

Estructura de la materia 3

TEMA 13. REPASO. SEGUNDA CUANTIFICACION

J. E. Miraglia

*Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas
y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.*

(Dated: February 29, 2016)

Abstract

Revisión del campo de radiación Campos eléctricos y magnéticos.

Segunda cuantificación . Operadores de creación y destrucción. El Hamiltoniano. Generalizaciones Aproximación dipolar. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. La regla de Oro de Fermi. Equivalencias. Cambio de notación. Formas alternativas de la longitud y aceleración en la aproximación dipolar

Procesos que veremos. Hoja de ruta

MATERIAL ADICIONAL

Time dependent Schrödinger equation (TDSE)

APENDICE I. La regla de oro de Fermi. Otra vez

APENDICE II. Otra forma alternativa en la aproximación dipolar: la fuerza

Falta Habría que reducir. Dibujos , espanol y bibliografía. Hubiese sido mejor llamar A_0 en lugar de A_1 , para indicar que hay 0 fotón en el habitat. Hay que cambiar tambien la nota 10. hacer un TDSE mas general que contenga Fermi y decaimientos para tratar decaimiento radiativo y Auger

PACS numbers:

A. Revisión del campo de radiación

Como lo hemos hecho en campos clásicos, los potenciales vectores se proponen ahora (recordemos que estamos lejos de las fuentes)

$$\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) + \vec{A}_{\lambda\vec{k}}^*(\vec{r}, t), \quad (1)$$

$$\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = A_1 \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + i\delta_\omega) \overbrace{a_{\lambda\vec{k}}}^{\text{nuevo!}}, \quad (2)$$

$$\vec{A}_{\lambda\vec{k}}^*(\vec{r}, t) = A_1^* \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega t - i\delta_\omega) \overbrace{a_{\lambda\vec{k}}^*}^{\text{nuevo!}}, \quad (3)$$

$$\omega = kc, \quad (4)$$

$$\hat{\varepsilon}_{1\vec{k}} \cdot \hat{k} = \hat{\varepsilon}_{2\vec{k}} \cdot \hat{k} = \hat{\varepsilon}_{1\vec{k}} \cdot \hat{\varepsilon}_{2\vec{k}} = 0, \quad (5)$$

$$A_1 = A_1(\omega) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega V}} = A_{N=1}(\omega) \quad (6)$$

$$V = \text{volumen de la caja de cuantificación} \quad (7)$$

Que resulta exactamente igual pero que ahora introducimos las cantidades (no operadores todavía!, pero lo serán) de destrucción ($a_{\lambda\vec{k}}$) y creación ($a_{\lambda\vec{k}}^*$). Hemos mantenido la misma notación que en campos clásicos. Algunos libros incorporan también el tiempo así: $a_{\lambda\vec{k}}(t) \rightarrow a_{\lambda\vec{k}} \exp(i\omega t)$ y $a_{\lambda\vec{k}}^*(t) \rightarrow \exp(-i\omega t)a_{\lambda\vec{k}}^*$ y lo sacan de $\vec{A}_{\lambda\vec{k}}$, con lo que queda independiente del tiempo. La razón por la cual usamos solamente A_1 será evidente luego. Algo más mantendremos la fase δ_ω , hasta el final aunque aquí no tendrá ningún rol. Recordemos que c es la velocidad de la luz, \vec{k} la dirección (momento) de propagación, $\omega = 2\pi\nu$, ν es la frecuencia de modo tal que la energía del fotón es

$$E = \hbar\omega = \hbar ck = h\nu, \quad (8)$$

y $\hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}$ es el versor de polarización, o los correspondientes a la direcciones del campo eléctrico y magnético. Es mejor usar los versores $\hat{\varepsilon}_\pm$ (en este caso $\lambda = \pm$)

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\varepsilon}_+ = \hat{\varepsilon}_{Left} = \frac{\hat{\varepsilon}_x + i\hat{\varepsilon}_y}{\sqrt{2}} = -\hat{\varepsilon}_1 = \hat{\varepsilon}_-^* \\ \hat{\varepsilon}_0 = \hat{k} \\ \hat{\varepsilon}_- = \hat{\varepsilon}_{Right} = \frac{\hat{\varepsilon}_x - i\hat{\varepsilon}_y}{\sqrt{2}} = \hat{\varepsilon}_{-1} = \hat{\varepsilon}_+^* \end{array} \right. \quad \text{y las inversas} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\varepsilon}_x = \frac{\hat{\varepsilon}_+ + \hat{\varepsilon}_-}{\sqrt{2}} \\ \hat{k} = \hat{\varepsilon}_0 \\ \hat{\varepsilon}_y = i\frac{\hat{\varepsilon}_+ - \hat{\varepsilon}_-}{\sqrt{2}} \end{array} \right. \quad (9)$$

Pero las propiedades son ahora

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\varepsilon}_\mp^* \cdot \hat{\varepsilon}_\pm = \hat{\varepsilon}_\mp^* \cdot \hat{\varepsilon}_0 = \hat{\varepsilon}_\pm \cdot \hat{\varepsilon}_\pm = 0 \\ \hat{\varepsilon}_\pm^* \cdot \hat{\varepsilon}_\pm = \hat{\varepsilon}_0^* \cdot \hat{\varepsilon}_0 = 1 \\ \hat{\varepsilon}_+ \times \hat{\varepsilon}_- = \hat{\varepsilon}_- \times \hat{\varepsilon}_+ = \hat{\varepsilon}_-^* \times \hat{\varepsilon}_+ = \hat{\varepsilon}_+ \times \hat{\varepsilon}_+ = 0 \end{array} \right. \quad (10)$$

Antes de continuar es importante anticipar que la función

$$1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + i\delta_\omega) = 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}) \exp(-i\omega t) \quad (11)$$

(que llamaremos $1_{\lambda\vec{k}}$ luego) es el estado del fotón, ya que

$$\widehat{p} 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} \right) 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hbar \vec{k} 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) \quad (\text{momento del fotón}), \quad (12)$$

$$\widehat{E} 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hbar\omega 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) \quad (\text{energía del fotón}), \quad (13)$$

$$\hbar \widehat{S}_z \hat{\varepsilon}_\pm = (\pm 1) \hbar \hat{\varepsilon}_\pm. \quad (14)$$

y tiene masa en reposo nula. En términos de $1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t)$, $\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t)$ se lee

$$\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) + \vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}^*(\vec{r}, t) = A_1 a_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) + A_1^* 1_{\lambda\vec{k}}^*(\vec{r}, t) a_{\lambda\vec{k}}^* \quad (15)$$

