Estructura de la materia 3

NOTAS DE CLASE 12. SEGUNDA CUANTIFICACION

J. E. Miraglia

Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas

y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.

(Dated: November 4, 2013)

Abstract

Revision del campo de radiacion Campos electricos y magneticos.

Segunda cuantificacion . Operadores de creacion y destruccion. El hamiltoniano. Generalizaciones Aproximacion dipolar. Ecuacion de Schroedinger dependiente del tiempo. La regla de Oro de Fermi. Equivalencias. Cambio de notacion y el formalismo independiente del tiempo. Formas alternativas de la longitud y aceleracion en la aproximacion dipolar

Procesos que veremos. Hoja de ruta

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

APENDICE II. Otra formas alternativa en la aproximacion dipolar: la fuerza

Falta Habria que reducir. dibujos , espanol y bibliografia. Hubiese sido mejor llamar A_0 en lugar de A_1, para indicar que hay 0 foton 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. Revision del campo de radiacion

Como lo hemos hecho en campos clasicos, los potenciales vectores son ahora (recordemos que estamos lejos de las fuentes por lo que el potencial escalar $V = 0$)

$$\overrightarrow{A}_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t) = \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t) + \overrightarrow{\mathcal{A}}^{*}_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t), \tag{1}$$

$$\overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t) = \widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\ A_1 \exp(i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r} - i\omega t + i\delta_\omega)\ a_{\lambda\overrightarrow{k}}, \tag{2}$$

$$\omega = kc, \tag{3}$$

$$\widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}}.\widehat{k} = \widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}}.\widehat{k} = \widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}}.\widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}} = 0, \quad \text{o mejor usando heliticidades} \tag{4}$$

$$\tag{5}$$

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

$$V = \text{ volumen de la caja de cuantificacion} \tag{7}$$

Que resulta exactamente igual pero que ahora introducimos las funciones (no operadores todavia!, pero lo seran) de destruccion ($a_{\lambda\overrightarrow{k}}$) y creacion ($a^{*}_{\lambda\overrightarrow{k}}$). Hemos mantenido la misma notacion que en campos clasicos. Algunos libros incorporan tambien el tiempo asi: $a_{\lambda\overrightarrow{k}}(t) = a_{\lambda\overrightarrow{k}}\exp(i\omega t)$ y $a^{*}_{\lambda\overrightarrow{k}}(t) = \exp(-i\omega t)a^{*}_{\lambda\overrightarrow{k}}$ y lo sacan de $\overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda\overrightarrow{k}}$, con lo que queda independiente del tiempo. Algo mas mantendremos la fase δ_ω, hasta el final aunque aqui no tendra ningun role

Recordemos que c es la velocidad de la luz, $\overrightarrow{k}$ la direccion (momento) de propagacion, $\omega = 2\pi\nu$, ν es la frecuencia de modo tal que la energia del foton es $E = \hbar\omega = h\nu$, y $\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}$ es el versor de polarizacion, o los correspondientes a la direcciones del campo electrico y magnetico. Es mejor usar los versores $\widehat{\varepsilon}_\pm$ (en este caso $\lambda = \pm$)

$$\begin{cases} \widehat{\varepsilon}_+ = \widehat{\varepsilon}_{Left} = \frac{\widehat{\varepsilon}_x + i\widehat{\varepsilon}_y}{\sqrt{2}} = -\widehat{\varepsilon}_1 = \widehat{\varepsilon}^{*}_- \\ \widehat{\varepsilon}_0 = \widehat{k} \\ \widehat{\varepsilon}_- = \widehat{\varepsilon}_{Right} = \frac{\widehat{\varepsilon}_x - i\widehat{\varepsilon}_y}{\sqrt{2}} = \widehat{\varepsilon}_{-1} = \widehat{\varepsilon}^{*}_+ \end{cases} \quad \text{y las inversas} \quad \begin{cases} \widehat{\varepsilon}_x = \frac{\widehat{\varepsilon}_+ + \widehat{\varepsilon}_-}{\sqrt{2}} \\ \widehat{k} = \widehat{\varepsilon}_0 \\ \widehat{\varepsilon}_y = i\frac{\widehat{\varepsilon}_+ - \widehat{\varepsilon}_-}{\sqrt{2}} \end{cases} . \tag{8}$$

Pero las propiedades son ahora

$$\begin{cases} \widehat{\varepsilon}^{*}_\mp \cdot \widehat{\varepsilon}_\pm = \widehat{\varepsilon}^{*}_\mp \cdot \widehat{\varepsilon}_0 = \widehat{\varepsilon}_\pm \cdot \widehat{\varepsilon}_\pm = 0 \\ \widehat{\varepsilon}^{*}_\pm \cdot \widehat{\varepsilon}_\pm = \widehat{\varepsilon}^{*}_0 \cdot \widehat{\varepsilon}_0 = 1 \\ \widehat{\varepsilon}^{*}_+ \times \widehat{\varepsilon}_- = \widehat{\varepsilon}_- \times \widehat{\varepsilon}_- = \widehat{\varepsilon}^{*}_- \times \widehat{\varepsilon}_+ = \widehat{\varepsilon}_+ \times \widehat{\varepsilon}_+ = 0 \end{cases} , \tag{9}$$

Antes de continuar es importante anticipar que la funcion $\xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \exp(i\vec{k}.\vec{r} - i\omega t + i\delta_\omega)$(que llamaremos $1_{\lambda\vec{k}}$ luego) es el estado del foton, ya que

$$\begin{aligned}
\widehat{\vec{p}}\ \xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) &= \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\right)\xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = \hbar\vec{k}\ \xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t)\ \text{(momento del foton)}, &(10)\\
\widehat{E}\ \xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) &= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = \hbar\omega\ \xi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t)\ \text{(energia del foton)}, &(11)\\
\hbar\widehat{S_z}\hat{\varepsilon}_\pm &= (\pm 1)\ \hbar\hat{\varepsilon}_\pm. &(12)
\end{aligned}$$

y tiene masa en reposo nula.

B. Campos electricos y magneticos

Una vez que esta definida la magnitud $\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t)$ nos queda definir los campos electricos, magneticos y la densidad de energia de acuerdo a sus definiciones. Vamos a repetir exactamente todo lo que hicimos con campos clasicos, ahora manteniendo $a_{\lambda\vec{k}}$ y $a^*_{\lambda\vec{k}}$

a) El **campo electrico** es

$$\vec{E}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = i\omega\left[\vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) - \vec{\mathcal{A}}^*_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t)\right]. \tag{13}$$

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 $a^*_{\lambda\vec{k}}$). En campos clasicos, teniamos $a_{\lambda\vec{k}} = a^*_{\lambda\vec{k}} = 1$ y nos daba $\vec{E}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = -\hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}\ 2\omega A_N \sin[\vec{k}.\vec{r} - \omega t + \delta_\omega]$. Las razones seran evidentes cuando calculemos la densidad de energia.

