

MECÁNICA CUÁNTICA II

TEORÍA DE PERTURBACIONES DEPENDIENTES DEL TIEMPO

AUTOR: LVA

Notas de clase del Profesor: Luis Quiroga Puello

Estas son las notas de clase tomadas en el semestre 20151 en la clase Mecánica Cuántica II dictada por el profesor Luis Quiroga en La Universidad de los Andes. Estas notas son escritas por un alumno y pueden contener errores, uselas con precaución.

$$i\hbar \frac{d b_m^{(r)}(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{m,k}t} V_{m,k}(t) b_k^{(r-1)}(t)$$

Transición a orden λ^1 :

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{m,k}t'} V_{m,k}(t') \right|^2$$

$$V_{m,k}(t) = \langle \phi_m | \hat{V}(t) | \phi_k \rangle$$

$$\omega_{m,k} = (E_m - E_k)/\hbar$$

$$\frac{1}{\omega_{m,n}} \leq t \leq \frac{\hbar}{|\langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle|}$$

Regla de Oro de Fermi:

$$W_n(\alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta, E = E_n + \hbar\omega | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2 \rho(\beta, E = E_n + \hbar\omega)$$

$$\rho(\beta, E = E_n + \hbar\omega)$$

$$|\langle \beta, E = E_n + \hbar\omega | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2$$

Contents

1	Introducción	3
2	Transiciones Discretas	4
2.1	Aproximación por Teoría de Perturbaciones:	5
2.2	Transiciones Discretas a Primer Orden (λ^1)	6
2.3	Límites de Validez para el Tiempo a Primer Orden (λ^1)	7
3	Ejemplos	8
3.1	Perturbación Periodica Tipo $\sin(\omega t)$	8
3.2	Perturbación Periodica Tipo $\cos(\omega t)$	8
3.3	Perturbación Tipo Heaviside (Función Escalón) $H(t)$	8
3.4	Aplicación: Interacción Radiación - Materia	9
3.5	Estados metaestables:	11
3.6	Más allá de la aproximación dipolar eléctrica:	11
4	Regla de Oro de Fermi	13

Chapter 1

Introducción

Se estudiará el método de teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Los hamiltonianos que se estudian son de la forma (1.1), donde $\hat{V}(t)$ es la perturbación. \hat{H}_0 es un hamiltoniano que se conoce, con sus estados propios $|\phi_n\rangle$ y energías propias E_n (como se muestra en la ecuación (1.2)).

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \quad (1.1)$$

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (1.2)$$

Para que este método sea efectivo la perturbación debe tener un efecto pequeño comparado con \hat{H}_0 , lo que se representará como (1.3).

$$|\hat{V}(t)| \ll |\hat{H}_0| \quad (1.3)$$

La dinámica del sistema es determinada por la ecuación de Schrödinger (1.4).

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.4)$$

Lo que se desea conocer es la probabilidad de una transición de un estado a otro. Para ello se comienza por considerar algunas limitaciones al problema.

Chapter 2

Transiciones Discretas

El primer modelo que se analiza es uno en el cual el hamiltoniano conocido (\hat{H}_0) tiene un espectro discreto de energías. Además se asume que $V(t < 0) = 0$ y que el estado en el tiempo cero es un estado propio de \hat{H}_0 .

SUPOSICIONES DEL MODELO:

- $V(t < 0) = 0$: Potencial que se prende para $t > 0$.
- $|\psi(0)\rangle = |\phi_n\rangle$: El estado inicial es un estado propio de \hat{H}_0 .
- E_n : Las energías propias de \hat{H}_0 son discretas.
- $|\hat{V}(t)| \ll |\hat{H}_0|$: La perturbación tiene un efecto pequeño comparado con \hat{H}_0 .

Problema: Conocer la probabilidad de transición de un estado inicial $|\phi_n\rangle$ a un estado $|\phi_m\rangle$ luego de un tiempo t donde ambos son estado propios de \hat{H}_0 .

