Mecánica Cuántica II

Prof. Fidel Schaposnik
JTP Aníbal Iucci

Práctica 4

Año 2014

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

$$\langle E_-|V|E_+\rangle = \langle E_+|V|E_-\rangle^* = \frac{\gamma}{2} \cdot e^{i\omega t} \qquad \gamma, \omega \in \mathbb{R}$$

   a) Calcule la probabilidad de encontrar al sistema en cada uno de los estados en función del tiempo, resolviendo en forma exacta la ecuación de Schrödinger. Calcule el valor medio de la energía en función del tiempo.

   b) Resuelva el mismo problema utilizando teoría de perturbaciones para γ pequeño. Calcule la frecuencia de resonancia, el período de las transiciones y derive la regla de oro de Fermi.

   c) Compare los resultados anteriores para γ pequeño (¿respecto de qué?). Analice los casos de ω muy distinto y muy cercano a $\omega_0 = (E_+ - E_-)/\hbar$.

   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

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

   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 (resonancia magnética).

2. **El máser de amoníaco**

   a) Considere la molécula NH_3 como un sistema de dos estados $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ de acuerdo con la posición del átomo de nitrógeno con respecto al plano formado por los tres átomos de hidrógeno. Escriba un Hamiltoniano H para este sistema teniendo en cuenta que el átomo de N tiene cierta probabilidad de pasar de uno de estos estados al otro. Calcule los dos estados estacionarios y sus energías E_+, E_-. Suponga que el átomo de N se encuentra inicialmente en el estado $|1\rangle$ y calcule su evolución temporal y la energía media de la molécula como función del tiempo.

   b) Considere ahora que, debido a la distribución de los electrones de los átomos de H en relación con el átomo de N, la molécula tiene un momento dipolar eléctrico $\boldsymbol{\mu}$. Agregue un término al Hamiltoniano correspondiente a la interacción de esta molécula polar con un campo eléctrico $\boldsymbol{\mathcal{E}}$. Estudie las energías y los estados estacionarios en presencia de un campo eléctrico constante. Describa qué sucede si un haz de moléculas de NH_3 atraviesa una región con un gradiente de campo eléctrico.

   c) Suponga ahora que una molécula de NH_3 en el estado $|E_+\rangle$ atraviesa una cavidad resonante con un campo eléctrico oscilatorio de la forma

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = \boldsymbol{\mathcal{E}}_0 \cos(\omega(t - t_0))$$

   donde $\omega \simeq E_+ - E_-$. Calcule la probabilidad de transición al estado $|E_-\rangle$ en función del tiempo. Utilice estos resultados para describir uno de los principios de la construcción de un láser en la región de microondas.

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

   a) Si a $t = 0$ se introduce una perturbación de la forma
   $$V(t) = F_0 x e^{-t/\tau}, \quad t > 0,$$
   calcule en primer orden de teoría de perturbaciones la probabilidad de encontrarlo en el estado excitado $|n\rangle$ en función del tiempo. Analice el límite $t \to \infty$.

   b) Idem para la perturbación
   $$V(t) = \frac{Ax}{\sqrt{\pi}\tau} e^{-(t/\tau)^2},$$
   (en este caso $-\infty < t < \infty$) donde A y τ indican la intensidad total y duración del pulso. Calcule la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|n\rangle$ para $t \to \infty$. Estudie el comportamiento para $\tau \gg \omega$ (límite adiabático) y $\tau \ll \omega$ (nótese que $V(t) \to Ax\delta(t)$ para $\tau \to 0$). Analice el rango de validez del tratamiento perturbativo.

4. Un átomo de hidrógeno es colocado en un campo eléctrico homogéneo dependiente del tiempo,
   $$\boldsymbol{E}(t) = \frac{A\tau/\pi}{t^2 + \tau^2}\boldsymbol{n}_z.$$
   Si a $t = -\infty$ el átomo se encuentra en el estado fundamental $(n, l, m) = (1, 0, 0)$, encuentre en primer orden de teoría de perturbaciones, la probabilidad de hallarlo en cada uno de los estados $2p$, es decir $(n, l, m) = (2, 1, \pm 1 \,\text{o}\, 0)$, para $t = +\infty$.

5. Calcule la probabilidad de que un electrón en un átomo sufra una transición entre dos estados estacionarios debido al paso de un ión pesado con velocidad v a una distancia D del átomo (suponga que tanto el núcleo del átomo como el ión no son afectados por la interacción). Discuta los casos límites de la relación entre v, D y la energía de la transición.

6. 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
   $$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_0 t\right] \hat{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_I(t')\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}H_0 t\right],$$
   donde $V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$ (representación de interacción).

7. Considere un sistema descripto por un Hamiltoniano H_0, sometido a una perturbación $V(t) = g(t)O$ donde $g(t)$ es una función del tiempo y O es un operador.

   a) Si a $t = 0$ el sistema se encuentra en un autoestado $|0\rangle$ de H_0, muestre que a primer orden en teoría de perturbaciones, el valor medio de un observable Q (que no depende explícitamente del tiempo) al tiempo $t > 0$ es
   $$\langle Q\rangle(t) = \langle 0|Q|0\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt' g(t')\chi(t, t')$$
   donde $\chi(t, t')$ es la susceptibilidad
   $$\chi(t, t') = -\frac{i}{\hbar}\theta(t - t')\langle 0|[Q_I(t), O_I(t')]|0\rangle,$$
   y θ es la función de Heaviside.

   b) Calcule el momento dipolar inducido en un oscilador armónico unidimensional por un campo eléctrico uniforme $E(t) = E_0 \cos\omega t$, $t > 0$.

   c) Idem para $E(t) = E_0 e^{\eta t} \cos\omega t$, $t > -\infty$. Estudie el límite $\eta \to 0$.