Mecánica Cuántica II

Prof. Aníbal Iucci
JTP Alejo Costa

Práctica 1: Potenciales dependientes del tiempo

Año 2024

1. **Sistema de dos estados.** Considere un sistema de dos estados con energías $E_\pm$ y un potencial de interacción $V(t)$, dependiente del tiempo, cuyos elementos no nulos están dados por

$$\langle +|\, V\, |-\rangle = \langle -|\, V\, |+\rangle^* = \frac{\gamma}{2} e^{-i\omega t}$$

con $\gamma, \omega \in \mathbb{R}$.

   a) Calcule la probabilidad de encontrar al sistema en cada uno de los estados $|\pm\rangle$ como función del tiempo, resolviendo en forma exacta la ecuación de Schrödinger, tomando como condición inicial que el sistema se encuentra en el nivel de energía más baja para $t = 0$. Calcule el valor medio de la energía en función del tiempo.

   b) Resuelva el mismo problema utilizando teoría de perturbaciones para γ pequeño (¿Respecto a qué?). Calcule la frecuencia de resonancia y el período de las transiciones.

   c) Compare los resultados anteriores para γ pequeño. Analice los casos de ω muy distinto y muy cercano a $\omega_0 = \frac{E_+ - E_-}{\hbar}$.

   d) Determine los autoestados del Hamiltoniano $H(t)$ y muestre que no satisfacen la ecuación de evolución temporal.

   e) Utilice los resultados de este ejercicio para describir el comportamiento del spin $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ en un sistema de spin 1/2 sometido a un campo magnético de la forma

$$\boldsymbol{B} = (B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), B_0)$$

   Recuerde que la interacción del spin con el campo es $-\mu \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B}$, siendo $\mu = \frac{e}{m_e c}$ para una partícula de spin 1/2 y $\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, con $e < 0$ la carga del electrón. Identifique E_+, E_- y γ. Si el sistema se encuentra inicialmente en el estado con $m_s = -1/2$, indique para qué valores de ω y t la probabilidad de inversión de spin es 1.

2. Considere un oscilador armónico de frecuencia ω y masa m, que se encuentra en su estado fundamental para $t = -\infty$

   a) Si a $t = 0$ se introduce una perturbación de la forma

$$V(t) = -F_0 x e^{-t/\tau}, \qquad t > 0,$$

   calcule a primer orden en teoría de perturbaciones la probabilidad de encontrarlo en el estado excitado $|n\rangle$ como función del tiempo. Analice el limite $t \to \infty$.

   b) Realice lo mismo para la perturbación

$$V(t) = A \frac{e^{-t^2/\tau^2}}{\tau\sqrt{\pi}} x,$$

   (en este caso $-\infty < t < \infty$) donde A y τ indican la intensidad total y duración del pulso. En este caso analice unicamente el límite $t \to \infty$, no encuentre la dependencia temporal explícita. Estudie el comportamiento para $\tau \gg \omega^{-1}$ y para $\tau \ll \omega^{-1}$. Analice el rango de validez del tratamiento perturbativo.

   c) **OPCIONAL:** La probabilidad de transición de este último ejercicio puede encontrarse de manera exacta. Muestre que tiene la forma

$$P_{0\to n} = \frac{K^{2n} e^{-K^2}}{n!}$$

   con $K = \frac{A e^{-\omega^2\tau^2/4}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$.
   Ayuda: Trabaje en el esquema de interacción y encuentre la ecuación de Schrödinger

$$i\partial_t |\psi_I(t)\rangle = H_I |\psi_I(t)\rangle \,, \quad H_I = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{Ae^{(-t/\tau)^2}}{\sqrt{\pi}\tau} \left(e^{-i\omega t}a + e^{i\omega t}a^\dagger\right)$$

Para esto puede utilizar la formula de Baker-Campbell-Hausdorff o demostrar por inducción que $aN^n = (N+1)^n a$ y $a^\dagger N^n = (N-1)^n a^\dagger$. Luego haga el ansatz $|\psi_I(t)\rangle = e^{-iK(t)a^\dagger} |\psi(t)\rangle$ eligiendo $K(t)$ adecuadamente para eliminar $a^\dagger$ de la ecuación de Schrödinger.

3. Muestre que el operador de evolución temporal para un hamiltoniano dependiente del tiempo puede expresarse como

$$U(t,t_0) = \hat{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right]$$

donde $\hat{T}$ es el operador de ordenamiento temporal. Muestre que si $H(t) = H_0 + V(t)$, con H_0 independiente del tiempo, entonces

$$U(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_0 t\right] \hat{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' V_I(t')\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}H_0 t_0\right]$$

donde $V_I(t)$ es el potencial en el esquema de interacción.