Solución Exacta: En el caso en el que se conoce la solución exacta la probabilidad de transición $P_{n \rightarrow m}$ está dada por (2.1).

$$P_{n \rightarrow m} = |\langle \phi_m | \psi(t) \rangle|^2 \quad (2.1)$$

Solución Aproximada: Sin embargo conocer la solución exacta $|\psi(t)\rangle$ es generalmente inalcanzable. Por lo tanto, se procede a mirar una solución aproximada. Antes de hacer la aproximación se manipula la ecuación de Schrödinger para obtener una expresión en términos de los coeficientes de la expansión de la solución exacta en la base de los estados propios de \hat{H}_0 . Primero se comienza por expresar $|\psi(t)\rangle$ como combinación lineal de la base $\{|\phi_k\rangle\}$ (2.2).

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle \quad (2.2)$$

Esta solución se introduce en la ecuación de Schrödinger (1.4).

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle \right) = \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \right) \sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle \quad (2.3)$$

La ecuación (2.3) se proyecta sobre $\langle \phi_m |$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_k c_k(t) \langle \phi_m | \phi_k \rangle \right) = \langle \phi_m | \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) | \sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle \quad (2.4)$$

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_k c_k(t) \left(E_k \delta_{k,m} + \lambda \langle \phi_m | \hat{V}(t) | \phi_k \rangle \right) \quad (2.5)$$

Se identifica $V_{m,k}(t) = \langle \phi_m | \hat{V}(t) | \phi_k \rangle$

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = E_k c_m(t) + \lambda \sum_k c_k(t) V_{m,k} \quad (2.6)$$

Se observa que para el caso $V_{m,k} = 0$ se obtiene el caso conocido:

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = E_k c_m(t) \quad (2.7)$$

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-iE_m t/\hbar} \quad (2.8)$$

2.1 Aproximación por Teoría de Perturbaciones:

Hasta ahora no se ha hecho ninguna aproximación. La aproximación se hace asumiendo que los coeficientes $c_m(t)$ se pueden escribir de la forma (2.9).

$$c_m(t) = b_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} \quad (2.9)$$

Introduciendo (2.9) en (2.6) se obtiene:

$$i\hbar \frac{db_m(t)}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} + E_m b_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} = E_k b_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} + \lambda \sum_k b_k(t) e^{-iE_m t/\hbar} V_{m,k} \quad (2.10)$$

$$i\hbar \frac{db_m(t)}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} = \lambda \sum_k b_k(t) e^{-iE_m t/\hbar} V_{m,k} \quad (2.11)$$

Se define $\omega_{m,k} = (E_m - E_k)/\hbar$ por lo que se obtiene:

$$i\hbar \frac{db_m(t)}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} = \lambda \sum_k b_k(t) e^{-i\omega_{m,k} t} V_{m,k} \quad (2.12)$$

Ahora se hace una expansión en serie de potencias de $b_m(t)$ para luego truncarla al orden deseado.

$$b_m(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j b_m^{(j)}(t) = b_m^{(0)} + \lambda b_m^{(1)} + \lambda^2 b_m^{(2)} + \dots \quad (2.13)$$

$$b_m^{(j)}(t) \longrightarrow j : \text{orden en el que aparece } \lambda \quad (2.14)$$

Para algunos órdenes se tiene:

Orden λ^0

$$\frac{d b_m^{(0)}(t)}{dt} = 0 \quad (2.15)$$

$$b_m^{(0)}(t) = b_m^{(0)}(0) \quad (2.16)$$

Orden λ^1

$$i\hbar \frac{d b_m^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{m,k} t} V_{m,k}(t) b_k^{(0)}(t) \quad (2.17)$$

Orden λ^r

$$i\hbar \frac{d b_m^{(r)}(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{m,k} t} V_{m,k}(t) b_k^{(r-1)}(t) \quad (2.18)$$

Ahora debido a la condición inicial que se hizo en las suposiciones se obtiene la condición (2.19).

