

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

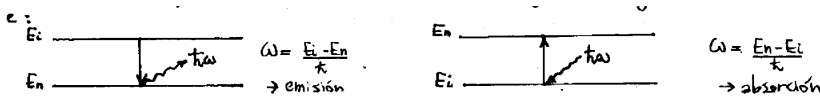
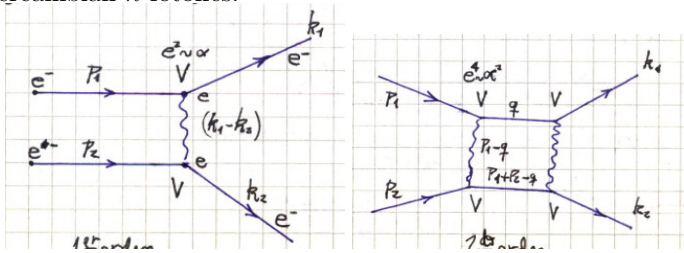


Figura 2.3

En teoría de perturbaciones de dos partículas vemos que a orden n se intercambian n fotones.



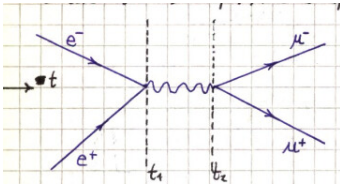
En el gráfico de la izquierda a primer orden los impulsos están determinados mientras que a orden dos, en el gráfico de la derecha, no sabemos el impulso q y deberíamos integrar pero la integral da infinito

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dq.$$

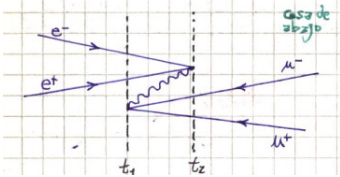
Feynmann desarrolló una “renormalización” que tapa estos infinitos considerando que hay que usar una serie perturbativa para la carga e en los vértices.

Todo este formalismo permite la aparición de partículas y antipartículas. Aquí $\Delta t = t_2 - t_1$ es tan chico que

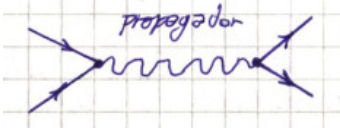
$$\Delta t \Delta E \sim \hbar$$



La joda es que la “cosa de abajo”



es equivalente pero podemos sumarlo para obtener



que es ocurrencia de Feynmann, pero el propagador es un fotón virtual y puede tener masa.

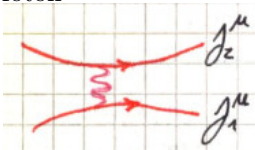
Este formalismo se puede aplicar directamente también al electromagnetismo. Sea una corriente $j^\mu(x, t)$ que genera un potencial A^μ ; se puede calcular con un “propagador”

$$A^\mu(x', t') = \int dx dt G^\mu(x, t; x', t') j^\mu(x, t)$$

donde la función de Green oficia de propagador para llevar la interacción de x', t' a x, t . Luego, $j_{2\mu}(x', t') A^\mu(x, t)$ es proporcional a la fuerza entre corrientes.

$$\int dx dt j_{2\mu}(x, t) G^\mu_\nu(x, t; x', t') j_1^\nu(x, t)$$

Podemos pensar en un diagramita donde a primer orden se intercambia un fotón



1.2.2 Despoblamiento de estados iniciales

Suponemos que pasamos entre estados $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ (número de estados). Queremos ver con qué velocidad v se despoblan los $|i\rangle$. Para ello me construyo un potencial *suave*

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

donde η es un parámetro regularizador, cuyo fin es regularizar divergencias que puedan aparecer en el denominador.

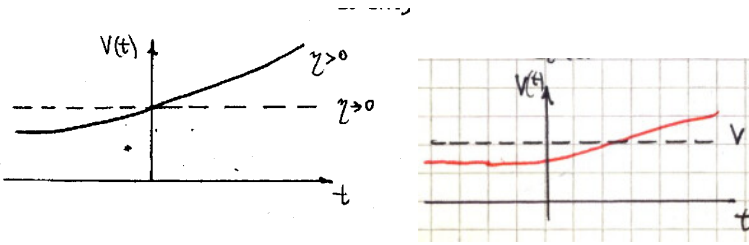


Figura 2.4

Partamos de $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$

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

y consecuentemente

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

La variación temporal será

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

y tomando el límite $\eta \rightarrow 0$

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

y llegamos a la regla de oro de Fermi,

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

Veamos ahora qué sucede cuando $n = i$. Se tienen $C_i^{(0)}(t) = 1$ y [?]