B. Campos eléctricos y magnéticos

Una vez que está definida la magnitud $\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t)$ nos queda definir el campos eléctrico, el magnético y la densidad de energía. Vamos a repetir exactamente todo lo que hicimos con campos clásicos, ahora manteniendo $a_{\lambda\vec{k}}$ y $a_{\lambda\vec{k}}^*$

a) El **campo eléctrico** es ahora

$$\vec{E}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = i\omega \left[\vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) - \vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}^*(\vec{r}, t) \right]. \quad (16)$$

No sumaremos algebraicamente $\vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}$ y $\vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}^*$ (recordemos que tenemos los futuros operadores $a_{\lambda\vec{k}}$ y $a_{\lambda\vec{k}}^*$). Las razones serán evidentes cuando calculemos la densidad de energía.

b) El **campo magnético** resulta

$$\vec{B}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) = i\vec{k} \times \left[\vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}, t) - \vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}^*(\vec{r}, t) \right], \quad (17)$$

donde hemos usado, como siempre, la identidad

$$\vec{\nabla} \times \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = (i\vec{k} \times \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (18)$$

c) De la física elemental se vio que la **densidad de energía** o sea la energía U de un campo electromagnético por unidad de volumen V era

$$\rho = \frac{U}{V} = \frac{1}{V} \int_V d\vec{r} \frac{dU}{dV} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int_V \frac{d\vec{r}}{V} \left(|\vec{E}|^2 + c^2 |\vec{B}|^2 \right)^2. \quad (19)$$

Donde tenemos cuidado y sumamos todos los posibles campos eléctricos y magnéticos

$$\vec{E} = \sum_{\lambda \vec{k}} \vec{E}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) \quad y \quad \vec{B} = \sum_{\lambda \vec{k}} \vec{B}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t). \quad (20)$$

Aquí tenemos suma de campos que podrían interferir.. Trabajo con cuidado

$$\begin{aligned} \int_V \frac{d\vec{r}}{V} |E|^2 &= \int_V \frac{d\vec{r}}{V} \left[\sum_{\lambda \vec{k}} \vec{E}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) \right] \left[\sum_{\lambda \vec{k}} \vec{E}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) \right]^*, \\ &= \int_V \frac{d\vec{r}}{V} \left(\sum_{\lambda \vec{k}} i\omega \left[\vec{A}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) - \vec{A}_{\lambda \vec{k}}^*(\vec{r}, t) \right] \right) \\ &\quad \times \left(\sum_{\lambda' \vec{k}'} (-i\omega') \left[\vec{A}_{\lambda' \vec{k}'}^*(\vec{r}, t) - \vec{A}_{\lambda' \vec{k}'}(\vec{r}, t) \right] \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Usando la siguiente propiedad

$$\begin{aligned} \int_V \frac{d\vec{r}}{V} \vec{A}_{\lambda' \vec{k}'}^*(\vec{r}, t) \vec{A}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) &= \int_V \frac{d\vec{r}}{V} \underbrace{\hat{\varepsilon}_{\lambda' \vec{k}'}}_{\hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}} A_1^*(\omega) \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r} + i\omega' t - i\delta\omega) a_{\lambda' \vec{k}'}, \\ &\quad \hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}} A_1(\omega') \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + i\delta\omega) a_{\lambda \vec{k}}, \\ &= |A_1|^2 \delta_{\lambda, \lambda'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} a_{\lambda \vec{k}}^* a_{\lambda \vec{k}}, \end{aligned} \quad (22)$$

(si se usa helicidades, recordar que $\hat{\varepsilon}_{\pm}^* \cdot \hat{\varepsilon}_{\pm} = 1$). Volviendo a la Eq.(22) resulta

$$\int_V \frac{d\vec{r}}{V} |E|^2 = \sum_{\lambda \vec{k}} \omega^2 |A_1|^2 \left[a_{\lambda \vec{k}}^* a_{\lambda \vec{k}} + a_{\lambda \vec{k}} a_{\lambda \vec{k}}^* \right]. \quad (23)$$

En campos clásicos encontramos la misma formula con $\left[a_{\lambda \vec{k}}^* a_{\lambda \vec{k}} + a_{\lambda \vec{k}} a_{\lambda \vec{k}}^* \right] \equiv 2$ que resulta de considerar $a_{\lambda \vec{k}} = 1$. Algo más, la $\sum_{\lambda \vec{k}}$ sale fuera del modulo y suma todas las amplitudes.

No hay interferencias.

De la misma manera calculemos $|B|^2$

$$\begin{aligned} \int_V \frac{d\vec{r}}{V} c^2 |B|^2 &= \int_V \frac{d\vec{r}}{V} c^2 \left[\sum_{\lambda \vec{k}} \vec{B}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) \right] \left[\sum_{\lambda \vec{k}} \vec{B}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) \right]^*, \\ &= \int_V \frac{d\vec{r}}{V} \left(\sum_{\lambda \vec{k}} i\vec{k} \times \left[\vec{A}_{\lambda \vec{k}}(\vec{r}, t) - \vec{A}_{\lambda \vec{k}}^*(\vec{r}, t) \right] \right) \\ &\quad \times \left(\sum_{\lambda' \vec{k}'} -i\vec{k}' \times \left[\vec{A}_{\lambda' \vec{k}'}^*(\vec{r}, t) - \vec{A}_{\lambda' \vec{k}'}(\vec{r}, t) \right] \right), \end{aligned} \quad (24)$$

Usando las Eqs.(22) resulta

$$\int_V \frac{d\vec{r}}{V} c^2 |B|^2 = \sum_{\vec{\lambda k}} \underbrace{c^2 k^2}_{\omega^2} |A_1|^2 \left[a_{\vec{\lambda k}}^* a_{\vec{\lambda k}} + a_{\vec{\lambda k}} a_{\vec{\lambda k}}^* \right], \quad (25)$$

donde hemos usado

$$\left(\vec{k} \times \hat{\varepsilon}_{\vec{\lambda k}} \right) \cdot \left(\vec{k} \times \hat{\varepsilon}_{\vec{\lambda' k}} \right) = k^2 \delta_{\lambda, \lambda'}. \quad (26)$$

Notesé el hecho que la densidad de energía magnética Eq.(25) iguala a la eléctrica Eq.(23) que es algo que conocemos muy bien de los campos clásicos.

