20/10/2015

Rep. de interacción: evolución del estado

$H = H_0 + V(t)$ Tomamos $A(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}$

$$\cancel{|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n\rangle}$$

$$\cancel{= \sum_n \hat{c}_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar}\,|n\rangle}$$

~~Conexión con la rep. de interacción~~

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_I = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t)\rangle_S \\ O_I(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\, O_S\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \end{cases}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{+iH_0(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t)\rangle_S\right)$$

$$= -H_0\, e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t)\rangle_S + i\hbar\, e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\,\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_S$$

$$= -H_0\, e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t)\rangle_S + e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\, H\,|\psi(t)\rangle_S$$

$$= e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\, V\, |\psi(t)\rangle_S$$

$$= e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\, V\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t)\rangle_I$$

$$= V_I(t)\,|\psi(t)\rangle_I$$ Ec. de Tomonaga-Schwinger

Como una ec. de Schrödinger pero con V_I en lugar de H_I.

(Si $V_I(t) = 0 \Rightarrow |\psi(t)\rangle$ estacionario en esta rep.)

(Ver que $\dfrac{dA_I}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar}\left[A_I, H_0\right]$)

Expandamos el estado en rep. interacción en la base de H_0 en Schrödinger:

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t)\, |n\rangle$$

$$\cancel{= \sum_n c_n(t)\, e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |n\rangle_s}$$

$$\cancel{= \sum_n c_n(t)\, e^{iE_n(t-t_0)/\hbar} |n\rangle_s}$$

~~Poniendo $t_0 = 0$ obtenemos la ec.~~

~~Escribiendo $|\psi(t)\rangle_I = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi(t)\rangle_s$~~

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = V_I(t)\, |\psi(t)\rangle_I$$

$$= \sum_m V_I(t) |m\rangle\langle m|\psi(t)\rangle_I$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n|\psi(t)\rangle_I = \sum_m \langle n|V_I(t)|m\rangle\langle m|\psi(t)\rangle_I$$

Notar que: $\langle n|V_I(t)|m\rangle = \langle n| e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} V_s(t)\, e^{-iH_0(t-t_0)} |m\rangle$

$$= e^{i(E_n-E_m)(t-t_0)/\hbar} \langle n|V_s(t)|m\rangle$$

$$= V_{nm}(t)\, e^{i(E_n-E_m)(t-t_0)/\hbar}$$

$$\Rightarrow i\hbar\, \dot{c}_n(t) = \sum_m V_{nm}(t)\, e^{+i\,\omega_{nm}(t-t_0)}\, c_m(t)$$

$$\omega_{nm} \equiv \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$ frecuencias de Bohr

20/10/2015

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dot{c}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}\, e^{i\omega_{12}(t-t_0)} & \dots \\ V_{21}\, e^{i\omega_{21}(t-t_0)} & V_{22} & \dots \\ & & V_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.5.17)$$

Serie de Dyson

Definimos el operador de evolución en la rep. de interacción:

$$\left.\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= U_I(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle_I \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I &= V_I(t)\,|\psi(t)\rangle_I \end{aligned}\right\} \Longrightarrow$$

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

con la condición inicial: $U(t_0,t_0) = \mathbb{1}$

En forma integral:

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

Reemplazando $U_I(t',t_0)$ a la derecha:

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

$$= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'') \times U_I(t'',t_0)$$

$$= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'')$$

$$+ \dots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \cdots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)}\, V_I(t')\, V_I(t'') \cdots V_I(t^{(n)})$$

$$+ \dots$$

Serie de Dyson

Convergencia ?!

Probabilidad de Transición

Supongamos: $|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle \qquad H_0|i\rangle = E_i|i\rangle$

$$|\psi(t)\rangle_I = U_I(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle_I = U_I(t,t_0)\,|i\rangle$$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle n|\psi(t)\rangle_I}_{c_n(t)} = \langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle$$

Usamos la expansión perturbativa de $U_I(t,t_0)$:

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

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

$$= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \langle n| e^{iH_0(t'-t_0)/\hbar}\, V(t')\, e^{-iH_0(t'-t_0)}\,|i\rangle$$

ANEXO

$$|\psi(t)\rangle_I = U_I(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_i c_n(t)\,|n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle_S = \sum_i a_n(t)\,|n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t)\rangle_S$$

$$= e^{iH_0(t-t_0)} \sum_i a_n(t)\,|n\rangle$$

$$= \sum_n a_n(t)\, e^{iE_n(t-t_0)}\,|n\rangle$$

$$\Rightarrow c_n(t) = a_n(t)\, e^{iE_n(t-t_0)}$$

$$\Rightarrow |c_n(t)|^2 = |a_n(t)\, e^{iE_n(t-t_0)}|^2 = |a_n(t)|^2$$

La prob. de transición vale también para el estado en Schrödinger.