b) El **campo magnetico** resulta

$$\vec{B}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = \vec{\nabla}\times\vec{A}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) = i\vec{k}\times\left[\vec{\mathcal{A}}_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t) - \vec{\mathcal{A}}^*_{\lambda\vec{k}}(\vec{r},t)\right], \tag{14}$$

donde hemos usado, como siempre, la identidad

$$\vec{\nabla}\times\hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}\exp(i\vec{k}.\vec{r}) = (i\vec{k}\times\hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}})\exp(i\vec{k}.\vec{r}). \tag{15}$$

c) De la fisica elemental se vio que la **densidad de energia** o sea la energia U de un campo electromagnetico por unidad de volumen V era

$$\rho = \frac{U}{V} = \frac{1}{V}\int_V d\vec{r}\,\frac{dU}{dV} = \frac{1}{2}\varepsilon_0\int_V \frac{d\vec{r}}{V}\left(|\vec{E}|^2 + c^2|\vec{B}|^2\right)^2. \tag{16}$$

Donde tenemos cuidado y sumamos todos los posibles campos electricos y magneticos

$$\overrightarrow{E} = \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \overrightarrow{E}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) \qquad \text{y} \qquad \overrightarrow{B} = \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \overrightarrow{B}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t). \tag{17}$$

Aqui tenemos suma de campos que podrian interferir: como la experiencia de Young en optica. Trabajo con cuidado

$$\begin{aligned}
\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} |E|^2 &= \int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} \left[\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \overrightarrow{E}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) \right] \left[\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \overrightarrow{E}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) \right]^*, \\
&= \int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} \left(\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} i\omega \left[\overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) - \overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) \right] \right) \\
&\quad \times \left(\sum_{\lambda' \overrightarrow{k'}} (-i\omega') \left[\overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda' \overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r}, t) - \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda' \overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r}, t) \right] \right).
\end{aligned} \tag{18}$$

Usando la siguiente propiedad

$$\begin{aligned}
\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} \overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda' \overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r}, t) \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) &= \underbrace{\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V}} \widehat{\varepsilon}_{\lambda' \overrightarrow{k'}} \; A_1^*(\omega) \underbrace{\exp(-i\overrightarrow{k'}.\overrightarrow{r}} + i\omega' t - i\delta_{\omega'}) a^*_{\lambda' \overrightarrow{k'}}, \\
&\qquad \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \; A_1(\omega') \underbrace{\exp(i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}} - i\omega t + i\delta_\omega) a_{\lambda \overrightarrow{k}}, \\
&= |A_1|^2 \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\overrightarrow{k},\, \overrightarrow{k'}} \; a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}},
\end{aligned} \tag{19}$$

Aca podemos considerar lo siguiente. Si suponemos la numeralizacion en una caja $\overrightarrow{k} = \overrightarrow{n}\ 2\pi/L$, las componentes de $\overrightarrow{n}$ son siempre positivas con lo que $\delta_{\overrightarrow{k},\, \overrightarrow{k'}} \propto \delta_{\overrightarrow{n},\, -\overrightarrow{n}} = 0$ y entonces

$$\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda' \overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r}, t) \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) = 0. \tag{20}$$

(se ve mejor con heliticidades, recordar $\widehat{\varepsilon}_\pm \cdot \widehat{\varepsilon}_\pm = 0$, pero $\widehat{\varepsilon}^*_\pm \cdot \widehat{\varepsilon}_\pm = 1$). Volviendo a la Eq.(19) resulta

$$\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} |E|^2 = \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \omega^2 |A_1|^2 \left[a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}} + a_{\lambda \overrightarrow{k}} a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} \right]. \tag{21}$$

En realidad no encontramos nada extraordinario. En campos clasicos demostramos que, en modulo, cuadrado nos da

$$\left\langle \left| \overrightarrow{E}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) \right|^2 \right\rangle = \left\langle 4\omega^2 A_N^2 \sin^2[\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r} - \omega t + \delta_\omega] \right\rangle \Big|_{N=1} = 2\omega^2 |A_1|^2, \tag{22}$$

que es exactamente lo mismo que la Eq.(21) con $a_{\lambda \overrightarrow{k}} = 1$. Y ademas lo que incluimos como posible interferencia solo sobrevivio en el termino $\left[a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}} + a_{\lambda \overrightarrow{k}} a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} \right]$ en la ecuacion (21). Algo mas la $\Sigma_{\lambda \overrightarrow{k}}$ sale fuera del modulo y suma todas las amplitudes. No hay interferencias.

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

$$\begin{aligned}
\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} c^2 \,|B|^2 &= \int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} c^2 \left[\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \overrightarrow{B}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t)\right] \left[\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \overrightarrow{B}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t)\right]^*, \\
&= \int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} \left(\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} i\overrightarrow{k} \times \left[\overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t) - \overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda \overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}, t)\right]\right) \\
&\quad \times \left(\sum_{\lambda' \overrightarrow{k'}} -i\overrightarrow{k} \times \left[\overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda' \overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r}, t) - \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda' \overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r}, t)\right]\right),
\end{aligned} \tag{23}$$

Usando las Eqs.(19) y (20) resulta

$$\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V} c^2 \,|B|^2 = \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \underbrace{c^2 k^2}_{\omega^2} |A_1|^2 \left[a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}} + a_{\lambda \overrightarrow{k}} a^*_{\lambda \overrightarrow{k}}\right], \tag{24}$$

donde hemos usado

$$\left(\overrightarrow{k} \times \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}}\right) . \left(\overrightarrow{k} \times \widehat{\varepsilon}_{\lambda' \overrightarrow{k}}\right) = k^2 \delta_{\lambda,\ \lambda'}. \tag{25}$$

Notese el hecho que la densidad de energia magnetica Eq.(24) iguala a la electrica Eq.(21) que es algo que conocemos muy bien de los campos clasicos.

Reemplazando en Eqs.(21) y (24) en la Eq.(16) tenemos

$$\begin{aligned}
\rho &= \frac{U}{V} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \; 2\sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \omega^2 |A_1|^2 \left[a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}} + a_{\lambda \overrightarrow{k}} a^*_{\lambda \overrightarrow{k}}\right], \\
\rho &= \frac{U}{V} = \varepsilon_0 \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \omega^2 \overbrace{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega V}}^{|A_1|^2} \left[a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}} + a_{\lambda \overrightarrow{k}} a^*_{\lambda \overrightarrow{k}}\right], \\
U &= \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \hbar\omega \frac{1}{2} \left[a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}} + a_{\lambda \overrightarrow{k}} a^*_{\lambda \overrightarrow{k}}\right].
\end{aligned} \tag{26}$$

Si $a_{\lambda \overrightarrow{k}}$ y $a^*_{\lambda \overrightarrow{k}}$ son funciones, tendría derecho a escribir tambien

$$U = \sum_{\lambda \overrightarrow{k}} \hbar\omega \; a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} a_{\lambda \overrightarrow{k}}. \tag{27}$$