$$b_m(0) = \delta_{m,n} \quad (2.19)$$

Esta condición tiene las siguientes implicaciones:

$$b_m^{(0)}(0) = \delta_{m,n} \quad (2.20)$$

$$b_m^{(r \neq 0)}(0) = 0 \quad (2.21)$$

Y además por la ecuación (2.16):

$$b_m^{(0)}(t) = \delta_{n,m} \quad (2.22)$$

2.2 Transiciones Discretas a Primer Orden (λ^1)

:

Con el formalismo desarrollado anteriormente se puede calcular el coeficiente $b_m^{(1)}(t)$ y con él calcular la probabilidad de transición a primer orden. De la ecuación (2.17) junto con la condición (2.22) se sigue que:

$$i\hbar \frac{d b_m^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{m,k}t} V_{m,k}(t) \delta_{k,n} \quad (2.23)$$

$$i\hbar \frac{d b_m^{(1)}(t)}{dt} = e^{i\omega_{m,n}t} V_{m,n}(t) \quad (2.24)$$

$$b_m^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{m,k}t'} V_{m,k}(t') \quad (2.25)$$

Ahora suponiendo que $m \neq n$ (ya que de lo contrario habría que agregar otro término), se obtiene la probabilidad de transición dada por (2.26).

$$P_{n \rightarrow m}(t) = |b_m^{(1)}(t)|^2 \quad (2.26)$$

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{m,k}t'} V_{m,k}(t') \right|^2 \quad (2.27)$$

Se recuerda la forma del término $V_{m,n}(t)$ dado por (2.28) y de $\omega_{m,n}$ dado por (2.29). El término $V_{m,n}(t)$ tiene especial importancia ya que este tiene la información de lo que se conoce como reglas de selección.

$$V_{m,k}(t) = \langle \phi_m | \hat{V}(t) | \phi_k \rangle \quad (2.28)$$

$$\omega_{m,k} = (E_m - E_k)/\hbar \quad (2.29)$$

REGLAS DE SELECCIÓN: Estas reglas hablan de cuáles transiciones son prohibidas a algun orden. Por ejemplo si el término $V_{m,n}(t) = 0$, se dice que la transición del estado n al m es prohibido en primer orden de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.

2.3 Límites de Validez para el Tiempo a Primer Orden (λ^1)

Se tiene la siguiente relación para dar un rango de validez (que no garantiza que funcione en el rango, solo que por fuera de él definitivamente no funciona).

$$\frac{1}{\omega_{m,n}} \leq t \leq \frac{\hbar}{|\langle \phi_m | \widehat{V} | \phi_n \rangle|} \quad (2.30)$$

Chapter 3

Ejemplos

3.1 Perturbación Periodica Tipo $\sin(\omega t)$

El potencial que se considera es de la forma dada en la ecuación (3.1).

$$\hat{V}(t) = \hat{V} \sin(\omega t) \quad (3.1)$$

$$V_{m,n} = \langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i} \quad (3.2)$$

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{|\langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{m,n} + \omega)t}}{\omega_{m,n} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{m,n} - \omega)t}}{\omega_{m,n} - \omega} \right|^2 \quad (3.3)$$

$$\frac{1 - e^{i(\omega_{m,n} + \omega)t}}{\omega_{m,n} + \omega} \longrightarrow \text{Término de Anti-Resonancia} \quad (3.4)$$

$$\frac{1 - e^{i(\omega_{m,n} - \omega)t}}{\omega_{m,n} - \omega} \longrightarrow \text{Término de Resonancia} \quad (3.5)$$

El término dado por (3.4) es el de anti-resonancia, si $\omega_{m,n} > 0$ hay emisión. El término dado por (3.5) es el de anti-resonancia, si $\omega_{m,n} > 0$ hay absorción.