Reemplazando en Eqs.(23) y (25) en la Eq.(19) tenemos

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{U}{V} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 2 \sum_{\vec{\lambda k}} \omega^2 |A_1|^2 \left[a_{\vec{\lambda k}}^* a_{\vec{\lambda k}} + a_{\vec{\lambda k}} a_{\vec{\lambda k}}^* \right], \\ \rho &= \frac{U}{V} = \varepsilon_0 \sum_{\vec{\lambda k}} \omega^2 \frac{\overbrace{|A_1|^2}^{\hbar}}{2\varepsilon_0 \omega V} \left[a_{\vec{\lambda k}}^* a_{\vec{\lambda k}} + a_{\vec{\lambda k}} a_{\vec{\lambda k}}^* \right], \\ U &= \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar \omega \frac{1}{2} \left[a_{\vec{\lambda k}}^* a_{\vec{\lambda k}} + a_{\vec{\lambda k}} a_{\vec{\lambda k}}^* \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

C. Segunda cuantificación

Vamos a promover las funciones a operadores,

$$\begin{aligned} a_{\vec{\lambda k}} &\rightarrow \hat{a}_{\vec{\lambda k}} && \text{lowering operator,} \\ a_{\vec{\lambda k}}^* &\rightarrow \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger && \text{raising operator,} \end{aligned} \quad (28)$$

y U que era una función ahora es un operador. Usando el hecho que $[\hat{a}_{\vec{\lambda k}}, \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger] = 1$, implica que $\hat{a}_{\vec{\lambda k}} \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger = \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\lambda k}} + 1$, con lo que

$$\hat{U} = \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar \omega \left[\hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\lambda k}} + \frac{1}{2} \right] = \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar \omega \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^* \hat{a}_{\vec{\lambda k}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar \omega}_{\omega_0}, \quad (29)$$

que es el oscilador más un término adicional ω_0 conocido como energía del vacío o punto cero, que en ppio no hay problemas ya que generalmente se trabaja con diferencias de energía. [Ocurre que a veces que ω_0 diverge. Para resolver el problema se recurre a la renormalización de carga y masa (Tomonaga y Schwinger)]. Despreciamos ω_0 y usaremos

simplemente el primer término de la Eq.(29)

$$\hat{U} = \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar\omega \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\lambda k}}, \quad (30)$$

que es equivalente al hamiltoniano del oscilador. En términos del operador de número $\hat{N}_{\vec{\lambda k}} = \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\lambda k}}$, \hat{U} se escribe

$$\hat{U} = \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar\omega \hat{N}_{\vec{\lambda k}}. \quad (31)$$

Si operamos sobre un autoestado del campo fotónico, por ejemplo $|n_{\lambda_1 \vec{k}_1}, m_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle$, entonces

$$\hat{U}|n_{\lambda_1 \vec{k}_1}, m_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle = (n \hbar\omega_1 + m \hbar\omega_2)|n_{\lambda_1 \vec{k}_1}, m_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle. \quad (32)$$

El autovalor es la energía correspondiente a n fotones con energía $\hbar\omega_1$ mas m fotones con energía $\hbar\omega_2$. Si $n = 1$, y $m = 2$, entonces $|1_{\lambda_1 \vec{k}_1}, 2_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle$ es una abreviación del término matricial que vimos anteriormente

$$|1_{\lambda_1 \vec{k}_1}, 2_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle = \underbrace{|0, 1, 0, \dots\rangle}_{\lambda_1 \vec{k}_1} \cdot \underbrace{|0, 0, 1, 0\rangle}_{\lambda_2 \vec{k}_2}; \dots \quad (33)$$

D. El Hamiltoniano

Podemos ahora incorporar directamente el campo de radiación al Hamiltoniano y trabajar con un sistema cerrado materia-radiación que **conserva** la energía y momento

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + qV + \underbrace{V \frac{\epsilon_0}{2} \int_V \frac{d\vec{r}}{V} (|\vec{E}|^2 + c^2|\vec{B}|^2)}_{U = \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar\omega \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\lambda k}}}, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 + qV - \underbrace{\frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_r}_i + \frac{q^2}{2m} A^2 + U, \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\vec{r}}^2 + qV \\
&\quad -\frac{q}{m}\sum_{\vec{\lambda k}} \overbrace{\left[\vec{\mathcal{A}}_{\vec{\lambda k}}(\vec{r}, t) + \vec{\mathcal{A}}_{\vec{\lambda k}}^*(\vec{r}, t)\right]}^{\vec{A}} \widehat{p} \\
&\quad +\frac{q^2}{2m}\sum_{\vec{\lambda k}} \underbrace{\left[\vec{\mathcal{A}}_{\vec{\lambda k}}(\vec{r}, t) + \vec{\mathcal{A}}_{\vec{\lambda k}}^*(\vec{r}, t)\right]}_{\vec{A}} \cdot \underbrace{\sum_{\vec{\lambda' k'}} \left[\vec{\mathcal{A}}_{\vec{\lambda' k'}}^*(\vec{r}, t) + \vec{\mathcal{A}}_{\vec{\lambda' k'}}(\vec{r}, t)\right]^*}_{\vec{A}^*} \\
&\quad +U.
\end{aligned} \tag{35}$$

Cambiando de notación, podemos reescribirlo de igual manera a campos clásicos

$$H = H_0 + H' + H'' + U, \tag{36}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\vec{r}}^2 + qV, \tag{37}$$

$$H' = \sum_{\vec{\lambda k}} H_{\vec{\lambda k}}^- e^{-i\omega t} + \sum_{\vec{\lambda k}} e^{+i\omega t} H_{\vec{\lambda k}}^+, \tag{38}$$

$$\begin{aligned}
H'' &= \sum_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}} H_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}}^- e^{-i\omega t - i\omega' t} + \sum_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}} e^{i\omega t + i\omega' t} H_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}}^+, \\
&\quad + \sum_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}} e^{+i\omega t} H_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}}^+ e^{-i\omega' t} + \sum_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}} e^{-i\omega' t} H_{\vec{\lambda k}, \vec{\lambda' k'}}^- e^{+i\omega t},
\end{aligned} \tag{39}$$

$$U = \sum_{\vec{\lambda k}} \hbar\omega \hat{a}_{\vec{\lambda k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\lambda k}}, \tag{40}$$

donde hemos factorizado la dependencia temporal y

$$H_{\lambda\vec{k}}^- = \frac{q}{m} A_1 \widehat{\vec{p}} \widehat{a}_{\lambda\vec{k}} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + i\delta_\omega}_{1_{\lambda\vec{k}}}, \quad (41)$$

