Plan de la clase: • objetivo principal: desarrollar teoría perturbaciones dependiente del tiempo

plan:
1) Hamiltonianos dependientes del tiempo: dificultad, solución formal: serie de Dyson
2) Picture de interacción: para resolver problemas de la forma: $H = H_0 + V(t)$
3) ① + ② con $H = H_0 + \lambda V(t)$, $\lambda \ll 1$ $\Rightarrow$ teoría perturbaciones dep. de t
4) ejemplos típicos: $V(t) = cte$, $V(t) =$ armónico ; límite t grande
Regla de oro de Fermi

Hamiltonianos dependientes del tiempo:

hasta ahora ~~nos~~ nos concentramos en problemas con H indep. de t.
pero en general podremos tener un $H(t)$ (por ejemplo debido a un driving externo que se controla externamente: es spin 1/2 en campo $B(t)$ que variamos en el tiempo)

Como vimos en clases ~~de~~ sobre evolución temporal:

dado $H(t) \Rightarrow$ operador evolución temporal $U(t)$ es tq $\boxed{\dfrac{dU(t,t_0)}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar} H(t)\, U(t,t_0)}$

casos particulares:

• $H(t) = H$ indep de t $\Rightarrow U(t,t_0) = e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}}$

• $H(t)$ depende de t pero $[H(t), H(t')] = 0 \quad \forall t, t' \Rightarrow U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')}$

(aunque no vamos a demostrarlo se puede mostrar, no es difícil)

Caso más general $\longrightarrow$ no hay sol. de forma cerrada general

pero, una posible forma de expresar la solución es la siguiente:

$$\frac{dU(t,t_0)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} H(t) U(t,t_0) \Rightarrow \underbrace{\int_{t_0}^{t} \frac{d}{dt_1} U(t_1,t_0)}_{U(t,t_0) - \underbrace{U(t_0,t_0)}_{\mathbb{1}}} = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H(t_1) U(t_1, t_0)$$

$$\Rightarrow \boxed{U(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t_1) U(t_1,t_0)\, dt_1}$$ ecuación integral para $U(t,t_0)$

Si reemplazamos la expresión integral de $U(t,t_0)$ adentro de la integral tenemos:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H(t_1)\left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2) U(t_2,t_0)\right) = \underbrace{\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H(t_1)}_{\text{notemos ya no depende de } U(t,t_0)} + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) U(t_2,t_0)$$

podemos seguir reemplazando de forma ~~[illegible]~~ recursiva y así obtenemos:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, H(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, H(t_1)H(t_2) + \frac{1}{(i\hbar)^3}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3\, H(t_1)H(t_2)H(t_3) + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$$

Serie de Dyson

es la solución formal de la ec. diferencial para $U(t,t_0)$.

observación: por construcción de la serie: $t > t_1 > t_2 > \cdots > t_n > t_0$

por lo tanto $H(t_1)\,H(t_2)\cdots H(t_n)$ están ordenados temporalmente. (Y no conmutan !!!)

comentario:

a veces esto se ve escrito de forma formal como:

$$U(t,t_0) = \mathcal{T}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')}\right]$$ con $\mathcal{T}$: operador de ordenamiento temporal

$$\mathcal{T}\left[A(t_1)B(t_2)\right] = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{si } t_1 \geq t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & \text{si } t_1 < t_2 \end{cases}$$

A, B operadores arbitrarios dependientes del tiempo

Comentario: interpretación cualitativa de $T\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt' H(t')}\right]$

notemos que si expandimos la exponencial en serie de potencias obtenemos una serie muy parecida a la de Dyson, salvo que ahora los productos de $H(t)\,H(t')$ van a estar ordenados de cualquier forma.

T se mete dentro de ese desarrollo y se asegura de ordenarlos todos como corresponda.

Observaciones / comentarios:

- teniendo presente nuestro objetivo de hacer perturbaciones notemos que la serie de Dyson tiene un aire a lo buscado porque el k-ésimo término va como $\sim H^k$
  pero en general no podemos (ni tiene sentido) decir que H es pequeño

- para tener perturbaciones: $H = H_0 + \lambda V(t)$ con $\lambda \ll 1$

  pero ahora nos molesta el término H_0.