C. Segunda cuantificacion

La Eq.(27) tiene la forma virtuosa del oscilador. Vamos a promover las funciones a operadores,

$$\begin{aligned}
a_{\lambda \overrightarrow{k}} &\to \widehat{a}_{\lambda \overrightarrow{k}} \qquad \textbf{lowering operator}, \\
a^*_{\lambda \overrightarrow{k}} &\to \widehat{a}^\dagger_{\lambda \overrightarrow{k}} \qquad \textbf{raising operator},
\end{aligned} \tag{28}$$

y U que era una funcion ahora es un operador, que resulta ser

$$\widehat{U} = \sum_{\lambda \vec{k}} \hbar\omega \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}_{\lambda \vec{k}}, \tag{29}$$

que es equivalente al hamiltoniano del oscilador. En terminos del operador de numero $\widehat{N}_{\lambda \vec{k}} = \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}_{\lambda \vec{k}}$, es

$$\widehat{U} = \sum_{\lambda \vec{k}} \hbar\omega \widehat{N}_{\lambda \vec{k}}. \tag{30}$$

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

$$\widehat{U}|n_{\lambda_1 \vec{k}_1}, m_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle = (n\ \hbar\omega_1 + m\ \hbar\omega_2)|n_{\lambda_1 \vec{k}_1}, m_{\ \lambda_2 \vec{k}_2}\rangle. \tag{31}$$

El autovalor es la energia correspondiente a n fotones con energia $\hbar\omega_1$ mas m fotones con energia $\hbar\omega_2$. Si $n = 1$, y $m = 2$, entonces $|1_{\lambda_1 \vec{k}_1}, 2_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle$ es una abreviacion de

$$|1_{\lambda_1 \vec{k}_1}, 2_{\lambda_2 \vec{k}_2}\rangle = |\underbrace{0, 1, 0, ...}_{\lambda_1 \vec{k}_1}, \underbrace{0, 0, 1, 0}_{\lambda_2 \vec{k}_2}., ..\rangle. \tag{32}$$

Hay una duda, y es que la promocion la hicimos sobre la Eq.(27), porque no haberla hecho en la Eq.(26)? En este caso tendriamos

$$\widehat{U} = \sum_{\lambda \vec{k}} \frac{\hbar\omega}{2} \left[\widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}_{\lambda \vec{k}} + \widehat{a}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}}\right], \tag{33}$$

pero como vale que $[\widehat{a}_{\lambda \vec{k}}, \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}}] = 1$, implica que $\widehat{a}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} = \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}_{\lambda \vec{k}} + 1$, con lo que

$$\widehat{U} = \sum_{\lambda \vec{k}} \hbar\omega \left[\widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}_{\lambda \vec{k}} + \frac{1}{2}\right] = \sum_{\lambda \vec{k}} \hbar\omega \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda \vec{k}} \widehat{a}_{\lambda \vec{k}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\lambda \vec{k}} \hbar\omega}_{\omega_0}, \tag{34}$$

que es el oscilador, pero hay un termino adicional ω_0 conocido como energia del vacio o punto cero, que en ppio no habria problemas ya que generalmente se trabaja con diferencias de energia. [Ocurre que a veces que ω_0 diverge. Para resolver el problema se recurre a la renormalizacion de carga y masa (Tomonaga y Schwinger)]. Usaremos la Eq.(29).

D. El hamiltoniano

Podemos ahora incorporar directamente el campo de radiacion al Hamiltoniano y trabajar con un sistema cerrado materia-radiacion que **conserva** energia y momento asi

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A})^2 + qV + \underbrace{V\ \frac{\varepsilon_0}{2}\int_V \frac{d\overrightarrow{r}}{V}\left(|\overrightarrow{E}|^2 + c^2|\overrightarrow{B}|^2\right)^2}_{U\ =\ \sum_{\lambda\overrightarrow{k}} \hbar\omega \widehat{a}^\dagger_{\lambda\overrightarrow{k}}\widehat{a}_{\lambda\overrightarrow{k}}}, \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\overrightarrow{r}} + qV - \frac{q}{m}\overrightarrow{A}\ \underbrace{\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}_r}_{\widehat{\overrightarrow{p}}} + \frac{q^2}{2m}A^2 + U, \end{aligned} \tag{35}$$

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\overrightarrow{r}} + qV \\ &\quad -\frac{q}{m}\overbrace{\sum_{\lambda\overrightarrow{k}}\left[\overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t) + \overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t)\right]}^{\overrightarrow{A}}\ \widehat{\overrightarrow{p}} \\ &\quad +\frac{q^2}{2m}\underbrace{\sum_{\lambda\overrightarrow{k}}\left[\overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t) + \overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r},t)\right]}_{\overrightarrow{A}} \cdot \underbrace{\sum_{\lambda'\overrightarrow{k'}}\left[\overrightarrow{\mathcal{A}}^*_{\lambda'\overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r},t) + \overrightarrow{\mathcal{A}}_{\lambda'\overrightarrow{k'}}(\overrightarrow{r},t)\right]^*}_{\overrightarrow{A}^*} \\ &\quad +U. \end{aligned} \tag{36}$$

Cambiando de notacion, podemos reescribirlo de igual manera a campos clasicos

$$H = H_0 + H' + H'' + U, \tag{37}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\overrightarrow{r}} + qV, \tag{38}$$

$$H' = \sum_{\lambda\overrightarrow{k}} H^-_{\lambda\overrightarrow{k}} e^{-i\omega t} + \sum_{\lambda\overrightarrow{k}} e^{+i\omega t} H^+_{\lambda\overrightarrow{k}},, \tag{39}$$

$$\begin{aligned} H'' &= \sum_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} H^{-\ -}_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} e^{-i\omega t - i\omega' t} + \sum_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} e^{i\omega t + i\omega' t} H^{+\ +}_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}}, \\ &\quad + \sum_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} e^{-i\omega t} H^{+\ -}_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} e^{-i\omega' t} + \sum_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} e^{-i\omega t} H^{-\ +}_{\lambda\overrightarrow{k},\ \lambda'\overrightarrow{k'}} e^{-i\omega' t}, \end{aligned} \tag{40}$$