$$H_{\lambda\vec{k}}^+ = \frac{q}{m} A_1 \underbrace{\left(\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + i\delta_\omega\right)^*}_{1_{\lambda\vec{k}}^*} \widehat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger \widehat{\vec{p}}, \quad (42)$$

$$H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- = \frac{q^2}{2m} A_1(\omega) A_1(\omega') \widehat{a}_{\lambda\vec{k}} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \widehat{a}_{\lambda'\vec{k}'} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} e^{i\delta_{\omega'}}}_{1_{\lambda'\vec{k}'}}, \quad (43)$$

$$H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ = \frac{q^2}{2m} A_1(\omega) A_1(\omega') \underbrace{\left(\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\delta_\omega}\right)^*}_{1_{\lambda\vec{k}}^*} \widehat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} e^{-i\delta_{\omega'}}}_{1_{\lambda'\vec{k}'}} \widehat{a}_{\lambda'\vec{k}'}^\dagger, \quad (44)$$

$$H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ = \frac{q^2}{2m} A_1(\omega) A_1(\omega') \widehat{a}_{\lambda'\vec{k}'} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} e^{i\delta_{\omega'}}}_{1_{\lambda'\vec{k}'}} \underbrace{\left(\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\delta_\omega}\right)^*}_{1_{\lambda\vec{k}}^*} \widehat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger, \quad (45)$$

$$H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- = \frac{q^2}{2m} A_1(\omega) A_1(\omega') \widehat{a}_{\lambda\vec{k}} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{+i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \underbrace{\left(\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} e^{i\delta_{\omega'}}\right)^*}_{1_{\lambda'\vec{k}'}} \widehat{a}_{\lambda'\vec{k}'}^\dagger. \quad (46)$$

La física de cada elemento es simple

$$\begin{aligned} H_{\lambda\vec{k}}^- & \text{ un fotón } \lambda\vec{k} \text{ del habitac se destruye,} \\ H_{\lambda\vec{k}}^+ & \text{ un fotón } \lambda\vec{k} \text{ se crea en el habitac,} \\ H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- & \text{ dos fotones } \lambda\vec{k} \text{ y } \lambda'\vec{k}' \text{ del habitac se destruyen,} \\ H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ & \text{ dos fotones } \lambda\vec{k} \text{ y } \lambda'\vec{k}' \text{ se crean en el habitac,} \\ H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ & \text{ un fotón } \lambda'\vec{k}' \text{ del habitac se destruye y un fotón } \lambda\vec{k} \text{ se crea,} \\ H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- & \text{ un fotón } \lambda'\vec{k}' \text{ se crea y un fotón } \lambda\vec{k} \text{ del habitac se destruye.} \end{aligned} \quad (47)$$

Resulta que $H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^-$ y $H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+$ son iguales.

E. Probabilidades de Transicion

Usando la regla de oro de Fermi en un formalismo dependiente del tiempo llegamos a (ver material adicional).

$$\frac{dW_{fi}^+}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\underbrace{\varepsilon_f + \omega}_{E_f} - \underbrace{\varepsilon_i}_{E_i}] \left| \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle \right|^2, \quad (48)$$

$$\frac{dW_{fi}^-}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\underbrace{\varepsilon_f}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega)}_{E_i}] \left| \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^- | N_i, \psi_i \rangle \right|^2, \quad (49)$$

$$\frac{dW_{fi}^{++}}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\underbrace{(\varepsilon_f + \hbar\omega + \hbar\omega')}_{E_f} - \underbrace{\varepsilon_i}_{E_i}] \left| \langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^{++} | N_i, N'_i, \psi_i \rangle \right|^2, \quad (50)$$

$$\frac{dW_{fi}^{--}}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\underbrace{\varepsilon_f}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega + \hbar\omega')}_{E_i}] \left| \langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^{--} | N_i, N'_i, \psi_i \rangle \right|^2, \quad (51)$$

$$\frac{dW_{fi}^{-+}}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\underbrace{(\varepsilon_f + \hbar\omega)}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega')}_{E_i}] \left| \langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^{-+} | N_i, N'_i, \psi_i \rangle \right|^2, \quad (52)$$

donde $d\vec{f}$, en este caso representa todos los posibles estados finales. La lectura del argumento de la δ nos da la conservación de energía de acuerdo al proceso en cuestión. Los estados iniciales corresponden a las autofunciones de $\hat{U} \times H_0$ donde hemos simplificado la notación, usando directamente $|N_i\rangle$, $|N'_i\rangle$, $|N_f\rangle$, $|N'_f\rangle$

$$\left\{ \begin{array}{ll} |N_i\rangle = |\dots, 0, N_{i(\lambda\vec{k})}, 0, \dots\rangle, & \hat{U}|N_i\rangle = N_i \hbar\omega_i |N_i\rangle \\ |N'_i\rangle = |\dots, 0, N_{i(\lambda'\vec{k}')}, 0, \dots\rangle, & \hat{U}|N'_i\rangle = N'_i \hbar\omega'_i |N'_i\rangle \\ |N_f\rangle = |\dots, 0, N_{f(\lambda\vec{k})}, 0, \dots\rangle, & \hat{U}|N_f\rangle = N_f \hbar\omega_f |N_f\rangle \\ |N'_f\rangle = |\dots, 0, N_{f(\lambda'\vec{k}')}, 0, \dots\rangle, & \hat{U}|N'_f\rangle = N'_f \hbar\omega'_f |N'_f\rangle \\ & H_0 \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r), \\ & H_0 \psi_f(r) = \varepsilon_f \psi_f(r), \end{array} \right. \quad (53)$$

F. Cambio de notación

Ya en el formalismo independiente del tiempo hay otra forma de notación mas compacta. Consideremos el elemento de matriz de la **creación de un fotón** como ejemplo

$$\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle = \langle N_f, \psi_f | \frac{q}{m} A_1 \underbrace{\hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} - i\delta\omega}_{1_{\lambda\vec{k}}^*} \hat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger \hat{p} | N_i, \psi_i \rangle, \quad (54)$$

donde hemos simplificado la notación según (53). Además sabemos que

$$\widehat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger |N_i\rangle = \sqrt{N_i + 1} |(N_i + 1)\rangle, \quad (55)$$

con lo que puede incorporarse a A_1 y dar A_{N_i+1} ya que

$$\sqrt{N_i + 1} A_1(\omega) = \sqrt{N_i + 1} \sqrt{\frac{\hbar \times 1}{2\varepsilon_0 \omega V}} = \sqrt{\frac{\hbar(N_i + 1)}{2\varepsilon_0 \omega V}} = A_{N_i+1}(\omega)$$