3.2 Perturbación Periodica Tipo $\cos(\omega t)$

El potencial es dado ahora por (3.6):

$$\hat{V}(t) = \hat{V} \cos(\omega t) \quad (3.6)$$

La probabilidad de transición aquí es casi identica a la del caso anterior, solo cambia un signo.

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{|\langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{m,n} + \omega)t}}{\omega_{m,n} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{m,n} - \omega)t}}{\omega_{m,n} - \omega} \right|^2 \quad (3.7)$$

3.3 Perturbación Tipo Heaviside (Función Escalón) $H(t)$

El potencial en este caso es:

$$\hat{V}(t) = \hat{V} H(t) \quad (3.8)$$

Se define la función $F(t, \omega_{m,n})$.

$$F(t, \omega_{m,n}) = \left(\frac{\sin(\omega_{m,n}t/2)}{\omega_{m,n}t/2} \right)^2 \quad (3.9)$$

Se obtiene para la probabilidad de transición:

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{|\langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2}{4\hbar^2} F(t, \omega_{m,n}) \quad (3.10)$$

3.4 Aplicación: Interacción Radiación - Materia

Teoría semi-clásica: Se tratará la luz como una onda clásica con un vector de onda \vec{k} . Para este ejemplo se trabajará con un campo electromagnético dado por las ecuaciones (3.11) y (3.12)

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \mathcal{E} \cos(ky - \omega t) \hat{k} \quad (3.11)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \mathcal{B} \cos(ky - \omega t) \hat{i} \quad (3.12)$$

Un potencial vectorial y escalar que sirven para describir estos campos están dados por (3.13) y (3.14):

$$V(\vec{r}, t) = 0 \quad (3.13)$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \left(A_0 e^{i(ky - \omega t)} + A_0^* e^{-i(ky - \omega t)} \right) \hat{k} \quad (3.14)$$

El hamiltoniano que se considera es dado por (3.15). El hamiltoniano conocido es \hat{H}_0 dado por (3.16) y la perturbación por $\hat{W}(t)$ dada por (3.17).

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\vec{P}} - q\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) \right)^2 + \hat{V}(\hat{\vec{r}}) - \frac{q}{m_e} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}(\hat{\vec{r}}, t) \quad (3.15)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m_e} \hat{\vec{P}}^2 + \hat{V}(\hat{\vec{r}}) \quad (3.16)$$

$$\hat{W}(t) = -\frac{q}{m_e} \hat{\vec{P}} \cdot \vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) - \frac{q}{m_e} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}(\hat{\vec{r}}, t) + \frac{q^2}{2m_e} \left[\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) \right]^2 \quad (3.17)$$

Nota: \vec{A} y \vec{B} se convierten en operadores ya que son evaluados en la posición del electrón que es un operador.

Ahora se va a estimar el orden de magnitud de cada sumando de la perturbación.

$$\hat{W}_I(t) = -\frac{q}{m_e} \hat{\vec{P}} \cdot \vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) \quad (3.18)$$

$$\hat{W}_{II}(t) = -\frac{q}{m_e} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}(\hat{\vec{r}}, t) \quad (3.19)$$

$$\hat{W}_{III}(t) = \frac{q^2}{2m_e} \left[\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t) \right]^2 \quad (3.20)$$

El término $\hat{W}_{III}(t)$ va proporcional a la intensidad por lo que se puede despreciar a bajas intensidades. Comparando los términos $\hat{W}_I(t)$ y $\hat{W}_{II}(t)$ se observa que $|\hat{W}_{II}(t)| \ll |\hat{W}_I(t)|$.

$$\frac{|\hat{W}_{II}|}{|\hat{W}_I|} \sim \frac{q\hbar k A_0/m_e}{qp A_0/m_e} = \frac{\hbar k}{p} \simeq \frac{a_0}{\lambda} \sim \frac{0.5}{5000} \ll 1 \quad (3.21)$$