donde

$$
\begin{aligned}
H^{-}_{\lambda\vec{k}} &= \frac{q}{m}\, A_1 \;\; \widehat{\vec{p}} \;\; \widehat{a}_{\underset{\hookrightarrow}{\lambda\vec{k}}} \;\; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \;\; e^{i\vec{k}.\vec{r} \, + \, i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \,, && (41)\\
H^{+}_{\lambda\vec{k}} &= \frac{q}{m}\, A_1 \;\; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{-i\vec{k}.\vec{r} - \, i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \; \widehat{a}^{\dagger}_{\underset{\hookleftarrow}{\lambda\vec{k}}} \;\; \widehat{\vec{p}}, && (42)\\
H^{-\;\;\;-}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} &= \frac{q^2}{2m} A_1(\omega)\; A_1(\omega')\widehat{a}_{\underset{\hookrightarrow}{\lambda\vec{k}}} \; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \; \widehat{a}_{\underset{\hookrightarrow}{\lambda'\vec{k'}}} \; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}} e^{i\vec{k'}.\vec{r}}\, e^{i\delta_{\omega'}}}_{1_{\lambda'\vec{k}'}}, && (43)\\
H^{+\;\;\;+}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} &= \frac{q^2}{2m} A_1(\omega)\; A_1(\omega')\; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{-i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{-i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \widehat{a}^{\dagger}_{\underset{\hookleftarrow}{\lambda\vec{k}}} \;\; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}} e^{-i\vec{k'}.\vec{r}}\, e^{-i\delta_{\omega'}}}_{1^{*}_{\lambda'\vec{k}'}} \widehat{a}^{\dagger}_{\underset{\hookleftarrow}{\lambda'\vec{k'}}}, && (44)\\
H^{+\;\;\;-}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} &= \frac{q^2}{2m} A_1(\omega)\; A_1(\omega')\; \widehat{a}_{\underset{\hookrightarrow}{\lambda'\vec{k'}}} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}} e^{i\vec{k'}.\vec{r}}\, e^{i\delta_{\omega'}}}_{1_{\lambda'\vec{k}'}} \;\; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{-i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{-i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \widehat{a}^{\dagger}_{\underset{\hookleftarrow}{\lambda\vec{k}}}, && (45)\\
H^{-\;\;\;+}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} &= \frac{q^2}{2m} A_1(\omega)\; A_1(\omega')\;\; \widehat{a}_{\underset{\hookrightarrow}{\lambda\vec{k}}} \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} e^{+i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{+i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}} \;\; \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}} e^{-i\vec{k'}.\vec{r}}\, e^{-i\delta_{\omega'}}}_{1^{*}_{\lambda'\vec{k}'}} \widehat{a}^{\dagger}_{\underset{\hookleftarrow}{\lambda'\vec{k'}}} \; . && (46)\\
U &= \sum_{\lambda\vec{k}} \hbar\omega \; \widehat{a}^{\dagger}_{\lambda\vec{k}} \widehat{a}_{\lambda\vec{k}} && (47)
\end{aligned}
$$

La fisica de cada elemento es simple

$$
\begin{array}{ll}
H^{-}_{\lambda\vec{k}} & \text{un foton } \lambda\vec{k} \text{ del habitat se destruye} \\
H^{+}_{\lambda\vec{k}} & \text{un foton } \lambda\vec{k} \text{ se crea en el habitat} \\
H^{-\;\;\;-}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} & \text{dos fotones } \lambda\vec{k} \text{ y } \lambda'\vec{k'} \text{ del habitat se destruyen} \\
H^{+\;\;\;+}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} & \text{dos fotones } \lambda\vec{k} \text{ y } \lambda'\vec{k'} \text{ se crean en el habitat} \\
H^{+\;\;\;-}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} & \text{un foton } \lambda'\vec{k'} \text{ del habitat se destruye y un foton } \lambda\vec{k} \text{ se crea} \\
H^{-\;\;\;+}_{\lambda\vec{k},\;\lambda'\vec{k'}} & \text{un foton } \lambda'\vec{k'} \text{ se crea y un foton } \lambda\vec{k} \text{ del habitat se destruye}
\end{array}
\qquad (48)
$$

E. Time dependent Schroedinger equation (TDSE)

Vamos a concentrarnos en la **creacion de un foton:** la ganeralizacion a otros casos es directa. La solucion de la ecuacion de Schroediner $\Phi(\overrightarrow{r},t)$ satisface

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\overrightarrow{r},t) \; = \; H \; \Phi(\overrightarrow{r},t) = [H_0 + U + M] \;\; \Phi(\overrightarrow{r},t). \tag{49}$$

$$M \; = \; e^{+i\omega t} H^{+}_{\lambda \overrightarrow{k}} \tag{50}$$

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

$$\underline{\text{autofunciones de } H_0} : \tag{51}$$

$$\Psi_i(r,t) \; = \; \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar) \; \psi_i(r), \qquad\qquad H_0 \; \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r),$$

$$\Psi_f(r,t) \; = \; \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar) \; \psi_f(r), \qquad\qquad H_0 \; \psi_f(r) = \varepsilon_f \psi_f(r), \tag{52}$$

$$\underline{\text{autofunciones de } U} :$$

$$|N_i\rangle \; = \; |,,N_{i(\lambda \overrightarrow{k})},,\rangle \qquad\qquad U|N_i\rangle = N_i \hbar\omega_i |N_i\rangle, \tag{53}$$

$$|N_f\rangle \; = \; |,,N_{f(\lambda \overrightarrow{k})},,\rangle \qquad\qquad U|N_f\rangle = N_f \hbar\omega_f |N_f\rangle, \tag{54}$$

(por ahora no le pongamos la dependencia temporal

incorporacion sera evidente) (55)

$$\underline{\text{autofunciones de } H_0 + U} :$$

$$\phi_i(r,t) \; = \; \Psi_i(r,t)|N_i\rangle = \psi_i(r)|N_i\rangle \;\; \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar), \tag{56}$$

$$\phi_f(r,t) \; = \; \Psi_f(r,t)|N_f\rangle = \psi_f(r)|N_f\rangle \;\; \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar). \tag{57}$$

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

$$\Phi(\overrightarrow{r},t) \; = \; \sum_l c_l(t) \; \phi_l(r,t), \qquad \text{con las condiciones} \tag{58}$$

$$c_i(t \; = \; 0) = 1, \tag{59}$$

$$c_l(t \; = \; 0) = 0, \qquad l \neq i. \tag{60}$$

Reemplazando la Eq.(58) en la ecuacion de Schroedinger da

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_f(t) = \sum_l \langle\phi_f|M|\phi_l\rangle c_l(t). \tag{61}$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{fi}(t) = \langle \phi_f | M | \phi_i \rangle \times 1, \tag{62}$$

que se resuelve facilmente por integracion

$$\begin{aligned} a_{fi}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \ \langle \phi_f | M | \phi_i \rangle, && (63) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \left\langle \psi_f(r) N_f \right| \ e^{i\varepsilon_f t/\hbar} \ e^{+i\omega t} \ H^+_{\lambda \overrightarrow{k}} \ e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} \left| \psi_i(r) N_i \right\rangle, && (64) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt \ \exp(-i\Delta t) \langle N_f, \psi_f | H^+_{\lambda \overrightarrow{k}} | N_i, \psi_i \rangle, \quad \text{con} && (65) \\ \Delta &= \frac{\varepsilon_i}{\hbar} - \frac{\varepsilon_f}{\hbar} - \omega = \frac{\varepsilon_i - (\varepsilon_f + \hbar\omega)}{\hbar}, && (66) \end{aligned}$$

Al termino $a_{fi}(t)$ se le llama amplitud de transicion y a $W(t) = |a_{fi}(t)|^2$ la probabilidad total ya que sabemos diverge debido a que permanentemente hay transicion. Nos va a interesar como siempre la probabilidad de transicion por unidad de tiempo y por densidad de estados finales como vimos en la teoria formal de scattering dependiente del tiempo. La densidad de estados finales $d\overrightarrow{f}$, en este caso representa todos los posibles estados finales del foton. En el Apendice 1, derivamos otra vez las, la regla de ora de Fermi que nos da

$$\begin{aligned} \frac{d\ W^+_{fi}}{dt\ d\overrightarrow{f}} &= \frac{d}{dt} |a_{fi}(t)|^2, \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \delta \left[\varepsilon_i - \varepsilon_f - \hbar\omega \right] \ \left| \langle N_f, \psi_f | H^+_{\lambda \overrightarrow{k}} | N_i, \psi_i \rangle \right|^2, && (67) \end{aligned}$$