  ¿nos lo podemos sacar de encima?

Representación de interacción (o de Dirac)

supongamos que tenemos un Hamiltoniano $H(t) = H_0 + V(t)$

con H_0 independiente del tiempo y tal que conocemos sus autoestados $\{|n\rangle\}$ y sus energías $\{E_n\}$, $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

el op. de evol temp es $U(t)$ tq $\frac{dU}{dt} = \frac{1}{i\hbar} H(t)\, U(t)$ con todo el $H(t)$

¿podemos aprovechar el hecho que conocemos los autoestados y autoval de H_0 para simplificar el problema?

dado estado $|\psi^{(s)}(t)\rangle$ y operador $A^{(s)}(t)$ en la repr. de Schrödinger, definimos nuevos estado y operadores transformándolos via $\boxed{U_0^\dagger(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}}$, es decir

$$\boxed{|\psi^{(I)}(t)\rangle = U_0^\dagger(t)\,|\psi^{(s)}(t)\rangle = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}\,|\psi^{(s)}(t)\rangle}$$

representación de interacción

$$\boxed{A^{(I)}(t) = U_0^\dagger(t)\, A^{(s)}(t)\, U_0(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}\, A^{(s)}(t)\, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}}$$

en particular $V^{(I)}_{(t)} = U_0^\dagger(t)\, V^{(s)}_{(t)}\, U_0(t) = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\, V^{(s)}_{(t)}\, e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$

<u>observación</u>: notemos que $\langle \psi^{I}(t) | A^{(I)}(t) | \psi^{(I)}_{(t)} \rangle = \langle \psi^{(s)}(t) | \underbrace{U_0(t) U_0^\dagger(t)}_{1\!\!1} A^{(s)}(t) \underbrace{U_0(t) U_0^\dagger(t)}_{1\!\!1} | \psi^{(s)}_{(t)} \rangle$

$$= \langle \psi^{(s)}(t) | A^{(s)}(t) | \psi^{(s)}_{(t)} \rangle = \langle A \rangle (t)$$

por lo tanto los valores medios y las probabilidades calculados en picture Int. dan lo mismo que en Sch. (y Heis.)

- evolución temporal de estados en picture interacción:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[|\psi^{(I)}(t)\rangle \right] = \frac{\partial}{\partial t}\left[U_0^\dagger(t)\, |\psi^{(s)}(t)\rangle \right] = \frac{\partial}{\partial t}\left[e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} |\psi^{(s)}(t)\rangle \right] =$$

$$= \frac{iH_0}{\hbar}\left[e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} |\psi^{(s)}(t)\rangle \right] + e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left[|\psi^{(s)}(t)\rangle \right]}_{\frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi^{(s)}(t)\rangle \;\; \text{(ec. Sch.)}}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[-\underbrace{H_0\, e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}}_{e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} H_0 \;\; \text{(conmutan)}} |\psi^{(s)}(t)\rangle + e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} \underbrace{H(t)}_{H_0 + V(t)} |\psi^{(s)}(t)\rangle \right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[-e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} \cancel{H_0} |\psi^{(s)}(t)\rangle + e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} (\cancel{H_0} + V(t))\, |\psi^{(s)}(t)\rangle \right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V^{(s)}(t)\, |\psi^{(s)}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \underbrace{e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V^{(s)}(t)\, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}}_{V^{(I)}(t)} \underbrace{e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi^{(s)}(t)\rangle}_{|\psi^{(I)}(t)\rangle}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(I)}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} V^{(I)}(t)\, |\psi^{(I)}(t)\rangle}$$

evol temp. de estados en repr de int.