En la ecuación anterior (3.21) se usó a_0 , el radio de bohr y λ una longitud del orden de luz visible. Por estas consideraciones es razonable ignorar \hat{W}_{II} y mirar primero como se comporta \hat{H}_0 con una perturbación solo de \hat{W}_I .

$$\widehat{W}_I(t) = \frac{q}{m_e} \widehat{P}_z \left[A_0 e^{i(k\hat{y}-wt)} + A_0^* e^{-i(k\hat{y}-wt)} \right] \quad (3.22)$$

Se hace una expansión de $e^{\pm ik\hat{y}}$:

$$e^{\pm ik\hat{y}} = 1 \pm ik\hat{y} - \frac{1}{2}k^2\hat{y}^2 + \dots \quad (3.23)$$

$$|k\hat{y}| \simeq \frac{a_0}{\lambda} \ll 1 \quad (3.24)$$

$$e^{\pm ik\hat{y}} \approx 1 \quad (3.25)$$

Se observa que la perturbación toma la forma dada por (3.26). Esta aproximación es conocida como **APROXIMACIÓN DIPOLAR ELÉCTRICA (DE)**.

$$\widehat{W}_I^{(DE)}(t) = \frac{q\mathcal{E}}{m_e w} \widehat{P}_z \sin \omega t \quad (3.26)$$

Ahora se procede a calcular los elementos matriciales $\langle \phi_m | \widehat{W}_I^{(DE)}(t) | \phi_n \rangle$:

$$\langle \phi_m | \widehat{W}_I^{(DE)}(t) | \phi_n \rangle = \frac{q\mathcal{E}}{m_e w} \sin \omega t \langle \phi_m | \widehat{P}_z | \phi_n \rangle \quad (3.27)$$

Notar la relación de conmutación (3.28):

$$[\hat{z}, \hat{H}_0] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{z}} = i\hbar \frac{\hat{P}_z}{m_e} \quad (3.28)$$

$$[\hat{z}, \hat{H}_0] = \hat{z}\hat{H}_0 - \hat{H}_0\hat{z} \quad (3.29)$$

$$\langle \phi_m | \hat{P}_z | \phi_n \rangle = im_e \omega_{m,n} \langle \phi_m | \hat{z} | \phi_n \rangle \quad (3.30)$$

Con estos resultados se obtiene la expresión (3.31) para el elemento matricial $\langle \phi_m | \widehat{W}_I^{(DE)}(t) | \phi_n \rangle$.

$$\langle \phi_m | \widehat{W}_I^{(DE)}(t) | \phi_n \rangle = i \frac{\omega_{m,n}}{\omega} \mathcal{E} \langle \phi_m | q\hat{z} | \phi_n \rangle \quad (3.31)$$

Reglas de Selección en Aproximación Dipolar Eléctrica: Primero se obtienen las funciones propias de \hat{H}_0 en representación posición, donde se usará el subíndice "i" en los números cuánticos del estado inicial y "f" en los del estado final.

$$\phi_m(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \phi_m \rangle = R_{n_f, l_f}(r) Y_{n_f}^{m_f}(\theta, \phi) \quad (3.32)$$

$$\phi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \phi_n \rangle = R_{n_i, l_i}(r) Y_{n_i}^{m_i}(\theta, \phi) \quad (3.33)$$

$$\langle \phi_m | q\hat{z} | \phi_n \rangle = q \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r} R_{n_f, l_f}(r) Y_{n_f}^{m_f*}(\theta, \phi) z R_{n_i, l_i}(r) Y_{n_i}^{m_i}(\theta, \phi) \quad (3.34)$$

Es conveniente escribir esta integral en coordenadas esféricas:

$$\langle \phi_m | q\hat{z} | \phi_n \rangle = q \int d\Omega \int_{\mathbb{R}^+} dr r^2 R_{n_f, l_f}(r) Y_{n_f}^{m_f*}(\theta, \phi) r \cos \theta R_{n_i, l_i}(r) Y_{n_i}^{m_i}(\theta, \phi) \quad (3.35)$$