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

i) el termino $\langle N_f \psi_f | H^+_{\lambda \overrightarrow{k}} | N_i \psi_i \rangle$ es estacionario no depende del tiempo.

ii) Notar que de la Ec.(63) y (64), podriamos haber trabajado en el formalimo de interaccion (interaction picture) definiendo funciones dependiendo del tiempo

$$\begin{aligned} |N_i\rangle(t) &= \exp(-iN_i\omega t)|N_i\rangle, \\ |N_f\rangle(t) &= \exp(-iN_f\omega t)|N_f\rangle, && (68) \end{aligned}$$

luego resulta que

$$\begin{aligned}
\Phi_i(r,t) &= \psi_i(r,t)|N_i\rangle(t) = \psi_i(r)|N_i\rangle \ \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar - iN_i\omega t), \\
\Phi_f(r,t) &= \psi_f(r,t)|N_f\rangle(t) = \psi_f(r)|N_f\rangle \ \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar - iN_f\omega t). \qquad (69)
\end{aligned}$$

y finalmente usar como perturbation independiente del tiempo a $H^+_{\lambda\vec{k}}$. Hubiesemos llegado a una expresion igual a la ec. (63).

iii) la δ simplemente describe la conservacion de la energia $\varepsilon_i = \varepsilon_f + \hbar\omega$, que resulta obvio la emision de un foton con energia $\hbar\omega$.

Los otros terminos son

$$\frac{dW^-_{fi}}{dt\ d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta[\underbrace{\varepsilon_f}_{E_f} - \underbrace{\varepsilon_i + \hbar\omega}_{E_i}] \left|\langle N_f, \psi_f|H^-_{\lambda\vec{k}}|N_i, \psi_i\rangle\right|^2, \qquad (70)$$

$$\frac{dW^{+\ +}_{fi}}{dt\ d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta[\underbrace{(\varepsilon_f + \hbar\omega + \hbar\omega')}_{E_f} - \underbrace{\varepsilon_i}_{E_i}] \left|\langle N_f, N'_f, \psi_f|H^{+\ \ +}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}}|N_i, N'_i, \psi_i\rangle\right|^2, \qquad (71)$$

$$\frac{dW^{-\ -}_{fi}}{dtd\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta[\underbrace{\varepsilon_f}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega + \hbar\omega')}_{E_i}] \left|\langle N_f, N'_f, \psi_f|H^{-\ \ -}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}}|N_i, N'_i, \psi_i\rangle\right|^2, \qquad (72)$$

$$\frac{dW^{-\ +}_{fi}}{dt\ d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta[\underbrace{(\varepsilon_f + \hbar\omega)}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega')}_{E_i}] \left|\langle N_f, N'_f, \psi_f|H^{-\ \ +}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}}|N_i, N'_i, \psi_i\rangle\right|^2, \qquad (73)$$

$$\frac{dW^{+\ -}_{fi}}{dt\ d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta[\underbrace{(\varepsilon_f + \hbar\omega')}_{E_f} - \underbrace{\varepsilon_i + \hbar\omega}_{E_i}] \left|\langle N_f, N'_f, \psi_f|H^{+\ \ -}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}}|N_i, N'_i, \psi_i\rangle\right|^2, \qquad (74)$$

La lectura del argumento de la δ nos da la conservacion de energia e inmeditamente reconocemos el proceso

F. Cambio de notacion y el formalismo independiente del tiempo

Ya en el formalismo independiente del tiempo hay otra forma de notacion mas compacta De vuelta reconsideremos el elemento de matriz la **creacion de un foton** como ejemplo

$$\langle N_f, \psi_f|H^+_{\lambda\vec{k}}|N_i, \psi_i\rangle = \langle (N_f)_{\lambda\vec{k}}, \psi_f|\frac{q}{m}\ A_1\ \underbrace{\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}e^{-i\vec{k}.\vec{r} - \ i\delta_\omega}}_{1_{\lambda\vec{k}}}\widehat{a}^\dagger_{\lambda\vec{k}}\ \ \widehat{\vec{p}}|(N_i)_{\lambda\vec{k}}, \psi_i\rangle, \qquad (75)$$

Ademas sabemos que

$$\widehat{a}^\dagger_{\lambda\vec{k}}\ |(N_i)_{\lambda\vec{k}}\rangle = \ \sqrt{N_i + 1}|(N_i + 1)_{\lambda\vec{k}}\rangle, \qquad (76)$$

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

$$\begin{aligned}\sqrt{N_i+1}A_1(\omega) &= \sqrt{N_i+1}\sqrt{\frac{\hbar\times 1}{2\varepsilon_0\omega V}} = \sqrt{\frac{\hbar(N_i+1)}{2\varepsilon_0\omega V}}. \\ &= A_{N_i+1}(\omega) \end{aligned} \tag{77}$$

Usando el hecho que $\langle(N_f)_{\lambda\vec{k}}|(N_i+1)_{\lambda\vec{k}}\rangle = \delta_{N_f,N_i+1}$, entonces

$$\langle(N_i+1)_{\lambda\vec{k}},\psi_f|H^+_{\lambda\vec{k}}|(N_i)_{\lambda\vec{k}},\psi_i\rangle = \langle\psi_f|\frac{q}{m}\ A_{N_i+1}1_{\lambda\vec{k}}\ \ \widehat{\vec{p}}|\psi_i\rangle. \tag{78}$$

Aqui podemos hacer algo creativo que nos ayudara mucho a leer rapidamente los elementos de matriz. Fijemosno que el operador contiene la funcion $1_{\lambda\vec{k}}$ que, como dijimos, es la onda plana del foton con su correspondiente momento y polarizacion. Podemos pensar en incorporarla directamente al estado final estacionario asi

$$\psi_f \to \psi_f\ 1_{\lambda\vec{k}} \qquad \text{con} \quad 1_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}) = \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}e^{-i\vec{k}.\vec{r}-\ i\delta_\omega}. \tag{79}$$

Mas aun el estado inicial podemos inventarle la ausencia del foton llamando

$$\psi_i \to \psi_i \times\ 1\ = \psi_i\ 0_{\lambda\vec{k}} \qquad \text{con} \qquad 0_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}) = 1. \tag{80}$$

El $0_{\lambda\vec{k}}$ es un termino simbolico (digamos el zero foton). El elemento de matriz de **creacion de un foton** se reduce entonces a

$$\langle(N_i+1)_{\lambda\vec{k}},\psi_f|H^+_{\lambda\vec{k}}|(N_i)_{\lambda\vec{k}},\psi_i\rangle = \frac{q}{m}\ A_{N_i+1}\langle 1_{\lambda\vec{k}}\ \psi_f|\ \widehat{\vec{p}}|0_{\lambda\vec{k}}\psi_i\rangle. \tag{81}$$

Y aca hay una diferencia que es fundamental ya que aparece el termino A_{N_i+1} en lugar del A_{N_i} que da los campos clasicos. **Es una diferencia muy importante**. Que nos permitira tener radiacion espontanea en ausencia de fotones ($N_i = 0$). La clasica lo prohibia.

