Mecánica Cuántica. Examen 3*†

José Emmanuel Flores Calderón

Fecha: 14/06/2021.

1. **Preguntas conceptuales.** Responde a las siguientes preguntas.

   (a) ¿Qué es la repulsión de niveles y cuáles son las dos cantidades que la determinan en la teoría de pertrubaciones estacionaria de segundo orden?

   De manera general bajo la presencia de un potencial perturbativo V, dados dos niveles, i y j por ejemplo, cuando estan conectados por el elemento de matriz V_{ij}, tienden a repelerse mutuamente. Este resultado es un caso especial del teorema de no cruzamiento de niveles (no-level-crossing theorem), el cual dice que un par de niveles de enrgia que estan conectados por una perturbación no se cruzan siempre que la fuerza de la perturbación este variando.

   (b) ¿Cuáles son los pasos para resolver un problema con degeneraciones usando la teoría de perturbaciones estacionaria.

   Los pasos son los siguientes:

   i. Identificar los eigenkets degenerados sin perturbar y construir la matriz de perturbación V, la cual es de $g \times g$, con g el número de degeneración.
   ii. Diagonalizar la matriz de perturbación.
   iii. Identificar las raices de la ecuación de valores propios con los corrimientos de energía a primer orden; los kets base que diagonalizan a la matriz V son los kets correctos a orden cero que cuando los kets perturbados se acercan en el límite de $\lambda \to 0$.
   iv. Para ordenes superiores, se usan las fórmulas de la correspondiente teoría de perturbacione, excepto en las sumas, donde se ezcluyen todas las constribuciones de los kets no perturbados en el subespacio degenerado D.

   (c) ¿Qué es la representación de Dirac y cuáles son sus diferencias con las representaciones de Schrödinger y Heisenberg?

   La representación de Dirac es una representación de la mecánica cuántica, la cual, se podría decir es intermedia respecto a las de Schrödinger y Heisenberg. Recordemos que en la representación de Schrödinger la evolución de los kets de estado esta determinada por el Hamiltoniano, mientras que los observables no cambian en el tiempo. Por otra parte, en la representación de Heisenberg los kets de estado no cambian y la evolución temporal esta contenida en los operadores y viene determinada por el Hamiltoniano. Finalmente, en la representación de Dirac, o de interacción, la evolución de los kets de estado está determinada por el potencial perturbativo V, escrito en la representación de interacción, mientras que la evolución de los obervables esta determinada por el Hamiltoniano sin perturbar H_0.

   (d) ¿Qué es el operador de transición y cómo determina la aproximación de Born de órdenes superiores?

   De define al operador (o matriz) de transición T mediante

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}T_{in}\int_{t_0}^{t}\exp\left[i\omega_{ni}t'\right]dt'.$$

   Por otra parte, la transición de Born a órdenes superiores se determina haciendo una expansión en serie de potencias de V del operador de transición T, esto es

$$T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V + \dots$$

*Grupo C011 | Trimestre 21-1

†Profesor: Miguel Angel Bastarrachea Magnani | Ayudante: Yoshua Chávez Bolaños

(e) ¿Por qué se necesita el desarrollo en ondas parciales?

El método del desarrollo en ondas parciales es necesario y se usa cuando consideramos dispersión por un potencial esfericamente simétrico y estamos interesados en analizar cómo es que los estados de momento angular bien definidos son afectados por el dispersor.

2. **Elipsoide Impenetrable.** Una partícula se encuentra dentro de un elipsoide impenetrable de rotación cuyo potencial es

$$U(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \frac{x^2+y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1 \\ \infty & \frac{x^2+y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \geq 1 \end{cases} . \tag{0.1}$$

y $|a-b| \ll a$. Encuentra el corrimiento de energía para el estado base con respecto al estado base de la partícula en un pozo esférico del mismo volumen a primer orden en la teoría de perturbaciones.

Solución.