Usando el hecho que $\langle N_f | N_i + 1 \rangle = \delta_{N_f, N_i+1}$, entonces

$$\langle N_i + 1, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i+1} \langle \psi_f | 1_{\lambda\vec{k}}^* \widehat{p} | \psi_i \rangle. \quad (56)$$

Aquí podemos hacer un redistribución que nos ayudará mucho a leer rápidamente los elementos de matriz. Fijemosno que el operador contiene la función $1_{\lambda\vec{k}}$ que, como dijimos, es la onda plana del fotón con su correspondiente momento y polarización. Podemos pensar en incorporarla directamente al estado final estacionario asi

$$\psi_f \rightarrow \psi_f 1_{\lambda\vec{k}} \quad \text{con} \quad 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}) = \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} + i\delta\omega}. \quad (57)$$

Mas aún el estado inicial podemos inventarle la ausencia del fotón llamando

$$\psi_i \rightarrow \psi_i \times 1 = \psi_i 0_{\lambda\vec{k}} \quad \text{con} \quad 0_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}) = 1. \quad (58)$$

El $0_{\lambda\vec{k}}$ es un término simbólico (digamos el cero fotón). El elemento de matriz de **creación de un fotón** $\lambda\vec{k}$ se reduce entonces a

$$\langle N_i + 1, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i+1} \langle 1_{\lambda\vec{k}} \psi_f | \widehat{p} | 0_{\lambda\vec{k}} \psi_i \rangle. \quad (59)$$

Y aca hay una diferencia que es fundamental ya que aparece el término A_{N_i+1} en lugar del A_{N_i} que da los campos clasicos. **Es una diferencia muy importante.** Que nos permitirá tener radiación espontánea en ausencia de fotones ($N_i = 0$). La clásica lo prohibía.

Con analisis similares los otros elementos de matriz, por ejemplo la **destrucción de un fotón** se puede escribir

$$\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^- | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i} \langle 0_{\lambda\vec{k}} \psi_f | \widehat{p} | 1_{\lambda\vec{k}} \psi_i \rangle.$$

Para los casos en que se involucra **dos fotones** podemos resumir la notación de la misma manera

$$\langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ | N_i, N'_i, \psi_i \rangle = \frac{q^2}{2m} A_{N_i+1}(\omega) A_{N'_i+1}(\omega') \langle 1_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k}'} \psi_f | 0_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k}'} \psi_i \rangle \quad (60)$$

$$\langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- | N_i, N'_i, \psi_i \rangle = \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega) A_{N'_i}(\omega') \langle 0_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k}'} \psi_f | 1_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k}'} \psi_i \rangle, \quad (61)$$

$$\langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ | N_i, N'_i, \psi_i \rangle = \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega) A_{N'_i+1}(\omega') \langle 0_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k}'} \psi_f | 1_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k}'} \psi_i \rangle, \quad (62)$$

donde usamos la propiedad

$$\widehat{a}_{\lambda\vec{k}} |N_i\rangle = \sqrt{N_i} |N_i - 1\rangle, \quad .y \quad (63)$$

$$\widehat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger |N_i\rangle = \sqrt{N_i + 1} |N_i + 1\rangle. \quad (64)$$

Lo que da $\widehat{a} |0_{\lambda\vec{k}}\rangle = 0$, implica que no se puede destruir fotones donde no hay fotones. Podemos compactar mas aún las expresiones llamando

$$\langle X \rangle_{fi} = \langle \psi_f | X | \psi_i \rangle \quad (65)$$

compactamos un poco mas los elementos integrales (obviando la fase δ_ω)

$$\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i+1} \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{fi}, \quad (66)$$

$$\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^- | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i} \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \left\langle \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right\rangle_{fi}, \quad (67)$$

$$\langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^+ | N_i, N'_i, \psi_i \rangle = \frac{q^2}{2m} A_{N_i+1}(\omega) A_{N'_i+1}(\omega') \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'}^* \left\langle e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} - i\vec{k}\cdot\vec{r} \right\rangle_{fi} \quad (68)$$

$$\langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- | N_i, N'_i, \psi_i \rangle = \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega) A_{N'_i}(\omega') \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'} \left\langle e^{+i\vec{k}'\cdot\vec{r}} + i\vec{k}\cdot\vec{r} \right\rangle_{fi} \quad (69)$$

$$\langle N_f, N'_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}, \lambda'\vec{k}'}^- | N_i, N'_i, \psi_i \rangle = \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega) A_{N'_i+1}(\omega') \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k}'}^* \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \left\langle e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} + i\vec{k}\cdot\vec{r} \right\rangle_{fi} \quad (70)$$

G. Aproximación dipolar

Si usamos la aproximación dipolar que consiste en hacer $k = 0$ (ver campos clásicos), resulta

$$1_{\lambda\vec{k}} = \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\delta_\omega} \simeq \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{-i\delta_\omega}. \quad (71)$$

En los casos que veremos la fase $e^{-i\delta_\omega}$ resulta irrelevante. Esto implica considerar al fotón como una **partícula con energía pero no momento**. Entonces las ecuaciones precedentes que involucran la **transición de un fotón** se simplifican más aún

$$\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i+1} \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \left\langle \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{fi}, \quad (72)$$

$$\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^- | N_i, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_{N_i} \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \left\langle \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{fi}. \quad (73)$$

En los otros términos que involucra transiciones de **dos fotones NO** puede hacerse la aproximación dipolar. Si se lo hiciese, entonces daría $\langle 1 \rangle_{fi} = 0$, por ortogonalidad. Justamente el cambio de momento fotónico es el que permite la transición.