(es como ec. Sch. pero con $V^{(I)}(t)$ en cambio que de H total)

• evolución temporal de operadores:

$$\frac{d}{dt} A^{(I)}(t) = \frac{d}{dt}\left(U_0^\dagger(t)\, A^{(s)}(t)\, U_0(t) \right) = \underbrace{\left(\frac{d}{dt} U_0^\dagger(t)\right)}_{-\frac{1}{i\hbar} U_0^\dagger H_0} A^{(s)}(t)\, U_0(t) + \underbrace{U_0^\dagger(t) \left(\frac{\partial A^{(s)}}{\partial t}\right) U_0(t)}_{\left(\frac{\partial A^{(s)}}{\partial t}\right)^{(I)}} + U_0^\dagger(t) A^{(s)}(t) \underbrace{\left(\frac{dU_0(t)}{dt}\right)}_{\frac{1}{i\hbar} H_0 U_0}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\Big[U_0^\dagger(t) A^{(s)}(t) \underbrace{H_0 U_0}_{\substack{U_0 H_0 \\ \text{(conmutan)}}} - \underbrace{U_0^\dagger(t) H_0}_{\substack{H_0 U_0^\dagger \\ \text{(conmutan)}}} A^{(s)}(t)\, U_0(t) \Big] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^{(I)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dA^{(I)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[A^{(I)}(t), H_0\right] + \left(\frac{\partial A^{(s)}}{\partial t}\right)^{(I)}}$$

evol temp. de operadores en repr. de int

(es como ec. Heis. pero con H_0 en cambio que de H total)

Operador de evolución temporal de estados en repr. de int.:

def $T(t)$ tq $|\psi^{(I)}_{(t)}\rangle = T(t)\,|\psi^{(I)}_{(0)}\rangle$

notemos que a $t=0$ todos los repr. coinciden (Sch, Heis, Int.)
entonces puedo obviar el supraíndice en $|\psi_{(0)}\rangle$

$$\Rightarrow \quad \boxed{|\psi^{(I)}(t)\rangle = T(t)\,|\psi_{(0)}\rangle}$$

reemplazando en ec. por evol de $|\psi^{(I)}(t)\rangle$:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi^{(I)}(t)\rangle = \left(\frac{dT(t)}{dt}\right)|\psi_{(0)}\rangle = \frac{1}{i\hbar}V^{(I)}(t)\,T(t)\,|\psi_{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}V^{(I)}(t)\,T(t)}$$

(es como la ec. para el op. de evol temporal pero con $V^{(I)}$ en cambio de H total)

además también tenemos que:

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle \underset{\text{def } T}{=} T(t)\,|\psi_{(0)}\rangle$$

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle \underset{\text{def. pict. Int}}{=} U_0^{\dagger}(t)\,|\psi^{(S)}(t)\rangle = U_0^{\dagger}(t)\underbrace{U(t)}_{\text{op evol temporal con el } H \text{ total}}|\psi_{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{T(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}\,U(t)}$$

ejemplo utilidad (práctica) de sepr. de int.:

si inicialmente $|\psi(0)\rangle = \sum_n{}' \, c_n(0)\,|n\rangle$, $c_n(0) = \langle n|\psi(0)\rangle$, $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

buscamos $|\psi^{(I)}(t)\rangle = \sum_n{}' \, c_n(t)\,|n\rangle$, $c_n(t) = \langle n|\psi^{(I)}(t)\rangle$

(obs: $|n\rangle$ no lo cambiamos. es una base de $\mathcal{H}$ y podemos siempre elegir de escribir el estado en esa misma base)

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} c_n(t) = \frac{d}{dt}\langle n|\psi^{(I)}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle n|\, V^{(I)}(t)\,|\psi^{(I)}(t)\rangle =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\sum_m \langle n|\, V^{(I)}(t)\,|m\rangle \underbrace{\langle m|\psi^{(I)}(t)\rangle}_{c_m(t)} \Rightarrow \frac{d}{dt} c_n(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_m \langle n|V^{(I)}(t)|m\rangle\, c_m(t)$$

además, $\langle n|V^{(I)}(t)|m\rangle = \langle n|\, e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V(t)\, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\,|m\rangle = e^{\frac{i(E_n-E_m)t}{\hbar}}\langle n|\,V(t)\,|m\rangle = e^{i\omega_{nm}t}\, V_{nm}(t)$

con $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$, $V_{nm}(t) = \langle n|\,V(t)\,|m\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d c_n(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\sum_m V_{nm}(t)\, e^{i\omega_{nm}t}\, c_m(t)}$$

comentarios:

- sist de ecs diff lineales acopladas → escribimos matricialmente, diagonalizamos y lo ~~[illegible]~~ resolvemos.
- aparece $V(t)$ (el de Sch), no $V^{(I)}(t)$!! nunca hace falta calcular explícitamente quién es $V^{(I)}(t)$

(la diferencia entre $V(t)$ y $V^{I}(t)$ quedó absorbida en las fases $e^{i\omega_{nm}t}$)

comentarios

- la repr de int es muy útil para resolver problemas dep del tiempo de la forma $H = H_0 + V(t)$, de forma exacta analítica

(ejemplos: oscilaciones de Rabi , resonancia magnética, etc)

- la forma $H = H_0 + V(t)$ es muy común en los problemas que dependen del tiempo

$$H = \underbrace{H_0}_{} + \underbrace{V(t)}_{} \longrightarrow$$ algún campo, "forzado" / driving externo que prendemos y controlamos de forma externa

(ejemplo: el átomo de Hidrógeno en presencia de un campo eléctrico que varía en el tiempo)

el Hamiltoniano del sistema físico, que típicamente no depende del tiempo porque las interacciones fundamentales de la naturaleza no lo hacen (ej: átomo hidrógeno)

Perturbaciones dependientes del tiempo:

tenemos problema: $H(t) = H_0 + \lambda V(t)$, $\lambda \ll 1$, con H_0 : autoestados y autovalores conocidos

$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$

$\{|n\rangle\}$ y $\{E_n\}$ conocidos

en la repr. de interacción:

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle = T(t)\,|\psi(0)\rangle \qquad \text{con} \qquad \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} V^{(I)}(t)\, T(t)$$ (como vimos recién)

podemos escribir la solución para $T(t)$ como serie de Dyson:

$$T(t) = \mathbb{1} + \frac{\lambda}{i\hbar}\int_0^t dt_1\, V^{(I)}(t_1) + \frac{\lambda^2}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, V^{(I)}(t_1)\, V^{(I)}(t_2) + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(i\hbar)^n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n\; V^{(I)}(t_1)\, V^{(I)}(t_2) \ldots V^{(I)}(t_n)$$

si $\lambda \ll 1$, la serie de Dyson nos da un desarrollo perturbativo de $T(t)$ en potencias de λ.

Aplicación: cálculo perturbativo de probabilidades de transición:

supongamos que a $t=0$ tenemos $H(0) = H_0$ y estamos inicialmente en un estado $|i\rangle$ de H_0:

$$|\psi(0)\rangle = |i\rangle \quad \text{con} \quad H_0 |i\rangle = E_i |i\rangle$$

a $t=0$ prendemos la perturbación y para $t>0$: $H(t) = H_0 + \lambda V(t)$

nos preguntamos cuál es la probabilidad de transición a otro autoestado $|f\rangle$ de H_0 ($H_0|f\rangle = E_f|f\rangle$):

$$\boxed{P_{i\to f}(t) = |\langle f| U(t) |i\rangle|^2}$$

notemos que: $\underbrace{\langle n|T(t)|m\rangle}_{\text{op. evol temp pict. int.}} = \langle n| e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} U(t) |m\rangle = e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} \langle n|U(t)|m\rangle$

$$\Rightarrow \quad \boxed{P_{i\to f}(t) = |\langle f|U(t)|i\rangle|^2 = |\langle f| T(t) |i\rangle|^2}$$

(obs: la segunda igualdad vale sólo porque $|i\rangle$, $|f\rangle$ son autoestados de H_0!! Para un estado general en principio podría ser distinto)

en general habría que transformar los estados al picture de interacción

(obs: en el caso particular de probabilidades de transición entre autoestados de H_0 da lo mismo usar el op. de evol temp. de Sch que el de interacción i.e. no hace falta transformar los estados al picture de interacción (pues como son autoestados de H_0 sólo contribuyen fases))

(obs. para estado $|a\rangle$, $|b\rangle$ cualesquiera generales: $|\langle b|U(t)|a\rangle|^2 \neq |\langle b|T(t)|a\rangle|^2$
la igualdad vale al pisar $|a\rangle, |b\rangle$ autoestados de H_0.)