De la teoría de perturbaciones, sabemos que el corrimiento de energía al estado base a primer orden viene dado por

$$\Delta E_0 = \langle \psi_0 | V | \psi_0 \rangle,$$

donde $|\psi_0\rangle$ es la función de onda en el estado base. Por otra parte, para usar teoria de perturbaciones, se supone que el Hamiltoniano completo se puede escribir como

$$H = H_0 + V,$$

donde V es muy pequeño, comparado con H_0. El primer paso para resolver este problema es encontrar la forma de V. Ahora bien, para un pozo esférico, tenemos, en general varias opciones para escribir el potencial, dependiendo de cuál sistema de coordenadas escogamos, si usamos coordenadas esféricas, tenemos que el potencial se puede escribir como

$$V_{pozo} = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r \geq R \end{cases} .$$

Ahora bien, si consideramos el potencial dado en (0.1) y escribimos a los semiejes a, b en términos de un parámetro $\lambda \ll 1$ (los vemos como una perturbación) de la siguiente forma

$$a \simeq R\left(1 - \frac{1}{3}\lambda\right) \quad \& \quad b \simeq R\left(1 + \frac{2}{3}\lambda\right). \tag{0.2}$$

Con la ecuación anterior, estamos «modulando» el efecto de la deformación del elipsoide, vía un parámetro λ. Por otra parte, si hacemos el siguiente cambio de variable

$$x = \frac{a}{R}\alpha, \quad y = \frac{a}{R}\beta, \quad z = \frac{b}{R}\gamma,$$

la ecuación del elipsoise se transforma en

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = R^2.$$

Por otra parte, con el cambio de variable, tambien tenemos que hacer un cambio en el Hamiltoniano, esto es

$$\hat{H}_0 = -\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2,$$

se convierte en

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{R^2}{a^2}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{R^2}{a^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \frac{R^2}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right), \tag{0.3}$$

pero si ahora usamos las aproximaciones dadas en (0.2), tenemos que

$$\hat{H}_0 \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{(1-\lambda/3)^2}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{1}{(1-\lambda/3)^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \frac{1}{(1+2\lambda/3)^2}\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right],$$

si ahora hacemos un desarrollo en series de potencias para los coeficientes de cada una de las derivadas parciales, esto es

$$(1+x)^{-2} \approx 1 - 2x + \ldots,$$

se tiene que

$$\hat{H}_0 \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(1+\frac{2\lambda}{3}\right)\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \left(1+\frac{2\lambda}{3}\right)\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \left(1-\frac{4\lambda}{3}\right)\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right],$$

$$\implies \hat{H}_0 \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\lambda}{3}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{2\lambda}{3}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} - \frac{4\lambda}{3}\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right),$$

$$\implies \hat{H}_0 \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla'\right)^2 - \frac{\hbar^2\lambda}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right),$$

con lo cual ahora podemos hacer

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla'\right)^2 + V,$$

donde el término perturbativo viene dado por

$$V = -\frac{\hbar^2\lambda}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right).$$

Con la ecuación anterior podemos calcular la corrección al estado base, esto es

$$\Delta E_0 = \langle\psi_0|V|\psi_0\rangle = -\frac{\hbar^2\lambda}{3m}\langle\psi_0|\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right)|\psi_0\rangle,$$

donde la forma explicita de $|\psi_0\rangle$ para el estado base viene dada por

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{R}}\frac{\sin\frac{\pi r}{R}}{r}, \quad r^2 = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2.$$

Pero como el potencial es esfericamente simétrico, se cumple que

$$\langle\psi_0|\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}|\psi_0\rangle = \xi,$$

de modo que

$$\Delta E_0 = \langle\psi_0|V|\psi_0\rangle = -\frac{\hbar^2\lambda}{3m}\left[\xi + \xi - 2\xi\right] = 0,$$

$$\implies \Delta E_0 = 0,$$

esto es, el corrimiento de energía a primer orden es cero.

3. **Oscilador cargado con dependencia temporal.**

   (a) Considera un oscilador armónico unidimensional que se encuentra en su estado base. Es sujeto a una fuerza externa $F(t)$ con $F(t) \to 0$ con $t \to \pm\infty$. Obtén las probabilidades de que el oscilador sea excitado a varios estados excitados y el valor esperado de su energía conforme $t \to \infty$. Cuando resuelvas el problema usa la representación de Heisenberg y empieza con las ecuaciones de movimiento de los operadores de creación $\hat{a}^\dagger$ y aniquilación $\hat{a}$.