H. Formas alternativas de la longitud y fuerza en la aproximación dipolar

En la aproximación dipolar hacemos $k = 0$ que era equivalente a considerar al fotón como una partícula con energía pero sin momento. El elemento de matriz de interés es entonces

$$\langle \widehat{\vec{p}} \rangle_{fi} = \langle \psi_f | \widehat{\vec{p}} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} | \psi_i \rangle \quad \text{VELOCIDAD.} \quad (74)$$

A esta forma se la llama velocidad y es la que surge naturalmente. Hay otras dos formas que pasamos a ver. Usando la identidad

$$\widehat{\vec{p}} = \frac{m}{i\hbar} [\vec{r}, H_0]. \quad (75)$$

Recordemos que salía haciendo

$$\begin{aligned} \frac{m}{i\hbar} [\vec{r}, H_0] &= \frac{m}{i\hbar} [\vec{r}, \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(r)] = \frac{m}{i\hbar} [\vec{r}, \frac{\widehat{p}^2}{2m}], \\ &= \frac{1}{2i\hbar} ([\vec{r}, \widehat{p}] \widehat{p} + \widehat{p} [\vec{r}, \widehat{p}]) = \frac{1}{2i\hbar} (i\hbar \widehat{p} + i\hbar \widehat{p}) = \widehat{p}. \end{aligned} \quad (76)$$

Reemplazando la identidad (75) en la Eq.(74), resulta

$$\begin{aligned} \langle \widehat{\vec{p}} \rangle_{fi} &= \langle \psi_f | \frac{m}{i\hbar} [\vec{r}, H_0] | \psi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle \psi_f | \vec{r} \overleftrightarrow{H_0} - \overleftrightarrow{H_0} \vec{r} | \psi_i \rangle = \\ \langle \widehat{\vec{p}} \rangle_{fi} &= \frac{im}{\hbar} (\varepsilon_f - \varepsilon_i) \langle \vec{r} \rangle_{fi} \\ \langle \vec{r} \rangle_{fi} &= \langle \psi_f | \vec{r} | \psi_i \rangle \quad \text{LONGITUD} \end{aligned} \quad (77)$$

y a este término se llama longitud. En el Apéndice 2 continuamos con otra expresión alternativa: la fuerza.

I. PROCESOS QUE VEREMOS

Veremos los siguientes fenómenos.

- Elemento $H_{\lambda k}^+$. **Decaimiento radiativo**; los estados iniciales y finales son ligados.
- Elemento $H_{\lambda k}^+$. **Captura radiativa**; si el estado inicial es el continuo y el final un ligado.
- Elemento $H_{\lambda k}^+$. **Bremsstrahlung**; si los estados iniciales y finales son continuos.

- Elemento $H_{\lambda \vec{k}}^-$. **Efecto fotoeléctrico**; si el estado inicial es ligado y el final un continuo.
- Elemento $H_{\lambda \vec{k}'}^+ H_{\lambda \vec{k}'}^-$. **Thomson scattering** ; el estado inicial es ligado y el final un continuo.
- Elemento $H_{\lambda \vec{k}'}^+ H_{\lambda \vec{k}'}^-$. **Compton scattering**; el estado inicial es ligado (o continuo) y el final un continuo a energía relativistas.
- Elemento $H_{\lambda \vec{k}'}^+ G_0 H_{\lambda \vec{k}}^-$. **Raman scattering** el estado inicial y final ligados, generalmente sobre moléculas y con excitaciones roto-vibracionales.
- Elemento $H_{\lambda \vec{k}'}^+ G_0 H_{\lambda \vec{k}}^- + H_{\lambda \vec{k}'}^+ H_{\lambda \vec{k}'}^-$. **Rayleigh scattering**, el estado inicial y final son el mismo (scattering elástico).

A todos los investigadores se les otorgó (por esta u otra razón) el Premio Nobel.

Einstein (PN 1921, por el efecto fotoeléctrico. No por la teoría de la relatividad!).

Thomson.(PN 1906, su hijo también ganó el PN en 1937) alumno de Maxwell, profesor de Cambridge.

Compton. (P.N. 1927) americano.(dirigió el S-1, que enriqueció el uranio para el proyecto Manhattan).

Raman (PN 1930) Hindu, Tamil, esperó ganarlo en 1929 pero lo ganó deBroglie (Raman ya había comprado los tickets). Su padre fue profesor de física y su sobrino Chandrasekar que ganó el nobel en 1930. También publicó en nature 1909 sobre acústica de instrumentos musicales hindúes!

Rayleigh (P.N 1904 por el descubrimiento del Ar.) Fue miembro de la realeza (camara de Lords). Fue sucesor de Maxwell en Cambridge. Fue presidente de la Roy Soc. y presidente del comité gubernamental de explosivos!. Tiene un excelente libro sobre sonido.

A. Hoja de ruta

Antes de comenzar a estudiar los procesos descritos hagamos una hoja de ruta general que nos permitirá atacar **todos los procesos**.

1i) Identificar el proceso radiativo en cuestión sus estados iniciales finales y sus energías

$$\begin{aligned}
 |\Psi_i\rangle &= |N_i, N'_i, \dots \psi_i\rangle, & H|\Psi_i\rangle &= E_i|\Psi_i\rangle, \\
 |\Psi_f\rangle &= |N_f, N'_f, \dots \psi_f\rangle, & H|\Psi_f\rangle &= E_f|\Psi_f\rangle.
 \end{aligned}$$

2i) Calcular el elemento de matriz interviene.

$$\langle H \rangle_{if} = \langle N_f, N'_f, \dots \psi_f | H | N_i, N'_i, \dots \psi_i \rangle. \quad (78)$$

3i) Escribir la regla de oro de Fermi correspondiente.

$$\frac{d W_{i \rightarrow f}}{dt d \vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta [E_i - E_f] |\langle H \rangle_{if}|^2. \quad (79)$$

4i) Determinar la densidad de estados finales ya sea partículas o fotones:

$$d \vec{f} = d \vec{k}_f, \quad \text{partículas (ej. electrones),} \quad (80)$$

$$d \vec{f} = \sum_{\lambda} \frac{V}{(2\pi)^3} d \vec{k}, \quad \text{fotones.} \quad (81)$$

5i) Integrar la conservación de la energía de la regla de Fermi con la densidad de estados finales y así obtener la probabilidad diferencial. Si escribimos simbólicamente $d \vec{f} = f^2 df d\Omega_f$

$$\frac{d W_{i \rightarrow f}}{dt} = \int d \vec{f} \frac{2\pi}{\hbar} \delta [E_i - E_f] |\langle H \rangle_{if}|^2, \quad (82)$$

$$\frac{d W_{i \rightarrow f}}{dt d\Omega_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{\int df f^2 \delta [E_i - E_f] |\langle H \rangle_{if}|^2}_{\text{densidad de estados}} \quad (83)$$

6i) Si estamos interesados en la sección eficaz dividir la probabilidad diferencial por el flujo incidente

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_f} = \frac{\frac{d W_{i \rightarrow f}}{dt d\Omega_f}}{J_{in}}, \quad (84)$$

ya sea partículas o fotones.

$$J_{in} = \frac{\hbar k_i}{(2\pi)^3 m}, \quad \text{partículas (ej. electrones),} \quad (85)$$

$$J_{in} = \frac{N_{\lambda \vec{k}}}{V} c, \quad \text{fotones.} \quad (86)$$

7i) Calcular los elementos de matriz, haciendo la aproximación que corresponda (dipolar, onda plana, etc.) y de esta manera se llega a la sección eficaz multiplediferencial.