Con analisis similares los otros elementos de matriz, la **destruccion de un foton**

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

Para los casos en que se involucra **dos fotones** resumamos la notacion , llamemos

$$\begin{aligned}(N_f)_{\lambda'\vec{k'}} &= N'_f \quad , \qquad (N_f)_{\lambda\vec{k}} = N_f, \\ (N_i)_{\lambda'\vec{k'}} &= N'_i \quad\ \ y \qquad (N_i)_{\lambda\vec{k}} = N_i,\end{aligned}$$

y se reduce entonces a

$$\begin{aligned}
\langle N_f, N_f',\ \psi_f | H^{+\ \ +}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i',\ \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i+1}(\omega)\ A_{N_i'+1}(\omega') && (82)\\
&\quad \times\langle 1_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k'}}\ \psi_f | 0_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k'}}\ \psi_i\rangle,\\
\langle N_f, N_f',\ \psi_f | H^{-\ \ -}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i',\ \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega)\ A_{N_i'}(\omega') && (83)\\
&\quad \times\ \langle 0_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k'}} \psi_f | 1_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k'}}\ \psi_i\rangle,\\
\langle N_f, N_f',\ \psi_f | H^{-\ \ +}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i',\ \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega)\ A_{N_i'+1}(\omega') && (84)\\
&\quad \times\langle 0_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k'}}\ \ \psi_f | 1_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k'}}\ \psi_i\rangle,\\
\langle N_f, N_f',\ \psi_f | H^{+\ \ -}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i',\ \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i+1}(\omega)\ A_{N_i'}(\omega') && (85)\\
&\quad \times\langle 1_{\lambda\vec{k}} 0_{\lambda'\vec{k'}}\ \psi_f |\ 0_{\lambda\vec{k}} 1_{\lambda'\vec{k'}}\ \psi_i\rangle,
\end{aligned}$$

donde usamos la propiedad

$$\begin{aligned}
\widehat{a}_{\lambda\vec{k}}\ |(N_i)_{\lambda\vec{k}}\rangle &= \sqrt{N_i}|(N_i-1)_{\lambda\vec{k}}\rangle, \quad .\text{y} && (86)\\
\widehat{a}^{\dagger}_{\lambda\vec{k}}\ |(N_i)_{\lambda\vec{k}}\rangle &= \sqrt{N_i+1}|(N_i+1)_{\lambda\vec{k}}\rangle. && (87)
\end{aligned}$$

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 aun las expresiones llamando

$$\langle F\rangle_{fi} = \langle\psi_f|\ F|\psi_i\rangle \tag{88}$$

compactamos un poco mas las formulas (obviando la fase δ_ω)

$$\begin{aligned}
\langle N_f, \psi_f | H^{+}_{\lambda\vec{k}} | N_i, \psi_i\rangle &= \frac{q}{m}\ A_{N_i+1}\ \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \left\langle e^{-i\vec{k}.\vec{r}}\,\vec{p}\right\rangle_{fi}, && (89)\\
\langle N_f, \psi_f | H^{-}_{\lambda\vec{k}} | N_i, \psi_i\rangle &= \frac{q}{m}\ A_{N_i}\ \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \left\langle \vec{p}\,e^{i\vec{k}.\vec{r}}\right\rangle_{fi}, && (90)\\
\langle N_f, N_f', \psi_f | H^{+\ \ +}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i', \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i+1}(\omega)\ A_{N_i'+1}(\omega')\widehat{\varepsilon}^{*}_{\lambda\vec{k}} \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}}\ \left\langle e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right\rangle_{fi} && (91)\\
\langle N_f, N_f', \psi_f | H^{-\ \ -}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i', \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega)\ A_{N_i'}(\omega')\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}}\ \left\langle e^{+i\vec{k}'\cdot\vec{r}+i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right\rangle_{fi}, && (92)\\
\langle N_f, N_f',, \psi_f | H^{-\ \ +}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i', \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i}(\omega)\ A_{N_i'+1}(\omega')\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}}\ \left\langle e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\right\rangle_{fi}, && (93)\\
\langle N_f, N_f', \psi_f | H^{+\ \ -}_{\lambda\vec{k},\ \lambda'\vec{k'}} | N_i, N_i', \psi_i\rangle &= \frac{q^2}{2m} A_{N_i+1}(\omega)\ A_{N_i'}(\omega')\widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \widehat{\varepsilon}_{\lambda'\vec{k'}}\ \left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}+i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\right\rangle_{fi} && (94)
\end{aligned}$$

G. Aproximacion dipolar

Si usamos la aproximacion dipolar que consiste en hacer $k = 0$ (ver nota 10, campos clasicos), o sea

$$1_{\lambda \overrightarrow{k}} = \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \; e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r} - \; i\delta_\omega} \simeq \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} e^{- \; i\delta_\omega}. \tag{95}$$

En los casos que veremos la fase $e^{- \; i\delta_\omega}$ resulta irrelevante. Esto implica considerar al foton como una particula con energia pero no momento. Entonces las ecuaciones precedentes que involucran la **transicion de un foton** se simplifican mas aun

$$\langle N_f, \psi_f | H^{+}_{\lambda \overrightarrow{k}} | N_i, \psi_i \rangle \; = \; \frac{q}{m} \; A_{N+1} \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \;\; \langle \overrightarrow{p} \rangle_{fi} \, , \tag{96}$$

$$\langle N_f, \psi_f | H^{-}_{\lambda \overrightarrow{k}} | N_i, \psi_i \rangle \; = \; \frac{q}{m} \; A_{N_i} \; \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \;\; \langle \overrightarrow{p} \rangle_{fi} \, . \tag{97}$$

En los otros terminos que involucra transiciones de **dos fotones NO** puede hacerse la aproximacion dipolar, ya que si se lo hicise, entonces daria $\langle 0 \rangle_{fi} = \langle 1 \rangle_{fi} = 0$, por ortogonalidad.