20/10/2015

$$= \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{i\omega_{ni}(t'-t_0)} V_{ni}(t')$$

Análogamente:

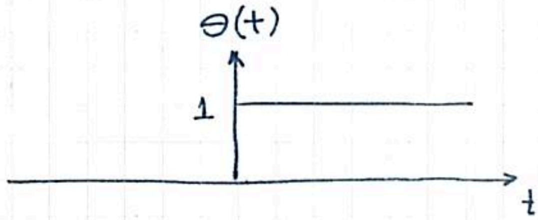
$$C_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \, e^{i\omega_{nm}(t'-t_0)}$$

$$V_{nm}(t') \, e^{i\omega_{mi} t''} V_{mi}(t'')$$

La prob. de encontrar a partícula en estado $|n\rangle$ es (si $n \neq i$), o prob. de transición:

$$P(i \to n) = |C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \dots|^2$$

Perturbación constante



$$V(t) = \overset{V(\vec{r},\vec{p},\vec{s})}{V} \; \Theta(t)$$

Sup. estado inicial: $|i\rangle$

$$C_n^{(0)} = \delta_{ni}$$

$V_{ni} = \langle n | V | i \rangle$ es constante

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

$$= \frac{-i}{\hbar} \frac{1}{i\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}(t-t_0)} \Big|_{t_0}^{t}$$

$$= \frac{-1}{E_n - E_i}\left(e^{i\omega_{ni}(t-t_0)} - 1\right) = \frac{1}{E_n - E_i}\left[1 - e^{i\omega_{ni}(t-t_0)}\right]$$

Probabilidad de transición a 1^{er} orden:

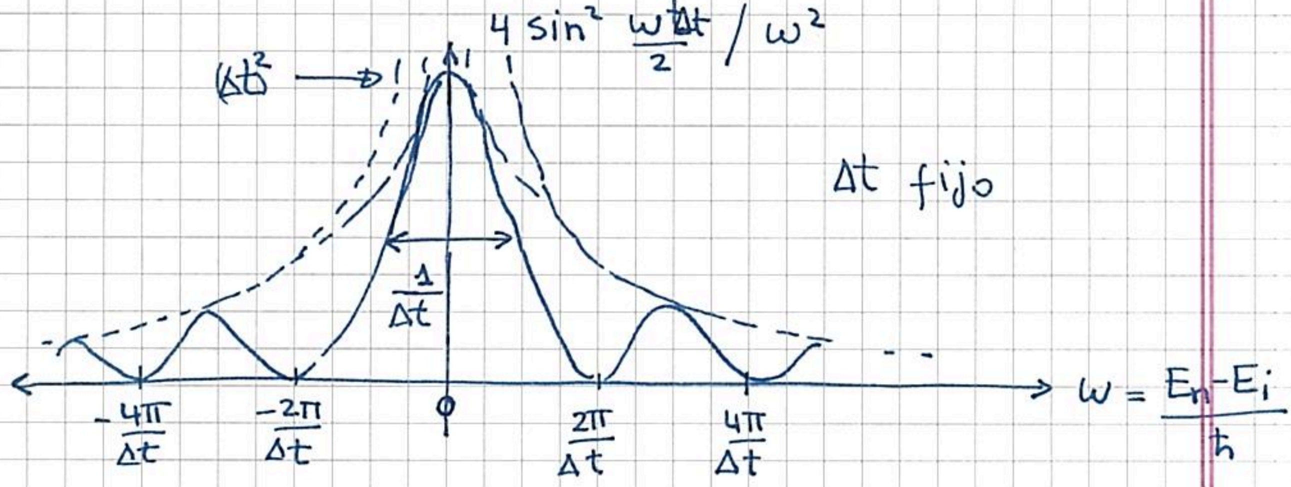
$(\tau \equiv t - t_0)$

$$|c_n^{(1)}|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \left(1 - e^{i\omega_{ni}\tau}\right)\left(1 - e^{-i\omega_{ni}\tau}\right)$$

$$= \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \left(1 - e^{-i\omega_{ni}\tau} - e^{i\omega_{ni}\tau} + 1\right)$$

$$= \frac{2|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \left[1 - \cos \omega_{ni}(t - t_0)\right]$$

$$= \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \operatorname{sen}^2\left[\frac{(E_n - E_i)(t - t_0)}{2\hbar}\right]$$



Para tiempos cortos el estado puede ir a otros $|n\rangle$ pero para t grandes sólo $|i\rangle$ sobrevive.