(Para estados arbitrarios habría que transformar $|b\rangle \longrightarrow |b^{(I)}\rangle$)

inicialmente: $|\psi(0)\rangle = |i\rangle \Rightarrow |\psi^{(I)}(t)\rangle = T(t)|i\rangle = \sum_n \langle n|T(t)|i\rangle\, |n\rangle$

$$= \sum_n C_n(t)\, |n\rangle$$

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

expandimos el estado evolucionado en el picture de interacción en la base de H_0 (que es siempre la misma, no cambia)

usando expansión de $T(t)$ de Dyson:

$$C_n(t) = \langle n|\mathbb{1}|i\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar}\int_0^t dt_1 \langle n|V^{(I)}(t_1)|i\rangle + \frac{\lambda^2}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle n|V^{(I)}(t_1)\, V^{(I)}(t_2)|i\rangle + \dots$$

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

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

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 \langle n|V^I(t_1)|i\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 \langle n|e^{\frac{iH_0t_1}{\hbar}} V(t_1)\, e^{\frac{-iH_0t_1}{\hbar}}|i\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1\, e^{\frac{i(E_n-E_i)t_1}{\hbar}} \langle n|V(t_1)|i\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1\, e^{i\omega_{ni}t_1} V_{ni}(t_1)$$

con $\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$, $V_{ni}(t) = \langle n|V(t)|i\rangle$

$$C_n^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle n | V^{(I)}(t_1) \underset{\uparrow \atop \mathbb{1} = \sum_m |m\rangle\langle m|}{} V^{(I)}(t_2) | i \rangle = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_m \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle n | V^{(I)}(t_1) | m \rangle \langle m | V^{(I)}(t_2) | i \rangle =$$

$$= \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_m \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \; e^{i\omega_{nm} t_1} V_{nm}(t_1) \, e^{i\omega_{mi} t_2} V_{mi}(t_2)$$

⋮ Y así con todos los $C_n^{(k)}(t)$ (metemos cuantas identidades en la base de H_0 hagan falta y obtenemos fases ω_{nk} y elementos de matriz V_{nk})

comentario: notemos que para calcular la última forma de los $C_n^{(k)}$ no hace falta nunca calcular quién es el operador $V^{(I)}$ (V en el pict de int.) el hecho que estamos usando el picture de interacción queda absorbido en las fases $e^{i\omega_{nk} t}$ (que son conocidas).

luego: $P_{i\to n}(t) = |C_n(t)|^2 = \left| C_n^{(0)}(t) + \lambda C_n^{(1)}(t) + \lambda^2 C_n^{(2)}(t) + \cdots \right|^2$

comentario: para $n \neq i$, a primer orden $P_{i\to n}(t) \simeq |C_n^{(1)}(t)|^2$

8

Ejemplo: perturbación independiente del tiempo

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad , \quad V(t) = \begin{cases} 0 & t<0 \\ V & t \geq 0 \end{cases}$$

(caso sencillo cuyos resultados nos van a servir para el siguiente ejemplo más interesante)

$$P_{i\to n}(t) = \ ?$$

para $n \neq i \Rightarrow C_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} = 0$

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1\, e^{i\omega_{ni}t_1} V_{ni} = \frac{V_{ni}}{i\hbar}\,\frac{e^{i\omega_{ni}t}-1}{i\omega_{ni}} = \frac{V_{ni}}{\hbar}\,\frac{1-e^{i\omega_{ni}t}}{\omega_{ni}}$$

