

Ejercicios 4 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 $S(q, P, t)$ lleva a un Hamiltoniano $K = 0$, por consiguiente obedece la ecuación:

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

Esta ecuación en derivadas parciales se resuelve usualmente por el método de separación de variables. Como $K = 0$ los nuevos momentos P y nuevas coordenadas Q son constantes pues son cíclicos. La solución general del problema depende de n constantes α_i que se toman como los nuevos momentos $P_i = \alpha_i$. Las nuevas coordenadas constantes se las denomina $Q_i = \beta_i$. Finalmente se vuelve a las coordenadas y momentos originales usando las ecuaciones de transformación (tipo F_2 en este ejemplo):

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

Vamos a explorar un problema que nos ayudará con el problema 4.

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:

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

reemplazando en (2) obtenemos que:

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

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:

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

donde se usó que el potencial de la partícula de carga q en un campo uniforme $\mathbf{E}(t)$ es $V = -q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}$. Vemos que ahora ni las coordenadas ni el tiempo son cíclicos. Usaremos nuestra experiencia con la partícula libre para proponer el *ansatz*:

$$S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}, t) = \boldsymbol{\gamma}(t) \cdot \mathbf{r} + \phi(t), \quad (7)$$

lo que hemos hecho es usar que el momento cambia con el tiempo en presencia de un campo $\mathbf{E}(t)$. Usando la primera ecuación de transformación

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

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

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

donde α^2 es el cuadrado del vector $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$. Tomamos a las constantes de separación α_i como los nuevos momentos $P_i = \alpha_i$ son los momentos lineales iniciales en cada dirección.

La función generatriz, que se denomina función principal de Hamilton queda:

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

Ahora vamos a usar (7) para resolver el problema original. De la ecuación de momentos:

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

evaluando en $t = t_0$ obtenemos $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{p}(t_0)$.

De la ecuación de coordenadas:

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

evaluando en $t = t_0$ se obtiene que: $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{r}(t_0)$.

Finalmente la solución en función de las condiciones iniciales es:

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

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(t_0) - q\mathbf{A}(t, t_0) \quad (14)$$

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

Si la longitud de onda del láser es grande con respecto a las dimensiones atómicas se usa la aproximación dipolar para el campo eléctrico del láser $\mathbf{E}(t) = E_0 \cos(\omega t)\hat{z}$. 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 al tiempo $t = t_0$. La evolución no trivial se da en la dirección de polarización del láser (z). Usando lo obtenido tenemos:

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

. Usando $z(t_0) = 0$ y $p_z(t_0) = \alpha_z = 0$:

$$z(t) = \frac{qE_0}{\omega} \int_{t_0}^t (\sin(\omega t') - \sin(\omega t_0)) dt' \quad (15)$$

$$= \frac{q(t - t_0)}{\omega} \left[-E_0 \sin(\omega t_0) - E_0 \frac{(\cos(\omega t) - \cos(\omega t_0))}{\omega t - \omega t_0} \right] \quad (16)$$

nos interesa los casos en que el electrón vuelve al origen (recolisiona con el átomo) a un tiempo $t = t_r$, entonces $z(t_r) = 0$, por lo que, usando (16) necesitamos cumplir:

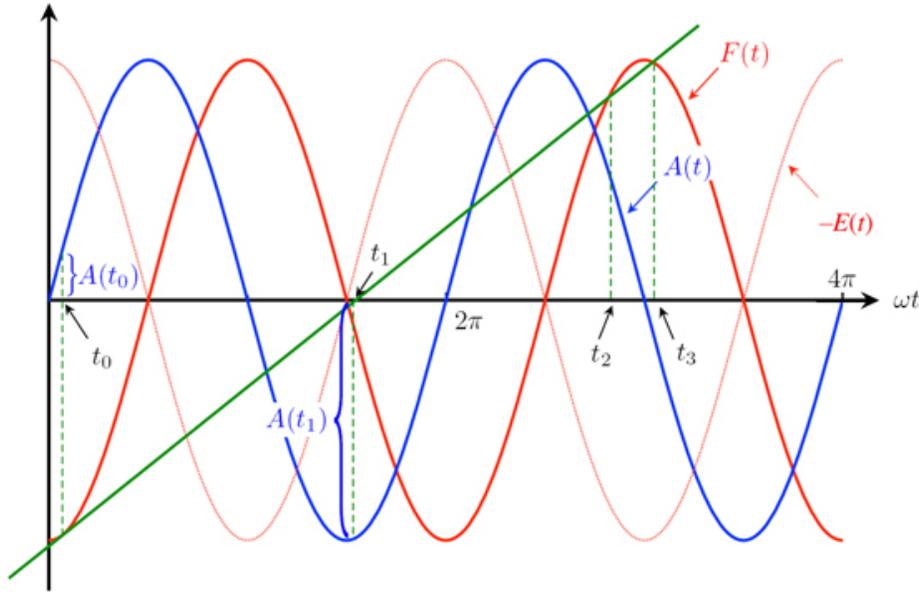
$$\frac{d}{d\omega t} E(\omega t)|_{t_0} = \frac{E(\omega t_r) - E(\omega t_0)}{\omega t_r - \omega t_0}$$

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) ωt_r , como se muestra en la figura 1.