8i) Si fuese necesario se integra sobre las condiciones iniciales (fase, polarización, energía, etc.).

9i) Se va integrando la sección eficaz diferencial para arribar a la magnitud requerida. La última escala es la sección eficaz total. $\sigma_{i \rightarrow f}$

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \int d\Omega_f \frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_f}. \quad (87)$$

10i) Se interpreta la Física involucrada en el proceso.

=====

II. FINAL DE ESTRUCTURA 3. SIGUE MATERIAL ADICIONAL.

=====

A. Time dependent Schrödinger equation (TDSE)

Aquí repasamos la TDSE y su conexión con la regla de oro de Fermi. Vamos a concentrarnos en la **creación de un fotón**: la generalización a otros casos es obvia. La solución de la ecuación de Schrödinger $\Phi(\vec{r}, t)$ satisface

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{r}, t) = H \Phi(\vec{r}, t) = [H_0 + U + M] \Phi(\vec{r}, t). \quad (88)$$

$$M = e^{+i\omega t} H_{\lambda \vec{k}}^+, \quad \text{creación de un fotón} \quad (89)$$

Vamos a considerar como base a las autofunciones de $H_0 + U$ y a M como perturbación. Como es natural, definamos los estados iniciales y finales de la transición que nos interesa

autofunciones de H_0 : (90)

$$\begin{aligned}\Psi_i(r, t) &= \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar) \psi_i(r), & H_0 \psi_i(r) &= \varepsilon_i \psi_i(r), \\ \Psi_f(r, t) &= \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar) \psi_f(r), & H_0 \psi_f(r) &= \varepsilon_f \psi_f(r),\end{aligned}\quad (91)$$

autofunciones de U :

$$|N_i\rangle = |\dots, 0, N_{i(\lambda \vec{k})}, 0, \dots\rangle \quad U|N_i\rangle = N_i \hbar \omega_i |N_i\rangle, \quad (92)$$

$$|N_f\rangle = |\dots, 0, N_{f(\lambda \vec{k})}, 0, \dots\rangle \quad U|N_f\rangle = N_f \hbar \omega_f |N_f\rangle, \quad (93)$$

(por ahora no le pongamos la dependencia temporal
su incorporación sera evidente) (94)

autofunciones de $H_0 + U$:

$$\phi_i(r, t) = \Psi_i(r, t)|N_i\rangle = \psi_i(r)|N_i\rangle \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar), \quad (95)$$

$$\phi_f(r, t) = \Psi_f(r, t)|N_f\rangle = \psi_f(r)|N_f\rangle \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar). \quad (96)$$

Definamos una base completa de soluciones de $(H_0 + U)$

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum_l c_l(t) \phi_l(r, t), \quad \text{con las condiciones} \quad (97)$$

$$c_i(t=0) = 1, \quad (98)$$

$$c_l(t=0) = 0, \quad l \neq i. \quad (99)$$

Reemplazando la Eq.(97) en la ecuación de Schrödinger nos da

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_f(t) = \sum_l \langle \phi_f | M | \phi_l \rangle c_l(t). \quad (100)$$

Seguimos el método tradicional de perturbaciones dependiente del tiempo. Haciendo: $c_l(t) \simeq c_l^{(0)}(t) = \delta_{li}$, lo que da en primer orden **perturbativo** $c_f^{(1)}(t) = a_{fi}(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{fi}(t) = \langle \phi_f | M | \phi_i \rangle \times 1, \quad (101)$$

que se resuelve facilmente por integración

$$a_{fi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \langle \phi_f | M | \phi_i \rangle, \quad (102)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \langle \psi_f(r) N_f | e^{i\varepsilon_f t/\hbar} \underbrace{e^{+i\omega t} H_{\lambda\vec{k}}^+}_M e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} | \psi_i(r) N_i \rangle, \quad (103)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \exp(-i\Delta t) \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle, \quad \text{con} \quad (104)$$

$$\Delta = \frac{\varepsilon_i}{\hbar} - \frac{\varepsilon_f}{\hbar} - \omega = \frac{\varepsilon_i - (\varepsilon_f + \hbar\omega)}{\hbar}, \quad (105)$$

Al término $a_{fi}(t)$ se le llama amplitud de transición y a $W(t) = |a_{fi}(t)|^2$ la probabilidad total, que sabemos diverge debido a que permanentemente hay transición. Nos va a interesar como siempre la probabilidad de transición por unidad de tiempo y por densidad de estados finales como se ve en la teoría dependiente del tiempo. La densidad de estados finales $d\vec{f}$, en este caso representa todos los posibles estados finales del fotón. En el Apéndice 1, derivamos otra vez las, la regla de oro de Fermi que nos da

$$\begin{aligned} \frac{d W_{fi}^+}{dt d\vec{f}} &= \frac{d}{dt} |a_{fi}(t)|^2, \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\varepsilon_i - \varepsilon_f - \hbar\omega] \left| \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (106)$$

y otra vez mas llegamos a la expresión de siempre. Hay varios puntos para destacar.

i) el término $\langle N_f \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_i \psi_i \rangle$ es estacionario no depende del tiempo.

ii) Notar que de la Ec.(102) y (103), podríamos haber trabajado en el formalimo de interacción (*interaction picture*) definiendo funciones dependiendo del tiempo

$$\begin{aligned} |N_i\rangle(t) &= \exp(-iN_i\omega t) |N_i\rangle, \\ |N_f\rangle(t) &= \exp(-iN_f\omega t) |N_f\rangle, \end{aligned} \quad (107)$$

luego resulta que

$$\begin{aligned} \Phi_i(r, t) &= \psi_i(r, t) |N_i\rangle(t) = \psi_i(r) |N_i\rangle \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar - iN_i\omega t), \\ \Phi_f(r, t) &= \psi_f(r, t) |N_f\rangle(t) = \psi_f(r) |N_f\rangle \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar - iN_f\omega t). \end{aligned} \quad (108)$$

y finalmente usar como perturbación independiente del tiempo a $H_{\lambda \vec{k}}^+$. Hubiesemos llegado a una expresión igual a la ec. (102).

iii) la δ simplemente describe la conservación de la energía $\varepsilon_i = \varepsilon_f + \hbar\omega$, que resulta obvio: se emite un fotón con energía $\hbar\omega$.

