

Ejercicio 3 Guía 7

Autor: Vladimir D. Rodríguez Chariarse

1. Breve introducción teórica

Recordemos brevemente el formalismo de Hamilton-Jacobi. Es una transformación canónica cuya función generatriz es $S(q, P, t)$ que lleva a un nuevo Hamiltoniano $K = 0$, por consiguiente

$$K = H\left(q, \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial q}\right) + \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

Esta ecuación en derivadas parciales se resuelve usualmente por el método de separación de variables. Como $K = 0$ los nuevos momentos α y nuevas coordenadas β son constantes. Finalmente se vuelve a las coordenadas y momentos originales usando las ecuaciones de transformación (tipo F_2 en este ejemplo):

$$p = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q} \quad \beta = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha} \quad (2)$$

Vamos a explorar un problema que nos ayudará con el problema 3.

1.1. Partícula libre

En este caso la ecuación de H-J es:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

Vemos que todas las coordenadas y el tiempo son cíclicos. Usemos las separación en las coordenadas proponiendo:

$$S(q, P, t) = \alpha_x x + \alpha_y y + \alpha_z z + \xi(t) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r} + \xi(t) \quad (4)$$

reemplazando en (3) obtenemos que:

$$\dot{\xi}(t) = \frac{1}{2m} \alpha^2 \quad \Rightarrow \quad \xi(t) = \frac{1}{2m} \alpha^2 t \quad (5)$$

donde α^2 es el cuadrado del vector $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$. Las constantes de separación α_i son los momentos lineales conservados en cada dirección. En este caso la energía $E = \frac{1}{2m} \alpha^2$, no se usa como constante de separación. Dejamos al alumno que termine de obtener la solución de la partícula libre en coordenadas originales.

1.2. Partícula de carga q en campo $\mathbf{E}(t)$ uniforme

En este caso la ecuación de H-J es:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] - q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (6)$$

Vemos que ahora en general, ni las coordenadas ni el tiempo son cíclicos. Usaremos nuestra experiencia con la partícula libre para proponer:

$$S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}, t) = \left(\boldsymbol{\alpha} + q \int_{t_0}^t \mathbf{E}(t') dt' \right) \cdot \mathbf{r} + \xi(t). \quad (7)$$

Lo que hemos hecho es usar nuestro conocimiento: el momento cuyo valor inicial es $\boldsymbol{\alpha}$ cambia con el tiempo en presencia de un campo $\mathbf{E}(t)$:

$$\mathbf{p}(t) = \boldsymbol{\alpha} + q \int_{t_0}^t \mathbf{E}(t') dt' = \boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t) \quad \text{con} \quad \mathbf{A}(t) = - \int_{t_0}^t \mathbf{E}(t') dt' \quad (8)$$

reemplazando (7) en (6), usando $\mathbf{A}(t)$ obtenemos que:

$$\dot{\xi}(t) = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t))^2 \quad \Rightarrow \quad \xi(t) = \frac{1}{2m} \int_{t_0}^t (\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t'))^2 dt' \quad (9)$$

donde α^2 es el cuadrado del vector $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$. Las constantes de separación α_i son los momentos lineales iniciales en cada dirección. La función generatriz que es la función principal de Hamilton queda:

$$S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}, t) = \left(\boldsymbol{\alpha} + q \int_{t_0}^t \mathbf{E}(t') dt' \right) \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2m} \int_{t_0}^t (\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t'))^2 dt'. \quad (10)$$

Ahora vamos a usar (10) para resolver el problema original. De la ecuación de momentos en (2):

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(t_0) - q\mathbf{A}(t, t_0) \quad \mathbf{A}(t, t_0) = - \int_{t_0}^t \mathbf{E}(t') dt' \quad (11)$$

donde se evaluó en $t = t_0$ para obtener $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{p}(t_0)$.

De la ecuación de coordenadas en (2):

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{r} - \frac{1}{m} \int_{t_0}^t (\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t')) dt' \quad (12)$$

donde se evaluó en $t = t_0$ para obtener $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{r}(t_0)$.