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

En la aproximacion dipolar haciamos $k = 0$ que era equivalente a considerar al foton como una particula con energia pero sin momento. El elemento de matrix de interes es entonces

$$\langle \overrightarrow{p} \rangle_{fi} = \langle \psi_f | \; \widehat{\overrightarrow{p}} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \; \frac{\hbar}{i} \overrightarrow{\nabla} | \psi_i \rangle \qquad \textbf{VELOCIDAD.} \tag{98}$$

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

Usando la identidad demostrada en mecanica cuantica

$$\widehat{\overrightarrow{p}} = \frac{m}{i\hbar} [\overrightarrow{r}, H_0]. \tag{99}$$

Recordemos que salia haciendo

$$\begin{aligned} \frac{m}{i\hbar}[\overrightarrow{r}, H_0] \; &= \; \frac{m}{i\hbar}[\overrightarrow{r}, \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(r)] = \frac{m}{i\hbar}[\overrightarrow{r}, \frac{\widehat{p}^2}{2m}], \\ &= \; \frac{1}{2i\hbar} \left([\overrightarrow{r}, \widehat{p}]\widehat{p} + \widehat{p}[\overrightarrow{r}, \widehat{p}] \right) = \frac{1}{2i\hbar} (i\hbar\widehat{p} + i\hbar\widehat{p}) = \widehat{p}. \end{aligned} \tag{100}$$

Reemplazando la identidad (99) en la Eq.(98), resulta

$$
\begin{aligned}
\langle\vec{p}\rangle_{fi} &= \langle\psi_f|\ \frac{m}{i\hbar}[\vec{r}, H_0]|\psi_i\rangle = \frac{m}{i\hbar}\langle\psi_f|\ \vec{r}\underset{\hookrightarrow}{H_0} - \underset{\hookleftarrow}{H_0}\vec{r}|\psi_i\rangle = \\
\langle\vec{p}\rangle_{fi} &= \frac{im}{\hbar}(\varepsilon_f - \varepsilon_i)\ \langle\vec{r}\rangle_{fi} \\
\langle\vec{r}\rangle_{fi} &= \langle\psi_f|\ \vec{r}|\psi_i\rangle \qquad \textbf{LONGITUD}
\end{aligned} \tag{101}
$$

y a este termino se llama longitud. En el APPENDICE 2 continuamos con otra expresion alternativa: la fuerza.

I. PROCESOS QUE VEREMOS

Veremos los siguientes fenomenos.

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}}$.**<u>Decaimiento radiativo;</u>** los estados iniciales y finales son ligados.

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}}$. **<u>Captura radiativa;</u>** si el estado inicial es el continuo y el final un ligado.

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}}$. **<u>Bremsstrahlung;</u>** si los estados iniciales y finales son continuos.

• Elemento $H^{-}_{\lambda\vec{k}}$. **<u>Efecto fotoelectrico;</u>** si el estado inicial es ligado y el final un continuo

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}',\ \lambda\vec{k}'}{}^{-}$. **<u>Thomson scattering</u>** ; el estado inicial es ligado y el final un continuo.

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}',\ \lambda\vec{k}'}{}^{-}$. **<u>Compton scattering</u>**; el estado inicial es ligado (o continuo) y el final un continuo a energia relativistas

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}'}G_0H^{-}_{\lambda\vec{k}}$. **<u>Raman scattering</u>** el estado inicial y final ligados, generalmente sobre moleculas y con excitaciones roto-vibracionales.

• Elemento $H^{+}_{\lambda\vec{k}'}G_0H^{-}_{\lambda\vec{k}} + H^{+}_{\lambda\vec{k}',\ \lambda\vec{k}'}{}^{-}$. **<u>Rayleigh scattering,</u>** el estado inicial y final son el mismo (scattering elastico)

A todos los investigadoes se les otorgo (por alguna u otra razon) el Premio Nobel.

Einstein (PN 1921, por el efecto fotoelectrico. No por la teoria de la relatividad)

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

Compton. (P.N. 1927) americano.(dirigio el S-1, que enriquecio el uranio para el proyecto manhattan)

Raman (PN 1930) Hindu, Tamil, espero ganarlo en 1929 pero lo gano deBroglie (ya habia comprado los tickets). Su padre fue profesor de fisica y su sobrino Chandrasekar gano el nobel en 1983. Tambien publico en nature 1909 sobre acustica de instrumentos musicales hindues.

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 comite gubernamental de explosivos. Tiene un excelente libro sobre sonido

A. Hoja de ruta

Antes de comenzar a estudiar los procesos descriptos hagamos una hoja de ruta general que nos permitira atacar todos los procesos.

1i) Identificar el proceso radiativo en cuestion y determinar que elemento de matriz interviene.

$$\langle H \rangle_{if} = \langle N_f, N'_f, ...\psi_f | H^{\cdots\cdots}_{\cdots\cdots} | N_i, N'_i, ...\psi_i \rangle. \tag{102}$$

2i) Escribir la regal de oro de Fermi correpondiente.

$$\frac{d\ W^{\vdots\cdots}_{i\to f}}{dt\ d\overrightarrow{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta\left[E_i - E_f\right] \left|\langle H \rangle_{if}\right|^2. \tag{103}$$

3i) Determinar la densidad de estados finales ya sea particulas o fotones:

$$d\overrightarrow{f} = d\overrightarrow{k}_f, \qquad \text{particulas (electrones)}, \tag{104}$$

$$d\overrightarrow{f} = \sum_\lambda \frac{V}{(2\pi)^3} d\overrightarrow{k}, \qquad \text{fotones}. \tag{105}$$

4i) Integrar la conservacion de la energia de la regla de Fermi con la densidad de estados finales y asi obtener la probabilidad diferencial. si escribimos simbolicamente $d\overrightarrow{f} = f^2 df\ d\Omega_f$

$$\frac{d\ W^{\vdots\cdots}_{i\to f}}{dt} = \int d\overrightarrow{f}\ \frac{2\pi}{\hbar}\delta\left[E_i - E_f\right] \left|\langle H \rangle_{if}\right|^2 \to \frac{d\ W^{\vdots\cdots}_{i\to f}}{dt\ d\Omega_f}. \tag{106}$$

5i) Si estamos interesados en la seccion eficaz dividir la probabilidad diferencial por el flujo incidente

$$\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega_f} = \frac{\frac{d\ W^{\vdots\cdots}_{i\to f}}{dt\ d\Omega_f}}{J_{in}}, \tag{107}$$

ya sea particulas o fotones.

$$J_{in} = \frac{\hbar k_i}{(2\pi)^3 m}, \qquad \text{particulas (electrones)}, \tag{108}$$

$$J_{in} = \frac{N_{\lambda \vec{k}}}{V} c, \qquad \text{fotones.} \tag{109}$$

6i) Calcular los elementos de matriz, haciendo la aproximacion que corresponda (dipolar, onda plana, etc.) y de esta manera se llega a la seccion eficaz multiplediferencial.

7i) Si fuese necesario se integra sobre las condiciones iniciales (fase, polarizacion. energia..etc).