   (b) Ahora el oscilador linear cargado está bajo el efecto de un campo eléctrico homogéneo ($\hat{V} = -e\hat{x}\mathcal{E}(t)$) que cambia en el tiempo bajo leyes específicas:

$$\text{(i) } \mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right), \ \text{(ii) } \mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0\left(1+\frac{t^2}{\tau^2}\right)^{-1}, \ \text{(iii) } \mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0\cos(\omega_0 t)\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right).$$

   Asumiendo que el oscilador está en el n-ésimo estado cuántico antes de que el campo se encienda ($t \to -\infty$, encuentra las probabilidades de transición a diferentes estados para $t \to \infty$ en el primer orden de la teoría de perturbaciones no estacionaria.

(c) Para $n = 0$ compara el resultado obtenido con el problema exacto del primer inciso.

Solución.

(a) Podemos escribir la fuerza de la siguiente forma

$$F(t) = F_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right),$$

la cual, claramente cumple con las condiciones dadas en el problema. Si ahora suponemos que esta fuerza es derivable de un potencial, tenemos que

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} \implies V = -F_0 x \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right).$$

Ahora bien, la probabilidad de que el oscilador sea excitado a algun otro estado viene dada por

$$P(i \to n) = \left| c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots \right|^2,$$

si consideramos términos solo a primer orden, se tiene que

$$P(i \to n) = \left| c_n^{(1)}(t) \right|^2, \tag{0.4}$$

donde

$$c_n^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \langle n | V_I(t') | i \rangle dt' = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni} t'} V_{ni}(t')\, dt', \tag{0.5}$$

donde $\hbar\omega_{ni} = E_n - E_i$,y $V_{ni} = \langle n|V|i\rangle$. En nuestro caso tenemos que al tiempo inicial el oscilador está en el estado base, esto es $i = 0$, de manera que las ecuaciones se expresan como

$$P(0 \to n) = \left| c_n^{(1)}(t) \right|^2,$$

con

$$c_n^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int e^{i\omega_{n0} t'} V_{n0}(t')\, dt'.$$

Ahora calculemos V_{n0}, esto es

$$V_{n0} = \langle n|V|0\rangle = \langle n| - F_0 x \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)|0\rangle = -F_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\langle n|x|0\rangle,$$

pero podemos escribir a x en términos de los operadores de creación y de aniquilación como

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^\dagger\right),$$

con lo cual, se tiene que

$$V_{n0} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\langle n|\left(a + a^\dagger\right)|0\rangle,$$

si hacemos $\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F_0$, tenemos

$$V_{n0} = -\alpha \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\left(\langle n|a|0\rangle + \langle n|a^\dagger|0\rangle\right) = -\alpha \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\langle n|a^\dagger|0\rangle,$$

$$\implies V_{n0} = -\alpha \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\langle n|a^\dagger|0\rangle,$$

ya que estamos en el estado base y se cumple que $a|0\rangle = 0$. Por otra parte, se tiene que $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$, con lo cual la expresión para V_{n0} queda escrita como

$$V_{n0} = -\alpha \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\langle n|1\rangle = -\alpha \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\delta_{n0},$$

$$\Longrightarrow V_{n0} = -\alpha \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)\delta_{n0},$$

y ademas

$$\omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar} = n\omega_0$$

con lo cual tenemos que

$$c_n^{(1)} = \alpha\frac{i}{\hbar}\delta_{n0}\int \exp\left(in\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{(t')^2}{\tau^2}\right)dt' = \alpha\frac{i}{\hbar}\delta_{n0}\int\left[\cos\left(n\omega_0 t'\right) + i\sin\left(n\omega_0 t'\right)\right]\exp\left(-\frac{(t')^2}{\tau^2}\right)dt',$$

$$\Longrightarrow c_n^{(1)} = \alpha\frac{i}{\hbar}\delta_{n0}\int\left[\cos\left(n\omega_0 t'\right) + i\sin\left(n\omega_0 t'\right)\right]\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)dt',$$

$$\Longrightarrow c_n^{(1)} = \alpha\frac{i}{\hbar}\delta_{n0}\left[\int dt'\cos\left(n\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{(t')^2}{\tau^2}\right) + i\int dt'\sin\left(n\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{(t')^2}{\tau^2}\right)\right]. \tag{0.6}$$