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 $\omega_N \sim N\omega$, $N \sim 10^2 - 10^3$. El modelo usado se denomina de tres pasos (simple-man model) consiste en plantear que un electrón escapa del átomo 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 átomo (ver figura 2). Se puede calcular que la máxima energía con que se vuelve es 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 $\omega_N = N\omega$, 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.

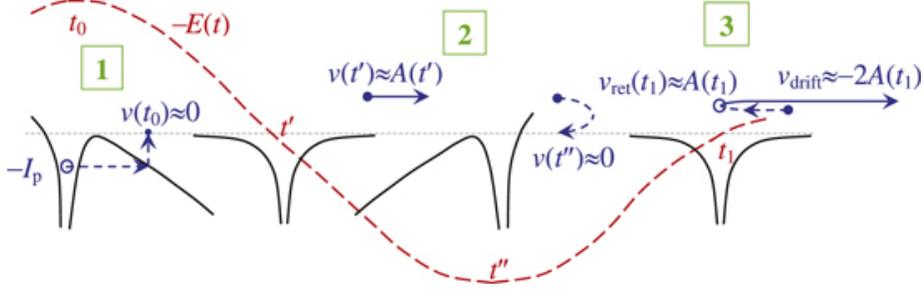
Figura 1: Método gráfico: se traza una tangente (verde) a $F(t)$ en $t = t_0$. El instante en el que se cruza con $F(t)$ define el (primer) tiempo de recolisión t_1 . Dependiendo del valor de t_0 , puede ocurrir más de una recolisión. En el ejemplo dado, hay dos intersecciones adicionales en $t = t_2$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



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 que le transmita energía suficiente para ionizarlo, quedando dos electrones ionizados, proceso denominado doble ionización secuencial. También observado experimentalmente.

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 de la evolución del electrón en el átomo es de este orden). Les dejo una referencia a los interesados.

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 del átomo + campo láser, se representa en negro, mientras que el electrón y su velocidad están en azul.



Actualización 2023. El texto de arriba fue escrito el año 2020, hace unas semanas se otorgó el Nobel de Física 2023 a Pierre Agostini, Ferenc Krausz y Anne L'Huillier por sus métodos experimentales para generar pulsos de luz de una duración de attosegundos para el estudio de la dinámica de los electrones en la materia. Se recomienda el video. Para mas información sobre las posibilidades en el área de la salud ver la página de attoworld.de, o en particular pegarle una mirada a la revista.

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

El teorema de Ehrenfest garantiza que los valores medios de magnitudes cuánticas están dadas básicamente por evoluciones clásicas.

Mas allá de esto, se puede buscar lo que se denomina una solución cuasiclásica, a primer orden en la constante de Planck \hbar . Para ello usaremos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}\right)\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (17)$$

proponiendo una solución del tipo $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\{iS/\hbar\}$ procedemos con el cálculo del Laplaciano y de la derivada parcial con respecto al tiempo:

$$\nabla(\exp\{iS/\hbar\}) = \frac{i}{\hbar}(\nabla)\exp\{iS/\hbar\} \quad (18)$$

$$\nabla^2(\exp\{iS/\hbar\}) = \nabla \cdot \left(\frac{i}{\hbar}(\nabla)\exp\{iS/\hbar\}\right) \quad (19)$$

$$= \left(\frac{i}{\hbar}\right)(\nabla^2 S)\exp\{iS/\hbar\} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2(\nabla S) \cdot \left(\frac{i}{\hbar}(\nabla S)\exp\{iS/\hbar\}\right) \quad (20)$$

$$\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)\frac{\partial S}{\partial t}\exp\{iS/\hbar\} \quad (21)$$

usando estas expresiones en la ecuación de Schrödinger cancelando factores comunes no nulos obtenemos:

$$\frac{1}{2m} \nabla S^2 - q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} + \frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar \nabla^2 S = 0 \quad (22)$$

Esta ecuación da una fase real S si consideramos el caso cuasiclásico, en el cual $\hbar \rightarrow 0$, por lo que la función de onda en esta aproximación es la ecuación de Hamilton Jacobi para la fase S_{sc} :

$$\frac{1}{2m} \nabla S_{sc}^2 - q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} + \frac{\partial S_{sc}}{\partial t} = 0 \quad (23)$$

Esto es consistente con haber cancelado la fase común, pues S_{sc} es real.

Sin embargo para nuestro problema, el valor obtenido para S satisface la ecuación de Hamilton Jacobi y es lineal en r por lo que su Laplaciano se anula y no necesitamos invocar a la aproximación cuasiclásica.

Por consiguiente $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\{iS/\hbar\}$ con S dado por la ecuación (2) es **solución exacta** de la ecuación de Schrödinger (17).

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{i\left[\frac{\mathbf{a}}{\hbar}(\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t)) \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2m} \int^t (\boldsymbol{\alpha} - q\mathbf{A}(t'))^2 dt'\right]\right\} \quad (24)$$

Notemos que soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se cuentan con los dedos de una mano. Esta solución se denomina función de onda de Volkov. Y se obtiene en un curso de Mecánica Clásica.