Finalmente la solución en función de las condiciones iniciales es:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}(t_0) + \frac{1}{m} \int_{t_0}^t (\mathbf{p}(0) - q\mathbf{A}(t', t_0)) dt' \\ \mathbf{p}(t) &= \mathbf{p}(t_0) - q\mathbf{A}(t, t_0) \\ \mathbf{A}(t, t_0) &= - \int_{t_0}^t \mathbf{E}(t') dt' \end{aligned} \quad (13)$$

1.3. Electrón en campo láser $\mathbf{E}(t) = E_0 \cos(\omega t)\hat{z}$

Si la longitud de onda de un láser es grande con respecto a las dimensiones atómicas se usa la aproximación dipolar para el campo eléctrico $\mathbf{E}(t) = E_0 \cos(\omega t)\hat{z}$. Si el láser es intenso, al actuar sobre un átomo dado, el electrón con menor potencial de ionización es ionizado. Consideremos el caso en el cual el electrón se libera del núcleo en el origen de coordenadas con velocidad inicial nula. La evolución no trivial se da en la dirección de polarización del láser (\hat{z}). Usando lo obtenido tenemos:

$$A_z(t) = - \int_{t_0}^t E_0 \cos(\omega t') dt' = - \frac{E_0}{\omega} (\sin(\omega t) - \sin(\omega t_0))$$

de donde

$$\begin{aligned} z(t) &= \frac{qE_0}{\omega} \int_{t_0}^t (\sin(\omega t') - \sin(\omega t_0)) dt' \\ &= \frac{qE_0}{(t - t_0)\omega} \left[-\sin(\omega t_0) - \frac{(\cos(\omega t) - \cos(\omega t_0))}{\omega t - \omega t_0} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

nos interesa los casos en que el electrón vuelve al origen (recolisiona con el núcleo) en un $t = t_r$, entonces $z(t_r) = 0$ por lo que necesitamos cumplir:

$$\frac{d}{d\omega t} E(\omega t)|_{t_0} = -\sin(\omega t_0) = \frac{E(\omega t_r) - E(\omega t_0)}{\omega t - \omega t_0}$$

La solución gráfica de esta ecuación se obtiene cuando la recta tangente a $E(\omega t)$ en $t = t_0$ intercepta $E(\omega t)$ en algún(os) t_r , como se muestra en la figura.

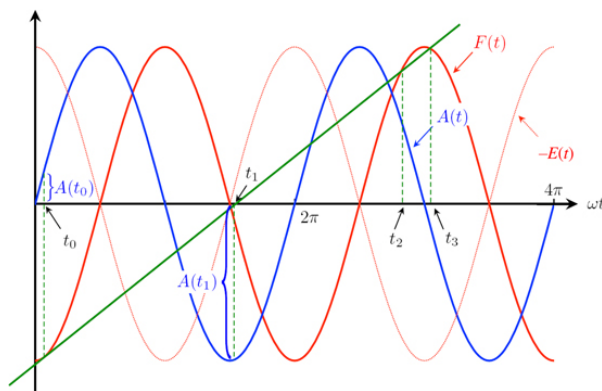


Figura 1: Método gráfico: se traza una tangente (verde) a $F(t)$ en $t = t_0$. El instante en el que se cruza con $F(t)$ define el (primer) tiempo de recolisión t_1 . Dependiendo del valor de t_0 , puede ocurrir más de una recolisión. En el ejemplo dado, hay dos intersecciones adicionales en $t = t_2$ y $t = t_3$. Observe que, en el ejemplo, el valor de t_0 está justo después de un máximo de $-E(t)$, de modo que t_1 está muy cerca de (pero no es idéntico) $3\pi/2$.

Este caso sirve para entender los experimentos de generación radiación de altos armónicos cuando se aplica un láser infrarrojo sobre gases nobles (frecuencias de radiación emitidas $\omega_N = N\omega$, $N \sim 10^2 - 10^3$). El modelo usado se denomina de tres pasos (*simple-man model*) consiste en plantear que un electrón escapa del núcleo por efecto túnel inicialmente con velocidades cercanas a cero cuando el campo está cerca al máximo, luego el electrón evoluciona básicamente en el campo del láser, finalmente la mitad de los electrones vuelven a las cercanías del núcleo. Se puede calcular que hay algunos que vuelven con una máxima energía de $3,1 U_p$. La energía ponderomotriz U_p es la energía media adquirida por el electrón en el campo del láser. Finalmente se pueden producir varios fenómenos, todos ellos medidos y observados experimentalmente:

1. Que el electrón que vuelve, interactúa con el núcleo y pierde su energía en forma de radiación emitiendo fotones con frecuencia $N\omega$, con N grande, proceso llamado HHG (*High Harmonic Generation*). El modelo se valida pues de usarse láser circularmente polarizado, el proceso de HHG decae exponencialmente, en contraste con el suave comportamiento (*plateau*) medido con la polarización lineal. También, el *plateau* se centra en energías alrededor de valor predicho.
2. Puede ser que al volver el electrón choque de frente con el núcleo y se produzca la retro dispersión elástica (backscattering) proceso en el cual el electrón se ioniza con altas energías del orden de $10 U_p$ (*high-order above threshold ionization HATI*).
3. Podría también suceder que el electrón que vuelve interactúa con otro electrón del átomo y le transmite energía suficiente para ionizarlo, quedando dos electrones ionizados, proceso denominado doble ionización secuencial. También observado experimentalmente.

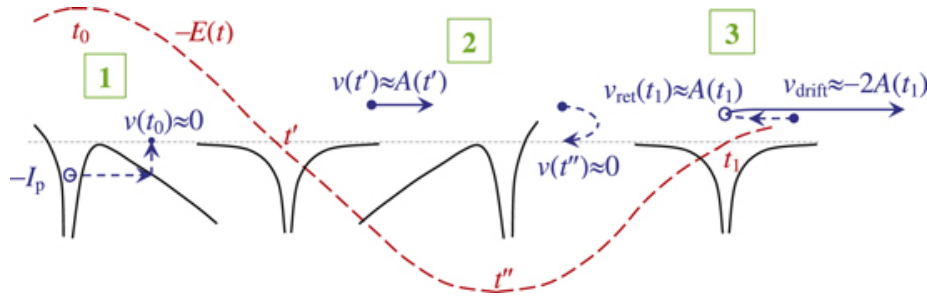


Figura 2: Esquema gráfico del modelo de tres pasos. La evolución temporal de un campo láser polarizado linealmente $E(t)$ está representada por la línea roja de trazos largos, el potencial combinado de átomo + campo láser, se representa en negro, mientras que el electrón y su velocidad están en azul

Estos descubrimientos han abierto la puerta a la llamada física del atosegundo ($10^{-18}s$), que permitirá seguir y manipular la dinámica del electrón, a diferencia de la física del femtosegundo ($10^{-15}s$) por la cual se otorgó el premio Nobel de 1999 al profesor de Caltech Ahmed H. Zewail, que permite seguir y manipular la dinámica del átomo en las reacciones químicas. El premio Nobel de 2018 fue para los que permitieron obtener pulsos láser de duración femtosegundo, que son usados para generar los actuales pulsos láser de duración del orden de atosegundos (el tiempo característico del electrón en el átomo es de este orden). Les dejo la referencia a los interesados <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6455/aad150/pdf>.

1.4. Caso cuántico: $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(iS/\hbar)$

Es interesante ver que $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(iS/\hbar)$, con la acción S obtenida de la ecuación de Hamilton-Jacobi, resuelve en forma exacta el problema cuántico de un electrón en un campo eléctrico uniforme dependiente del tiempo. Para ello basta con reemplazar en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}\right)\Psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

procediendo con cuidado:

$$\begin{aligned}\nabla(\exp(iS/\hbar)) &= \frac{i}{\hbar}\nabla S \exp(iS/\hbar) \\ \nabla^2 \exp(iS/\hbar) &= \nabla\left(\frac{i}{\hbar}\nabla S \exp(iS/\hbar)\right) = \left(\frac{i}{\hbar}\right)\nabla^2 S \exp(iS/\hbar) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \nabla S \cdot \nabla S \exp(iS/\hbar) \\ \frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial S}{\partial t} \exp(iS/\hbar)\end{aligned}$$

si S fuera lineal en la coordenada entonces se anularía su Laplaciano, $\nabla^2 S = 0$, por lo que reemplazando en la ecuación de Schrödinger y cancelando las fases comunes obtenemos

$$\frac{1}{2m}\nabla S \cdot \nabla S - q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

por lo que S satisface la ecuación de Hamilton Jacobi ya resuelta. La solución es lineal en la coordenada, por lo que la solución exacta del problema cuántico es:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\left(\boldsymbol{\alpha} + q\int_{t_0}^t \mathbf{E}(t')dt'\right) \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2m}\int_{t_0}^t (\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t'))^2 dt'\right]\right\}$$