Ahora nuestro problema se reduce a calcular las integrales

$$\int dt'\cos\left(n\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{(t')^2}{\tau^2}\right) \quad \& \quad \int dt'\sin\left(n\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{(t')^2}{\tau^2}\right), \tag{0.7}$$

es claro que podemos escribir al seno y al coseno como una serie de Taylor de la forma

$$\sin u = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r+1)!}u^{2r+1} \quad \& \quad \cos u = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r)!}u^{2r},$$

e identificando a $u = n\omega_0 t'$, tenemos que

$$\sin u = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r+1)!}\left(n\omega_0\right)^{2r+1}\left(t'\right)^{2r+1} \quad \& \quad \cos u = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r)!}\left(n\omega_0\right)^{2r}\left(t'\right)^{2r},$$

de manera que las ecuaciones dadas en (0.7) toman la forma

$$\int dt'\sin\left(n\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r+1)!}\left(n\omega_0\right)^{2r+1}\int dt'\left(t'\right)^{2r+1}\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right),$$

junto con

$$\int dt'\cos\left(n\omega_0 t'\right)\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r)!}\left(n\omega_0\right)^{2r}\int dt'\left(t'\right)^{2r}\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right),$$

pero para las integrales gaussianas, se cumple que

$$\int dt'\left(t'\right)^{2r+1}\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) = \frac{r!}{2}\tau^{2r+1},$$

$$\int dt'\left(t'\right)^{2r}\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) = \frac{(2r)!}{r!2^{2r}}\sqrt{\pi\tau^{2r+1}},$$

de manera que para $c_n^{(1)}$, se tiene que

$$c_n^{(1)} = \alpha\frac{i}{\hbar}\delta_{n0}\left[\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r)!}\left(n\omega_0\right)^{2r}\frac{(2r)!}{r!2^{2r}}\sqrt{\pi\tau^{2r+1}} + i\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2r+1)!}\left(n\omega_0\right)^{2r+1}\frac{r!}{2}\tau^{2r+1}\right],$$

$$\implies c_n^{(1)} = \alpha \frac{i}{\hbar} \delta_{n0} \sum_{r=0}^{\infty} \left\{ (-1)^r (n\omega_0)^{2r} \left[\frac{1}{(2r)!} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + \frac{in\omega_0}{(2r+1)!} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1} \right] \right\},$$

de manera que la probabilidad queda escrita como

$$P(0 \to n) = \left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 \left| \delta_{n0} \sum_{r=0}^{\infty} \left\{ (-1)^r (n\omega_0)^{2r} \left[\frac{1}{(2r)!} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + \frac{in\omega_0}{(2r+1)!} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1} \right] \right\} \right|^2 \tag{0.8}$$

(b) Para esta parte del problema tenemos los siguientes potenciales

$$V(x,t) = -e\mathcal{E}_0 x \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right), \tag{0.9}$$

$$V(x,t) = -e\mathcal{E}_0 x \left(1 + \frac{t^2}{\tau^2}\right)^{-1}, \tag{0.10}$$

$$V(x,t) = -e\mathcal{E}_0 x \cos(\omega_0 t) \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right). \tag{0.11}$$

Basicamente tenemos que seguir el mismo procedimiento que en el iniciso anterior, pero ahora con los potenciales dados anteriormente. Para el $V(x,t)$ dado en (0.9), tenemos que la ecuación dada en (0.5) queda escrita como

$$c_m^{(1)} = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \int e^{i\omega_{mn} t'} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \langle m|x|n\rangle dt',$$

$$c_m^{(1)} = e\mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{i}{\hbar} \int e^{i\omega_{mn} t'} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \langle m| \left(a + a^\dagger\right) |n\rangle dt',$$

si hacemos $\beta = e\mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{i}{\hbar}$, tenemos que

$$\implies c_m^{(1)} = \beta \int dt' e^{i\omega_{mn} t'} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \left(\langle m|a|n\rangle + \langle m|a^\dagger|n\rangle\right)$$

donde ya hemos considerado que comenzamos en el estado n. Por otra parte, tenemos que

$$\langle n|a|m\rangle + \langle m|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1},$$

tenemos que

$$c_m^{(1)} = \beta \int dt e^{i\omega_{mn} t} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right).$$