III. APENDICE 1. LA REGLA DE ORO DE FERMI. OTRA VEZ.

Nos va a interesar como siempre la probabilidad de transición por unidad de tiempo y por densidad de estados finales como vimos en la teoría formal de *scattering* dependiente del tiempo

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}(t)|^2 = \frac{d}{dt}(a_{fi}^*(t)a_{fi}(t)), \quad (109)$$

$$= \left[\frac{d}{dt}a_{fi}(t) \right] a_{fi}^*(t) + c.c. \text{ con} \quad (110)$$

$$a_{fi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \exp(-i\Delta t) \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda \vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle, \quad (111)$$

donde como siempre nos concentramos en la creación de un fotón: la generalización a otros procesos es simple. Reemplazando, la probabilidad de transición por unidad de tiempo es

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|a_{fi}(t)|^2 &= \overbrace{\left[\frac{1}{i\hbar} \exp(-i\Delta t) \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda \vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle \right]}^{\frac{d}{dt}a_{fi}(t)} \\ &\quad \times \overbrace{\left[\frac{1}{-i\hbar} \int_0^t dt \exp(+i\Delta t) \langle N_f, \psi_f | H_{\lambda \vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle^* + c.c. \right]}^{a_{fi}^*(t)} \quad (112) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda \vec{k}}^+ | N_i, \psi_i \rangle|^2 I(t) \quad \text{con} \quad (113)$$

$$I(t) = \exp(-i\Delta t) \int_0^t dt' \exp(+i\Delta t') + c.c. \quad (114)$$

Nos va a interesar hacer el limite de $I(t)$ cuando $t \rightarrow \infty$. para eso vamos a hacer alguna manipulación no muy rigurosa. Hay tres formas que nos llevan a la regla de oro de Fermi. Todas hacen suposiciones. Una se ve en la teoría formal de Scattering haciendo el limite de Golberger y Gell-mann. Otra la vimos introduciendo de prepo $E \rightarrow E \pm i\epsilon$ que es equivalente a considerar un potencial que se apaga adiabaticamente. La tercera es la que vamos a ver

ahora y que también puede ser criticada (pero es un poco mas elegante de lo que se ve en los libros elementales de cuántica. Teller decía que había dos reglas de Fermi). Reescribiendo (114)

$$I(t) = \int_0^t dt' \exp[+i\Delta(t' - t)] + c.c., \quad \text{haciendo } t'' = t' - t, \quad (115)$$

$$= \int_{-t}^0 dt'' \exp[+i\Delta t''] + \underbrace{\int_{-t}^0 dt'' \exp[-i\Delta t'']}_{\int_0^t dt'' \exp[+i\Delta t'']} = \int_{-t}^t dt'' \exp[+i\Delta t''], \quad (116)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} I(t) \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \exp[+i\Delta t''] = 2\pi \delta(\Delta). \quad (117)$$

Con lo que que

$$\frac{d}{dt} |a_{fi}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda k}^+ | N_i, \psi_i \rangle|^2 2\pi \delta \left[\frac{\varepsilon_i - (\varepsilon_f + \hbar\omega)}{\hbar} \right] \quad (118)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} [\varepsilon_i - (\varepsilon_f + \hbar\omega)] |\langle N_f, \psi_f | H_{\lambda k}^+ | N_i, \psi_i \rangle|^2. \quad (119)$$

IV. APENDICE II. OTRA FORMA ALTERNATIVA EN LA APROXIMACIÓN DIPOLAR: LA FUERZA

Usemos otra propiedad

$$\begin{aligned} [H_0, \hat{p}] &= \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V, \hat{p} \right] = [V, \hat{p}] \\ &= V \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} V = -\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla} V) = \frac{\hbar}{i} \vec{f} \end{aligned} \quad (120)$$

siendo $\vec{f} = -\vec{\nabla} V$, la fuerza. Calculando el elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle \vec{f} \rangle_{fi} &= \langle \psi_f | (-\vec{\nabla} V) | \psi_i \rangle = \langle -\vec{\nabla} V \rangle_{fi} \quad \text{FUERZA} \quad (121) \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi_f | [H_0, \hat{p}] | \psi_i \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi_f | H_0 \hat{p} - \hat{p} H_0 | \psi_i \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\varepsilon_f - \varepsilon_i) \langle \psi_f | \vec{p} | \psi_i \rangle, \\ \langle \vec{f} \rangle_{fi} &= \frac{1}{i\hbar} (\varepsilon_i - \varepsilon_f) \langle \vec{p} \rangle_{fi} = \frac{m}{\hbar^2} (\varepsilon_f - \varepsilon_i)^2 \langle \vec{r} \rangle_{fi}. \end{aligned} \quad (122)$$

Para el caso puramente Culombiano

$$\vec{\nabla} V = \vec{\nabla} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{r}}{r^2} \quad (123)$$

Resumiendo

$$\langle \vec{p} \rangle_{fi} = \frac{im}{\hbar} (\epsilon_f - \epsilon_i) \langle \vec{r} \rangle_{fi} = \frac{i\hbar}{(\epsilon_f - \epsilon_i)} \langle \vec{f} \rangle_{fi}. \quad (124)$$

La razón por la cual se llaman longitud, velocidad y fuerza (ó aceleración) parten de la siguiente analogía con la mecánica newtoniana. Defino

$$\vec{R}(t) = \int d\vec{r} \exp(i\epsilon_f t/\hbar) \psi_f^*(r) \vec{r} \exp(-i\epsilon_i t/\hbar) \psi_i(r), \text{ entonces,} \quad (125)$$

$$\vec{P}(t) = m\vec{V}(t) = m \frac{d}{dt} \vec{R}(t) = \frac{im}{\hbar} (\epsilon_f - \epsilon_i) \vec{R}(t), \quad (126)$$

$$\vec{F}(t) = \frac{d}{dt} \vec{P}(t) = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_f - \epsilon_i) \underbrace{m \frac{d}{dt} \vec{R}(t)}_{\vec{P}(t)} = \frac{m}{\hbar^2} (\epsilon_f - \epsilon_i)^2 \vec{R}(t), \quad (127)$$

que son las mismas relaciones!

Veamos algunas observaciones:

i) Vale dentro de la aproximación dipolar!

ii) Usamos el hecho que $H_0\psi_{i,f} = \epsilon_{i,f}\psi_{i,f}$ por lo que si tenemos funciones de onda aproximadas (no exactas), ocurre lo que se llama una discrepancia velocidad-longitud y justamente es una medida de la bondad de las funciones de onda.