8i) Se va integrando la seccion eficaz diferencial para arribar a la magnitud requerida.

$$\sigma_{i\to f} = \int d\Omega_f \frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega_f} \tag{110}$$

·La ultima escala es la seccion eficaz total.$\sigma_{i\to f}$

9i) Se interpreta la Fisica involucrada en el proceso

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

Nos va a interesar como siempre la probabilidad de transicion por unidad de tiempo y por densidad de estados finales como vimos en la teoria formal de scattering dependiente del tiempo (recordar que nos concentramos en la creacion de un foton)

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}(t)|^2 = \frac{d}{dt}\left(a_{fi}^*(t) a_{fi}(t)\right), \tag{111}$$

$$= \left[\frac{d}{dt} a_{fi}(t)\right] a_{fi}^*(t) + c.c. \text{ con} \tag{112}$$

$$a_{fi}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt \ \exp(-i\Delta t)\langle N_f, \psi_f | H^+_{\lambda \vec{k}} | N_i, \psi_i\rangle, \tag{113}$$

Reemplazando, la probabilidad de transicion por unidad de tiempo es

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}|a_{fi}(t)|^2 &= .\overbrace{\left[\frac{1}{i\hbar}\exp(-i\Delta t)\langle N_f,\psi_f|H^{+}_{\lambda\vec{k}}|N_i,\psi_i\rangle,\right]}^{\frac{d}{dt}a_{fi}(t)} \\
&\quad \times\overbrace{\frac{1}{-i\hbar}\int_0^t dt\ \exp(+i\Delta t)\langle N_f,\psi_f|H^{+}_{\lambda\vec{k}}|N_i,\psi_i\rangle^*}^{a^*_{fi}(t)} + c.c. \qquad (114)\\
&= \frac{1}{\hbar^2}|\langle N_f,\psi_f|H^{+}_{\lambda\vec{k}}|N_i,\psi_i\rangle|^2\ I(t) \qquad \text{con} \qquad (115)\\
I(t) &= \exp(-i\Delta t)\int_0^t dt'\exp(+i\Delta t') + c.c. \qquad (116)
\end{aligned}
$$

Nos va a interesar hacer el limite de $I(t)$ cuando $t\to\infty$. para eso vamos a hacer alguna manipulacion no muy agradable. Hay tres formas que nos llevan a la regla de oro de Fermi. Todas hacen suposiciones. Una se ve en la teoria formal de Scattering haciendo el limite de Golberger y Gell-mann. Otra la vimos introduciendo de prepo $E\to E\pm i\epsilon$ que es equivalente a considerar un potencial que se apaga adiabaticamente. La tercera es la que vamos a ver ahora y que tambien puede ser criticada (pero es un poco mas elegante de lo que se ve en los libros elementales de cuantica)

$$
\begin{aligned}
I(t) &= \int_0^t dt'\exp[+i\Delta(t'-t)] + c.c., \qquad \text{haciendo } t''=t'-t, \qquad (117)\\
&= \int_{-t}^0 dt''\exp[+i\Delta t''] + \underbrace{\int_{-t}^0 dt''\exp[-i\Delta t'']}_{\int_0^t dt''\exp[+i\Delta t'']} = \int_{-t}^t dt''\exp[+i\Delta t''], \qquad (118)
\end{aligned}
$$

$$
\lim_{t\to\infty} I(t) \to \int_{-\infty}^{\infty} dt''\exp[+i\Delta t''] = 2\pi\ \delta(\Delta). \qquad (119)
$$

Con lo que que

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}|a_{fi}(t)|^2 &= \frac{1}{\hbar^2}|\langle N_f,\psi_f|H^{+}_{\lambda\vec{k}}|N_i,\psi_i\rangle|^2 2\pi\delta\left[\frac{\varepsilon_i-(\varepsilon_f+\hbar\omega)}{\hbar}\right] \qquad (120)\\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\left[\varepsilon_i-(\varepsilon_f+\hbar\omega)\right]|\langle N_f,\psi_f|H^{+}_{\lambda\vec{k}}|N_i,\psi_i\rangle|^2. \qquad (121)
\end{aligned}
$$

III. <u>APENDICE II</u>. OTRA FORMAS ALTERNATIVA EN LA APROXIMACION DIPOLAR: LA FUERZA

Usemos otra propiedad

$$\begin{aligned}[H_0,\widehat{p}] &= [\frac{\widehat{p}^2}{2m}+V,\widehat{p}] = [V,\widehat{p}] \\ &= V\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}V = -\frac{\hbar}{i}(\overrightarrow{\nabla}V) = \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{f} \end{aligned} \qquad (122)$$

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

$$\begin{aligned}\left\langle\overrightarrow{f}\right\rangle_{fi} &= \langle\psi_f|\ \left(-\overrightarrow{\nabla}V\right)|\psi_i\rangle = \left\langle-\overrightarrow{\nabla}V\right\rangle_{fi} \qquad \textbf{FUERZA} \qquad (123)\\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi_f|\ [H_0,\widehat{p}]|\psi_i\rangle, \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi_f|\ \underset{\leftarrow}{H_0}\ \widehat{p} - \widehat{p}\ \underset{\hookrightarrow}{H_0}\ |\psi_i\rangle = \frac{1}{i\hbar}(\varepsilon_f-\varepsilon_i)\langle\psi_f|\ \overrightarrow{p}|\psi_i\rangle, \\ \left\langle\overrightarrow{f}\right\rangle_{fi} &= \frac{1}{i\hbar}(\varepsilon_i-\varepsilon_f)\left\langle\overrightarrow{p}\right\rangle_{fi} = \frac{m}{\hbar^2}(\varepsilon_f-\varepsilon_i)^2\left\langle\overrightarrow{r}\right\rangle_{fi}. \end{aligned} \qquad (124)$$

Para el caso puramente Culombiano

$$\overrightarrow{\nabla}V = \overrightarrow{\nabla}\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} = -\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\widehat{r}}{r^2} \qquad (125)$$

Resumiendo

$$\left\langle\overrightarrow{p}\right\rangle_{fi} = \frac{im}{\hbar}(\varepsilon_f-\varepsilon_i)\left\langle\overrightarrow{r}\right\rangle_{fi} = \frac{i\hbar}{(\varepsilon_f-\varepsilon_i)}\left\langle\overrightarrow{f}\right\rangle_{fi}. \qquad (126)$$

La razon por la cual se llaman longitud, velocidad y fuerza o aceleracion parten de la siguiente analogia con la mecanica newtoniana. Defino

$$\begin{aligned}\overrightarrow{R}(t) &= \int d\overrightarrow{r}\ \exp(i\varepsilon_f t/\hbar)\ \psi_f^*(r)\ \overrightarrow{r}\ \ \exp(-i\varepsilon_f t/\hbar)\ \psi_i(r), \quad \text{entonces}, \qquad (127)\\ \overrightarrow{P}(t) &= m\overrightarrow{V}(t) = m\frac{d}{dt}\overrightarrow{R}(t) = \frac{im}{\hbar}(\varepsilon_f-\varepsilon_i)\overrightarrow{R}(t), \qquad (128)\\ \overrightarrow{F}(t) &= \frac{d}{dt}\overrightarrow{P}(t) = \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_f-\varepsilon_i)\underbrace{m\frac{d}{dt}\overrightarrow{R}(t)}_{\overrightarrow{P}(t)} = \frac{m}{\hbar^2}(\varepsilon_f-\varepsilon_i)^2\overrightarrow{R}(t), \qquad (129)\end{aligned}$$

que son las mismas relaciones

Veamos algunas observaciones:

i) Vale dentro de la aproximacion dipolar

ii) Usamos el hecho que $H_0\psi_{i,f} = \varepsilon_{i,f}\psi_{i,f}$ 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.