Si ahora usamos el mismo truco de escribir a la exponencial compleja como un seno más un coseno, los desarrollamos en serie y usamos propiedades de las integrales gaussianas, tenemos que

$$\int dt e^{i\omega_{mn} t} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{(2r)!} (\omega_{mn})^{2r} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + i \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{(2r+1)!} (\omega_{mn})^{2r+1} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1},$$

$$\implies \int dt e^{i\omega_{mn} t} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r (\omega_{mn})^{2r} \left[\frac{1}{(2r)!} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + \frac{i\omega_{mn}}{(2r+1)!} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1} \right]$$

con lo cual se tiene que

$$c_m^{(1)} = \beta \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r (\omega_{mn})^{2r} \left[\frac{1}{(2r)!} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + \frac{i\omega_{mn}}{(2r+1)!} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1} \right],$$

de manera que la probabilidad de transición queda escrita como

$$P = \beta_0 \left| \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r (\omega_{mn})^{2r} \left[\frac{1}{(2r)!} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + \frac{i\omega_{mn}}{(2r+1)!} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1} \right] \right|^2, \tag{0.12}$$

donde

$$\beta_0 = |\beta|^2 \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right)$$

Ahora bien, para el potencial dado en (0.10), tenemos que

$$c_m^{(1)} = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \int e^{i\omega_{mn}t} \left(1 + \frac{t^2}{\tau^2} \right)^{-1} \langle m|x|n\rangle dt,$$

$$\implies c_m^{(1)} = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \tau^2 \langle m|x|n\rangle \int \frac{e^{i\omega_{mn}t}}{\tau^2 + t^2} dt.$$

Ahora bien, nuevamente, para el término $\langle m|x|n\rangle$, se usa que

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle n|a|m\rangle + \langle m|a^\dagger|n\rangle \right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right),$$

con lo cual se tiene que

$$c_m^{(1)} = \gamma \int \frac{e^{i\omega_{mn}t}}{\tau^2 + t^2} dt,$$

donde

$$\gamma = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \tau^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right). \tag{0.13}$$

La integral puede ser evaluada usando variable compleja, sobre un contorno semicircular que incluya los polos del integrando, y en virtud del teorema del residuo, se tiene que

$$\int \frac{e^{i\omega_{mn}t}}{\tau^2 + t^2} dt = \frac{\pi}{\tau} \exp\left(-\omega_{mn}t \right),$$

de manera que $c_m^{(1)}$ queda escrito como

$$c_m^{(1)} = \gamma \frac{\pi}{\tau} \exp\left(-\omega_{mn}t \right),$$

con γ dado por la ecuación (0.13), y para la probabilidad de transición, se tiene que

$$P = \left(\frac{\pi}{\tau} \right)^2 |\gamma|^2 \exp\left(-2\omega_{mn}t \right). \tag{0.14}$$

Finalmente, si consideramos el potencial dado por (0.11), tenemos que en este caso $c_m^{(1)}$ toma la forma

$$c_m^{(1)} = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \int \cos\left(\omega_0 t \right) e^{i\omega_{mn}t} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2} \right) \langle m|x|n\rangle dt,$$

y nuevamente, para el término $\langle m|x|n\rangle$, tenemos que

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right).$$

Y para la integral, simplemente hagamos

$$\zeta = \int \cos\left(\omega_0 t \right) e^{i\omega_{mn}t} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2} \right) dt,$$

de manera que se tiene

$$c_m^{(1)} = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right) \zeta$$

de manera que la probabilidad viene dada por

$$P = \left| e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right) \zeta \right|^2. \tag{0.15}$$