$$C_i^{(0)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t V_{ii} e^{\eta t'} dt' = -\frac{i}{\hbar \eta} V_{ii} e^{\eta t}$$

$$C_i^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_m |V_{mi}|^2 \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{im}t' + \eta t'} \frac{e^{i\omega_{mi}t' + \eta t'}}{i(\omega_{mi} - i\eta)}$$

mientras que si dividimos la sumatoria en m se tiene ahora

$$= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \frac{|V_{ii}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta^2} - \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

Hasta orden dos tenemos

$$C_i(t) = C_i^{(0)}(t) + C_i^{(1)}(t) + C_i^{(2)}(t)$$

y

$$\frac{1}{C_i(t)} \frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{-\frac{i}{\hbar} V_{ii} + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \frac{|V_{ii}|^2 e^{\eta t}}{\eta} - \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{E_i - E_m + i\hbar\eta}}{1 - \frac{i}{\hbar\eta} V_{ii} e^{\eta t} + C_i^{(2)}(t)}$$

pero no necesito poner el $C_i^{(2)}(t)$ puesto que al hacer el cociente me generarán términos cúbicos que tiraré; por ello no lo considero. Haciendo la cuenta a segundo orden en teoría de perturbaciones de $\eta \rightarrow 0$ obtenemos un límite finito. Tendiendo

$$\frac{1}{C_i(t)} \frac{dC_i(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ii} + \sum_{m \neq i} \frac{|V|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \right] = -\frac{i}{\hbar} \Delta_i$$

que implica la ecuación diferencial

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \Delta_i C_i(t)$$

cuya solución es por supuesto $C_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar}$. Ahora se tiene que la evolución temporal lleva

$$|i\rangle \longrightarrow C_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |i\rangle = e^{i(E_i - \Delta_i)t/\hbar} |i\rangle$$

mientras que a primer orden $E_i \rightarrow E_i + V_{ii}$.

Analicemos el término

$$\frac{1}{E_i - E_m + i\hbar\eta}$$

Acá usamos un Taylor para dividir por $1 + e$ y así multiplicar por $1 - e \dots$ Taylor, pelotudo.

teniendo en cuenta que en análisis complejo se suelen separar

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\epsilon} = P_p \left[\frac{1}{x} \right] - i\pi\delta(x)$$

y luego, la

$$\sum_{m \neq i} \frac{|V|^2}{E_i - E_n + i\hbar\eta}$$

se descompondrá en una parte real y en una imaginaria, donde esta última representará la difusión con el tiempo que cobrará importancia si $E_i = E_n$ y entonces

$$C_i^{(2)}(t) = e^{-i/\hbar \Re(\Delta_i)t + 1/\hbar \Im(\Delta_i)t}$$

Se suelen definir el ancho de decaimiento

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} = -\frac{2}{\hbar} \Im(\Delta_i)$$

de modo que

$$|C_i^{(2)}(t)|^2 = e^{-\Gamma_i t/\hbar} = e^{-t/\tau_i}$$

donde $\tau_i = \hbar/\Gamma_i$. La componente compleja da el decaimiento, como en electromagnetismo, y también da información de la variación del número de estados $|i\rangle$

1.2.3 Scattering sección eficaz

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

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$$

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

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

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

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

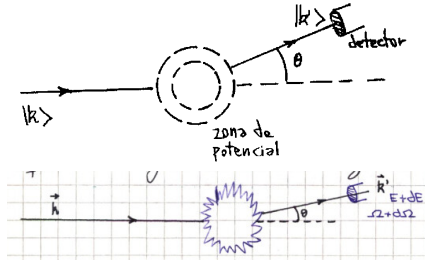


Figura 2.5

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

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

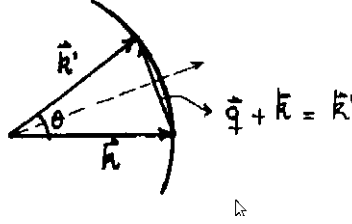


Figura 2.6

la transformada de Fourier del potencial es, amén de constantes, la amplitud 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 $q = q(\theta)$

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

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