4. Considere una partícula moviéndose bajo la influencia de algún potencial independiente del tiempo, con autofunciones y autovalores conocidos. Ahora, se sujeta a la partícula a un potencial dependiente del tiempo de la forma

$$V(t) = A\delta(x - ct)$$

   a) Suponga que a $t = -\infty$ la partícula está en el estado fundamental cuya función de onda es $\langle \boldsymbol{x}|i\rangle = u_i(\boldsymbol{x})$. Obtenga la probabilidad de encontrar al sistema en algún estado excitado $\langle \boldsymbol{x}|f\rangle = u_f(\boldsymbol{x})$ a tiempo $t = \infty$, calculando el primer orden de la expansión perturbativa del operador de evolución temporal.

   b) Interprete estos resultados fisicamente recordando la representación de la delta de Dirac como una superposición de funciones armónicas

$$\delta(x - ct) = \frac{1}{2\pi c}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(x/c - t)}$$

5. Calcule la probabilidad de que un electrón ligado a un átomo sufra una transición a otro estado estacionario debido al paso de un ión pesado. Suponga que el ión se mueve con velocidad constante v y que la distancia mínima al átomo es D; además, considere que tanto el núcleo del átomo como el ión no son afectados por la interacción. Resuelva utilizando un desarrollo en serie de potencias de x, y, z para el potencial de interacción ¿Por qué tiene sentido hacer este desarrollo? Discuta los casos límites de la relación entre v, D y la energía de la transición.

6. **Teorema adiabático y fase de Berry**

   a) Considere un hamiltoniano $H(t)$ con autoestados instantáneos $|n(t)\rangle$ y correspondientes autoenergías $E(t)$. Demuestre que si $E_m(t) \neq E_n(t)\ \forall\ t$ y todo par m, n, y $|\dot{H}(t)_{mn}| \ll |E_m(t) - E_n(t)|$ un sistema cuántico evoluciona de un estado inicial

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |n(0)\rangle$$

   a un estado final

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

   donde los coeficientes sufrieron el cambio de fase

$$c_n(t) = c_n(0) e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)}$$

   con $\theta_n(t) = \frac{-1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'$ y $\gamma_n(t) = i\int_0^t \langle m(t')|\, \dot{m}(t')\rangle\, dt'$.

   b) Considere un electrón bajo la acción de un campo magnético $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{r}(t)$, donde $\boldsymbol{r}(t)$ traza lentamente un camino cerrado $\mathcal{C}$ en la esfera unidad en un tiempo T y B está fijo. Calcule la fase acumulada a tiempo T si el estado inicial es autoestado del operador $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}(0)$ con autovalor $\hbar/2$. Lo mismo para el autoestado con autovalor $-\hbar/2$. En líneas generales vimos que las fases en un estado cuántico no tienen un significado físico. Sin embargo, la fase acumulada que calculó en el ejercicio anterior **es** detectable experimentalmente y se denomina **fase de Berry**.

7. Muestre que para un sistema de n partículas cargadas el operador densidad de carga puede expresarse como

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{n} q_i \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)$$

donde $\boldsymbol{r}$ es una coordenada (una variable clásica, no es un operador) y $\boldsymbol{r}_i$ son los operadores posición de las n partículas.

8. **Absorción y emisión estimulada** Considere un átomo de hidrógeno con hamiltoniano

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}|}$$

donde los autoestados están dados por $|a\rangle = |n, l, m, m_s\rangle$. Si interactúa con una onda electromagnética monocromática de frecuencia ω podemos escribir (en el gauge de Coulomb que tiene $\nabla \boldsymbol{A} = 0$)

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) = 2A_0 \cos(\omega/c\hat{n} \cdot \boldsymbol{x} - \omega t)\hat{\epsilon} \qquad \wedge \qquad \phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{t} = 0)$$

donde ϵ y $\hat{n}$ son la polarización y dirección de propagación. El hamiltoniano con esta interacción es

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{p} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)^2\right)}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\boldsymbol{r}|}$$

ignorando la interacción del spin del electrón con el campo magnético y omitiendo también el término proporcional a $|\boldsymbol{A}|^2$. Considere la parte del potencial responsable por la absorción estimulada (el término con $e^{-i\omega t}$) y calcule la probabilidad de transición de un estado inicial $|i\rangle$ a un estado final $|f\rangle$. Encuentre las reglas de selección para transición de un estado ligado inicial a un estado ligado final dentro de la aproximación dipolar. Esta aproximación consiste en aproximar la exponencial $e^{i(\omega/c)\hat{n}\boldsymbol{r}}$ por el término dominante. ¿Cuándo es valida esta aproximación?

Calcule la sección eficaz de absorción como $\frac{\textit{Energía por unidad de tiempo absorbida por el átomo}}{\textit{Flujo de energía del campo electromagnético}}$.

9. **Efecto fotoeléctrico** Consideremos la transición de el estado fundamental del átomo de hidrógeno a un estado del continuo con $E > 0$ debido a la interacción con una onda electromagnética como la del ejercicio anterior. Calcule la sección eficaz diferencial de emisión.

10. **Respuesta lineal** Volvamos al problema 2. Calcule la función respuesta para el oscilador, y el valor medio de la posición como función del tiempo al perturbar con el potencial del inciso a).