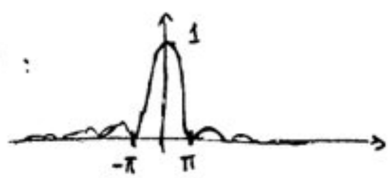
$$= (-i)\,\frac{V_{ni}}{\hbar}\,\frac{\sin[\omega_{ni}t/2]}{\omega_{ni}/2}\, e^{i\omega_{ni}t/2}$$

luego, a primer orden:

$$C_n(t) \simeq C_n^{(0)}(t) + C_n^{(1)}(t) = (-i)\,\frac{V_{ni}}{\hbar}\,\frac{\sin[\omega_{ni}t/2]}{\omega_{ni}/2}\, e^{i\omega_{ni}t/2}$$

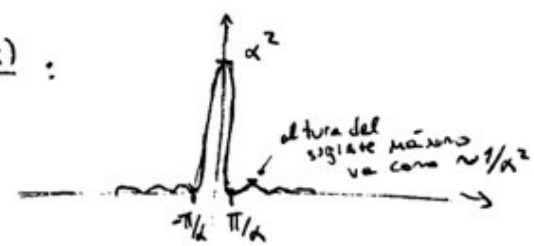
$$\Rightarrow \boxed{P_{i\to n}(t) \simeq |C_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\,\frac{\sin^2[\omega_{ni}t/2]}{(\omega_{ni}/2)^2}}$$

recordemos: $\dfrac{\sin^2(x)}{x^2}$:



sinc
función que aparece en F2 cuando estudiamos interferencia / difracción

$\dfrac{\sin^2(\alpha x)}{x^2}$:



al hacer α grande todo se va a cero salvo en el origen donde diverge.

efectivamente, formalmente se puede mostrar que: $\lim_{\alpha\to\infty} \frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \pi\,\delta(x)$

entonces, para "$t\to\infty$" (en este caso: $\frac{\omega_{ni}t}{2} \gg 1$)

tenemos: $P_{i\to n}(t) \simeq \frac{|V_{ni}|^2}{t^2} t\pi\,\delta(\omega_{ni}/2) = \frac{|V_{ni}|^2}{t^2} t\pi\,\delta\left(\frac{E_n-E_i}{2\hbar}\right) = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2 t\,\delta(E_n-E_i)$

$$\Rightarrow \boxed{P_{i\to n}(t) \simeq \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2 t\,\delta(E_n-E_i)}$$

Regla de oro de Fermi

(caso V indep de t)

observaciones.

- a primer orden sólo transición si $V_{ni} \neq 0$.

- a primer orden, a tiempos largos sólo tenemos transiciones ~~[illegible]~~ permitidas, que tengan la misma energía inicial y final.

observación:
la probabilidad de transición aumenta linealmente en t: dos posibles conflictos: • $P<1$ • P es perturbativamente
por lo tanto cuidado con tiempos largos ("$t\to\infty$"). La aprox. sigue siendo $\omega_{ni}t/2 \gg 1$, pero todo el coeficiente es perturbativo (y por lo tanto "pequeño").

Muchas veces se trabaja con la tasa de transición (transiciones (prob) por unidad de tiempo).

$$R_{i\to n}(t) = \frac{dP_{i\to n}(t)}{dt} \simeq \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\,\delta(E_n-E_i) \quad \text{indep. del tiempo. (para "}t\to\infty\text{")}$$

Ejemplo 2: perturbación armónica: $H = H_0 + V(t)$, $V(t) = V_0 e^{i\omega t} + V_0^{+} e^{-i\omega t}$

(V_0 algún operador independiente del tiempo)

ejemplo típico: interacción $\underset{\downarrow \, H_0}{\text{átomo}}$ – $\underset{\downarrow \, \text{perturbación armónica}}{\text{campo electromagnético}}$

$P_{i\to n}(t) = ?$

para $i \neq n$, $C_n^{(0)}(t) = 0$

$$\boxed{C_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1\, e^{i\omega_{ni}t_1}\left(V_{0_{ni}} e^{i\omega t_1} + V_{0_{ni}}^{+} e^{-i\omega t_1}\right)} = \frac{1}{\hbar}\left[V_{0_{ni}}\frac{\left(1 - e^{i(\omega+\omega_{ni})t}\right)}{\omega+\omega_{ni}} + V_{0_{ni}}^{+}\frac{\left(1 - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}\right)}{\omega_{ni}-\omega}\right]$$