Se observa que $\cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0(\theta)$. Analizando la integral angular se obtienen las reglas de selección:

$$\langle \phi_m | q\hat{z} | \phi_n \rangle \sim \int d\Omega Y_{n_f}^{m_f*}(\theta, \phi) Y_1^0(\theta) Y_{n_i}^{m_i}(\theta, \phi) \quad (3.36)$$

Para que esta integral no se anule se deben cumplir las siguientes condiciones:

Reglas de selección:

- $l_f - l_i = \pm 1$
- $m_f - m_i = 1, 0, -1$

3.5 Estados metaestables:

Son aquellos estados que por reglas de selección se demoran mucho en decaer, es decir, que a órdenes bajos la transición de este estado a cualquier otro está prohibido.

3.6 Más allá de la aproximación dipolar eléctrica:

$$\widehat{W}(t) = \widehat{W}_I^{(DE)} + [\widehat{W}_I(t) - \widehat{W}_I^{(DE)}] + \widehat{W}_{II}(t) \quad (3.37)$$

$$\widehat{W}_I(t) - \widehat{W}_I^{(DE)} = -i \frac{qk}{m_e} [A_0 e^{i\omega t} - A_0^* e^{i\omega \hat{y}}] \widehat{P}_z \hat{y} \quad (3.38)$$

$$\widehat{W}_I(t) - \widehat{W}_I^{(DE)} = -i \frac{q}{m_e} \mathcal{B} \cos(\omega t) \widehat{P}_z \hat{y} \quad (3.39)$$

Se observa la siguiente forma de escribir el operador $\widehat{P}_z \hat{y}$:

$$\widehat{P}_z \hat{y} = \frac{1}{2} (\widehat{P}_z \hat{y} - \hat{z} \widehat{P}_y) + \frac{1}{2} (\widehat{P}_z \hat{y} + \hat{z} \widehat{P}_y) \quad (3.40)$$

$$\widehat{P}_z \hat{y} = \frac{1}{2} \widehat{L}_x + \frac{1}{2} (\widehat{P}_z \hat{y} + \hat{z} \widehat{P}_y) \quad (3.41)$$

Por lo que se tiene la siguiente expresión:

$$\widehat{W}_I(t) - \widehat{W}_I^{(DE)} = -\frac{q}{2m_e} \widehat{L}_x \mathcal{B} \cos(\omega t) - \frac{q}{2m_e} \mathcal{B} \cos(\omega t) (\widehat{P}_z \hat{y} + \hat{z} \widehat{P}_y) \quad (3.42)$$

$$\widehat{W}_{II}(t) = -\frac{q}{m_e} \widehat{S}_x \mathcal{B} \cos(\omega t) \quad (3.43)$$

Se tienen dos perturbaciones: $\widehat{W}_{QE}(t)$ y $\widehat{W}_{DM}(t)$. $\widehat{W}_{QE}(t)$ es el término cuadrupolar eléctrico y $\widehat{W}_{DM}(t)$ el dipolar magnético.

$$\widehat{W}_{QE}(t) = -\frac{q}{2m_e c} (\widehat{P}_z \hat{y} + \hat{z} \widehat{P}_y) \mathcal{E} \cos(\omega t) \quad (3.44)$$

$$\widehat{W}_{DM}(t) = -\frac{q}{2m_e} (\widehat{L}_x + 2\widehat{S}_x) \mathcal{B} \cos(\omega t) \quad (3.45)$$

Se observa que del término dipolar magnetico hay una contribución debida al dipolo magnético dado por (3.46) y la otra debido al dipolo magnético del spin (3.47).

$$-\frac{q}{2m_e} \widehat{L}_x \mathcal{B} \cos(\omega t) \longrightarrow \text{Dipolo magnético orbital} \quad (3.46)$$

$$-\frac{q}{m_e} \widehat{S}_x \mathcal{B} \cos(\omega t) \longrightarrow \text{Dipolo magnético del spin} \quad (3.47)$$