Si ΔE : cambio en energía

y $\Delta t = t - t_0$

$\cancel{\omega \lesssim \frac{2\pi}{\Delta t} = \Delta E}$ $\quad \omega \lesssim \frac{2\pi}{\Delta t} \Rightarrow \Delta E \, \Delta t \leq 2\pi\hbar$

Tomando el límite $E_n \to E_i$ (suponiendo que hay un contínuo de energías disponibles)

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 (t-t_0)^2$$

Ejemplos: problemas de scattering.
ionización por efecto Auger en átomos con más de un electrón.

E_i ——— contínuo de estados finales

densidad de estados: $\rho(E)\,dE$

Escribimos la prob. total de transición a otros estados (cercanos a E_i) $\circledast = \sum_n |c_n^{(1)}|^2$

$$P_{trans.} = \circledast = \int dE_n\, \rho(E_n)\, |c_n^{(1)}|^2$$

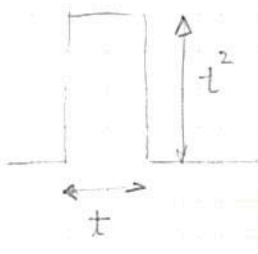
$$= 4 \int dE_n\, \rho(E_n) \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)(t-t_0)}{2\hbar}\right]$$

usamos: $\lim_{\alpha\to\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x)$

$$\frac{1}{|E_n - E_i|^2} \sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)(t-t_0)}{2\hbar}\right] \xrightarrow{t\to\infty} \frac{\pi(t-t_0)}{2\hbar}\delta(E_n - E_i)$$

$$\approx |V_{ni}|^2_{n\approx i}\, 4 \int dE_n\, \rho(E_n) \frac{\pi(t-t_0)}{2\hbar} \delta(E_n - E_i)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2_{n\approx i}\, \rho(E_n)\Big|_{n\approx i} (t-t_0)$$



Transition rate :

$$\frac{d}{dt} P_{trans.}(t) = \frac{d}{dt}\left[\sum_n |c_n^{(1)}|^2\right]$$

es una constante :

$$W_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|V_{ni}|^2}_{n\approx i}\, \rho(E_n)_{E_n\approx E_i}$$

Regla de oro de Fermi

o

$$\int dE_n\, \rho(E_n)\, W_{i\to n} = \int dE_n\, \rho(E_n) \underbrace{\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) |V_{ni}|^2\, \delta(E_n - E_i)}_{W_{i\to n}}$$

A segundo orden se obtienen "transiciones virtuales"

Perturbación armónica

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

Se enciende a $t_0 = 0$ $\qquad v^{\dagger}_{ni} = (v^{\dagger})_{ni}$

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \left(v_{ni}\, e^{i\omega t'} + v^{\dagger}_{ni}\, e^{-i\omega t'} \right) e^{i\omega_{ni} t'}\, dt'$$

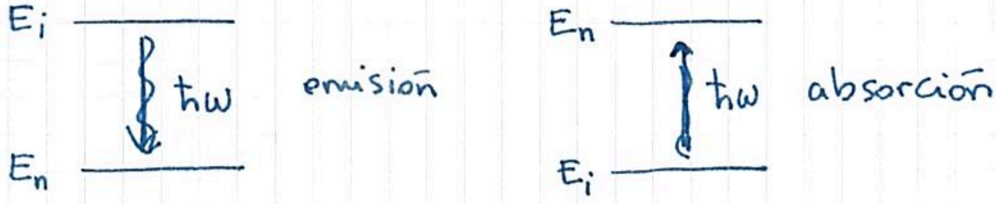
$$= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{\omega + \omega_{ni}}\, v_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{-\omega + \omega_{ni}}\, v^{\dagger}_{ni} \right]$$

Similar a pert. const. pero $\omega_{ni} = \dfrac{E_n - E_i}{\hbar} \longrightarrow \omega_{ni} \pm \omega$

Hay transiciones con $t \to \infty$ si:

$\omega_{ni} + \omega \simeq 0 \Rightarrow E_n \simeq E_i - \hbar\omega$ emisión estimulada

$\omega_{ni} - \omega \simeq 0 \Rightarrow E_n \simeq E_i + \hbar\omega$ absorción



Ahora se obtiene:

$$w_{i \to n} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{ni}|^2\, \delta(E_n - E_i + \hbar\omega) \quad \text{emisión}$$

$$w_{i \to n} = \frac{2\pi}{\hbar} |v^{\dagger}_{ni}|^2\, \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad \text{absorción}$$