juntamos los ω en los exponentes y es la misma cuenta del otro caso

$$= \frac{-i}{\hbar}\left[V_{0_{ni}}\frac{\sin\left[(\omega_{ni}+\omega)t/2\right]}{(\omega_{ni}+\omega)/2} e^{i(\omega_{ni}+\omega)t/2} + V_{0ni}^{+}\frac{\sin\left[(\omega_{ni}-\omega)t/2\right]}{(\omega_{ni}-\omega)/2} e^{i(\omega_{ni}-\omega)t/2}\right]$$

a primer orden:

$$P_{i\to n}(t) \simeq |C_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\Big[(\quad) + (\quad)\Big]^2 =$$

$$= \frac{|V_{0ni}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\left[(\omega_{ni}+\omega)t/2\right]}{\left((\omega_{ni}+\omega)/2\right)^2} + \frac{|V_{0ni}^{+}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\left[(\omega_{ni}-\omega)t/2\right]}{\left((\omega_{ni}-\omega)/2\right)^2} + \frac{V_{0ni}V_{0ni}^{+*}}{\hbar^2} e^{i\omega t}\frac{\sin\left[(\omega_{ni}+\omega)t/2\right]}{(\omega_{ni}+\omega)/2}\frac{\sin\left[(\omega_{ni}-\omega)t/2\right]}{(\omega_{ni}-\omega)/2} + \text{c.c. del anterior}$$

con el mismo argumento de antes $\frac{\sin[\ ]}{[\ ]} \longrightarrow \delta(\ )$ cuando "$t \to \infty$"

como el término cruzado $\frac{\sin(+)}{(+)} \cdot \frac{\sin(-)}{(-)}$ va a dar deltas en dos posiciones distintas

$\Rightarrow$ es despreciable.

luego "$t \to \infty$":

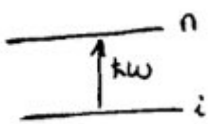
$$P_{i\to n}(t) \simeq \frac{\pi |V_{0ni}|^2}{\hbar^2} t\, \delta\left(\frac{\omega_{ni}+\omega}{2}\right) + \frac{\pi |V_{0ni}|^2}{\hbar^2} t\, \delta\left(\frac{\omega_{ni}-\omega}{2}\right)$$

a su vez sólo una de las dos deltas será distinta de cero al mismo tiempo (justamente el motivo por el cual tiramos el término cruzado)

tenemos dos casos: Regla de oro de Fermi (con perturbación armónica)

caso: $\omega \approx \omega_{ni}$ es decir $\boxed{E_n \approx E_i + \hbar\omega}$: $\boxed{P_{i\to n}(t) \approx \frac{\pi |V_{0ni}^{+}|^2}{\hbar^2} t\, \delta\left(\frac{\omega_{ni}-\omega}{2}\right) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{0ni}^{+}|^2 t\, \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)}$

interpretación:

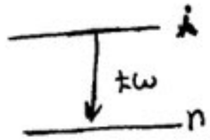


absorción

- se absorbe un cuanto de energía $\hbar\omega$ de la perturbación y se pasa del nivel E_i al nivel $E_n = E_i + \hbar\omega$ (conservación estricta de energía)
- caso átomo + luz: se absorbe un fotón de frecuencia ω y el e^- pasa del nivel i al nivel n.

caso: $\omega \approx -\omega_{ni}$ es decir $\boxed{E_n \approx E_i - \hbar\omega}$: $\boxed{P_{i\to n}(t) \simeq \pi \frac{|V_{0ni}|^2}{\hbar^2} t\, \delta\left(\frac{\omega_{ni}+\omega}{2}\right) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{0ni}|^2 t\, \delta(E_n - E_i + \hbar\omega)}$

interpretación:



sólo posible si el sistema está excitado inicialmente.

emisión estimulada

- el sistema pasa a un nivel más bajo y la perturbación absorbe el cuanto de energía emitido por el sistema.
- caso átomo + luz: el átomo inicialmente excitado en el nivel i decae al nivel n y en el proceso emite un fotón de frecuencia ω.