Se observa que para la probabilidad de transición se deben mirar los elementos dados por (3.48) y (3.49).

$$\widehat{W}_{QE}(t) \longrightarrow \langle \phi_m | \widehat{P}_z \hat{y} + \hat{z} \widehat{P}_y | \phi_n \rangle \quad (3.48)$$

Reglas de Selección Cuadrupolar Eléctrico:

- $\Delta l = 0, \pm 2$
- $\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$

$$\widehat{W}_{DM}(t) \longrightarrow \langle \phi_m | \widehat{L}_x + 2\widehat{S}_x | \phi_n \rangle \quad (3.49)$$

Reglas de Selección Dipolar Magnética:

- $\Delta l = 0$
- $\Delta m = 0, \pm 1$
- $\Delta m_s = 0, \pm 1$

Chapter 4

Regla de Oro de Fermi

Ahora se estudiarán las transiciones de energías discretas a energías continuas. Un ejemplo de esto es cuando un electrón pasa de un estado ligado del átomo (energías discretas) a estar libre (ionizarse, energías continuas). Como se tienen energías continuas es necesario introducir una densidad de probabilidad.

$$\delta P_n(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2 \quad (4.1)$$

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE \quad (4.2)$$

Donde D_f es una franja de energías finales y $\rho(\beta, E)$ es la densidad de estados finales.

$$\delta P_n(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2 \quad (4.3)$$

Se recuerda que aún no se ha hecho ninguna aproximación. Utilizando teoría de perturbaciones a primer orden se obtiene:

$$|\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{4\hbar^2} |\langle \beta, E | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2 F\left(t, \omega - \frac{E - E_n}{\hbar}\right) \quad (4.4)$$

Donde se asumió que el potencial era de la forma $\hat{V}(t) = \hat{V} \cos(\omega t)$. Por lo que a primer orden la densidad de probabilidades es:

$$\delta P_n(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\beta dE \rho(\beta, E) \frac{1}{4\hbar^2} |\langle \beta, E | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2 F\left(t, \omega - \frac{E - E_n}{\hbar}\right) \quad (4.5)$$

Se hacen las siguientes suposiciones.

Suposiciones extras para Regla de Oro de Fermi:

- $\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \omega - \frac{E - E_n}{\hbar}\right) = 2\pi t \delta\left(\omega - \frac{E - E_n}{\hbar}\right) = 2\pi \hbar t \delta(\hbar\omega - E + E_n)$
- $\delta\beta_f \ll 1$
- $\delta E \ll 1$

Con estas nuevas suposiciones se obtiene la siguiente expresión:

$$\delta P_n(\alpha_f, t) = \frac{\pi t}{2\hbar} \delta\beta_f \rho(\beta, E = E_n + \hbar\omega) |\langle \beta, E = E_n + \hbar\omega | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2 \quad (4.6)$$

Se define una densidad de probabilidad de transición por unidad de tiempo y por unidad de intervalo β_f :

$$W_n(\alpha_f) = \frac{d}{dt d\beta_f} [\delta P_n(\alpha_f, t)] \quad (4.7)$$

$$W_n(\alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta, E = E_n + \hbar\omega | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2 \rho(\beta, E = E_n + \hbar\omega) \quad (4.8)$$

La ecuación (4.8) se conoce como la "Regla de Oro de Fermi". Se observa que hay dos componentes que contribuyen. La expresión (4.9) es la densidad de estados que dicta qué tantos estados tiene en una franja a donde caer. Por otro lado la expresión (4.10) tiene las reglas de selección que dicen qué transiciones no van a ocurrir a primer orden.

$$\rho(\beta, E = E_n + \hbar\omega) \longrightarrow \text{Densidad de Estados} \quad (4.9)$$

$$|\langle \beta, E = E_n + \hbar\omega | \hat{V} | \phi_n \rangle|^2 \longrightarrow \text{Reglas de Selección} \quad (4.10)$$