(c) Si ahora en las expresiones para la probabilidad de transición entre niveles, dadas por (0.12), (0.14) y (0.15), hacemos que $n = 0$, las ecuaciones se transforman de la siguiente forma:

i. Para el inciso a)

$$P = \beta_0 \left| \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r (\omega_{n0})^{2r} \left[\frac{1}{(2r)!} \frac{(2r)!}{r! 2^{2r}} \sqrt{\pi \tau^{2r+1}} + \frac{i\omega_{n0}}{(2r+1)!} \frac{r!}{2} \tau^{2r+1} \right] \right|^2, \tag{0.16}$$

con

$$\beta_0 = \left| e\mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2n\omega}} \frac{i}{\hbar} \right|^2 (\delta_{n,1})^2 .$$

ii. Para el inciso b)

$$P = \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^2 |\gamma|^2 \exp(-2\omega_{n0} t), \tag{0.17}$$

con

$$\gamma = e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \tau^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2n\omega}} (\delta_{n,1}) .$$

iii. Para el inciso c)

$$P = \left| e\mathcal{E}_0 \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2n\omega}} (\delta_{n,1}) \zeta \right|^2, \tag{0.18}$$

con

$$\zeta = \int \cos(\omega_0 t) e^{i\omega_{n0} t} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) dt.$$

4. **Dos puntos dispersores.** Usando la aproximación de Born, encuentra las amplitudes de dispersión de dos centros de potencial idénticos que están separados por una distancia a entre sí, por ejemplo, de la forma $V(\mathbf{r}) = V_0(r) + V(|\mathbf{r} - \mathbf{a}|)$. Expresa tu respuesta en términos de la amplitud de dispersión $f_0^{(1)}(q)$ para la dispersión sólo de $V_0(r)$. Encuentre una relación entre las secciones eficaces totales de uno a dos centros para los siguientes casos límite

   (a) $ka \ll 1$ (aquí la cantidad kR, siendo R el alcance del potencial $V_0(r)$, podría ser arbitraria).

   (b) $kR \sim 1$ y $a \gg R$ (i. e., la distancia entre los centros es mucho más grande que el alcance $V_0(r)$).

   Generalice el resultado para el caso de un sistema con un número arbitrario de N centro idénticos localizados en los puntos $\mathbf{a}_n$ con $n = 1, 2, ..., N$.

   Solución.

   La amplitud de dispersión, en la aproximación de Born esta dada por

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x \exp\left[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\right] \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k}' \rangle,$$

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}) \left[V_0(r) + V(|\mathbf{r} - \mathbf{a}|)\right],$$

   la cual se puede escribir como

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f_0^{(1)}(q) - \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}) \left[V(|\mathbf{r} - \mathbf{a}|)\right], \tag{0.19}$$

   donde

$$f_0^{(1)}(q) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}) V_0(r) .$$

Ahora bien, para el caso de N puntos de dispersión, tenemos que la amplitud de dispersión, en la aproximación de Born, viene dada por

$$f^{(1)}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'\right]\sum_{i=1}^{N}V_0\left(\left|\mathbf{r}'-\mathbf{a}_i\right|\right),$$

donde $\mathbf{q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$. Si ahora definimos $\overrightarrow{\rho}=\mathbf{r}'-\mathbf{r}_i$, tenemos que

$$\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'\right]=\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\overrightarrow{\rho}\right]\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i\right]$$

de manera que

$$f^{(1)}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\sum_{i=1}^{N}\int d^3r'\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'\right]V_0\left(\left|\mathbf{r}'-\mathbf{a}_i\right|\right),$$

$$\Longrightarrow f^{(1)}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\sum_{i=1}^{N}\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i\right]\int d^3r'\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\overrightarrow{\rho}\right]V_0\left(\left|\mathbf{r}'-\mathbf{a}_i\right|\right),$$

con lo cual se tiene

$$f^{(1)}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\sum_{i=1}^{N}\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i\right]\int d^3r'\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\overrightarrow{\rho}\right]V_0\left(\left|\mathbf{r}'-\mathbf{a}_i\right|\right),$$

o bien

$$f^{(1)}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)=-\frac{m\sqrt{2\pi}}{\hbar^2}\widetilde{V}_0\left(q\right)\sum_{i=1}^{N}\exp\left[i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i\right],\tag{0.20}$$

donde $\widetilde{V}_0$ es la transformadad de Fourier del potencial dado V_0.