Guía 6: Radiación Materia

Repaso:

Una partícula de carga q y masa m en un campo electromagnético clásico: el Hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2 + qV \qquad (1)$$

donde $\vec{p}$ es el momento generalizado, $\vec{A}$ es el potencial vector ($\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$), V es el potencial escalar ($\vec{E} = -\nabla V - \partial\vec{A}/\partial t$) y los campos $\vec{B}$ y $\vec{E}$ verifican las ecuaciones de Maxwell. Este hamiltoniano es **semiclásico**, el electrón se trata cuánticamente pero $\vec{A}$ y V son clásicos. Los potenciales $\vec{A}$ y V no son únicos. Los campos $\vec{B}$ y $\vec{E}$ quedan inalterados si se cambia $\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi$ y $V \to V' = V - \frac{\partial\chi}{\partial t}$, con $\chi(\vec{r},t)$ una función arbitraria: *invariancia de gauge*. Se puede además pedir que $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, *gauge de Coulomb.* Puede demostrarse que en el gauge de Coulomb $\vec{A}$ conmuta con $\vec{p}$ y el Hamiltoniano (1) queda

$$H = \frac{p^2}{2m} + qV - \frac{q}{m\,c}\vec{A}.\vec{p} + \frac{q^2}{2mc^2}A^2 . \qquad (2)$$

Sin fuentes ni corrientes, las ecuaciones de Maxwell para la radiación electromagnética en vacío dan las ecuaciones de ondas para $\vec{E}$, $\vec{B}$, $\vec{A}$ y V. Por ejemplo, para el potencial vector queda $\nabla^2\vec{A} - \frac{1}{c^2}\partial^2\vec{A}/\partial t = 0$ cuya solución es

$$\vec{A}_{\vec{k}} = A_0\, \hat{\varepsilon}_{\vec{k}}\, \mathbf{exp}\left(i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t + i\delta\right) + \text{cc}, \qquad (3)$$

con $\vec{k}$ vector de propagación y $k = \omega / c$. La condición $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ implica $\hat{\varepsilon}_{\vec{k}} \cdot \vec{k} = 0$, es decir son ondas transversales. En realidad (3) representa una onda monocromática y linealmente polarizada, el caso más general será combinación de dos ondas linealmente polarizadas con distintas fases.

Operadores de creación y aniquilación: dadas la autofunciones del oscilador armónico unidimensional $\left|\varphi_n\right\rangle$ se sabe que $H\left|\varphi_n\right\rangle = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega\left|\varphi_n\right\rangle$, con $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}$. Definiendo los operadores $a^{\perp} = \frac{\omega x - i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar\omega}}$ y $a = \frac{\omega x + i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar\omega}}$ se puede demostrar que $\left[a, a^{\perp}\right] = 1$; $\left[a^{\perp}, a\right] = -1$, y $H = \hbar\omega\left(a^{\perp}a + 1/2\right)$. Estos operadores verifican que $a^{\perp}\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle$ y $a\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle$, y se conocen como operadores de creación y aniquilación. Es interesante definir también al operador número $\hat{N} = a^{\perp}a$ ya que $\hat{N}\left|\varphi_n\right\rangle = n\left|\varphi_n\right\rangle$.

---

1. Dada la ecuación de Schrödinger para un electrón libre en un campo electromagnético externo

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\psi - \frac{q}{mc}\vec{A}.\vec{p}\,\psi + \frac{q^2}{2mc^2}A^2\psi ,$$

donde $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, la solución puede escribirse como $\psi(\vec{r},t) = \frac{\mathbf{exp}\left(i\vec{k}.\vec{r}\right)}{(2\pi)^{3/2}} e^{-iS(t)/\hbar}$.

Esta expresión es conocida como **estados de Volkov** (quien la obtuvo en 1935) y es muy utilizada hasta el presente (scattering Compton, bremsstralung, fotoionización).

a) Halle la expresión general de S(t)

b) Calcule S(t) para luz monocromática linealmente polarizada $\vec{E}(t) = E_0 \; sen(\omega t) \; \hat{z}$

2. Los potenciales escalar y vector están definidos a menos de una función arbitaria $\chi(\vec{r},t)$. En el *gauge de Coulomb* la condición $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ equivale a $\nabla^2 \chi = 0$

a) Demuestre que si se elije $\chi = -\vec{A}\cdot\vec{r}$ y usa la aproximación dipolar ($\mathbf{exp}(i\vec{k}.\vec{r}) = 1$ y $\vec{A} = \vec{A}(t)$), entonces el Hamiltoniano de una carga en el campo de radiación queda $H = \frac{p^2}{2m} + H'$, donde $H' = -q\,\vec{r}\cdot\vec{E}$ representa la interacción radiación materia.

b) Muestre que la *invariancia de gauge* es compatible con la rotación de la función de onda: $\psi' = \psi\, e^{iq\chi/\hbar}$
Es decir, muestre que si ψ satisface la ecuación de Schrödinger con $\vec{A}$ y V entonces ψ' lo es con $\vec{A}'$ y V'.

3. Correspondencia electromagnetismo clásico-fotones: Si en cierto volumen V hay N_ω fotones de energía $\hbar\omega$, muestre que:

a) la densidad total de energía de los fotones $\rho_\omega = \frac{\hbar\omega N_\omega}{V}$ se corresponde con el valor medio temporal de la densidad de energía del electromagnetismo clásico, $\rho = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 E^2 + \frac{B^2}{\mu_0}\right)$, si $A_0^2 = \frac{\hbar N_\omega}{2\varepsilon_0 \omega V}$.

b) Y el flujo energético de fotones dado por $\hat{k}\, c\, \rho_\omega$ se corresponde con el valor medio temporal del vector de Poynting clásico $S = \frac{1}{\mu_0}\vec{E}\times\vec{B}$.

Materia-radiación, formalismo cuántico: Incorporando el campo de radiación al Hamiltoniano permite trabajar con un sistema cerrado materia-radiación que conserva la energía y el momento. El hamiltoniano es:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2 + qV + \hat{U}\,, \tag{4}$$

con $\hat{U} = \sum_{\lambda,\vec{k}} \hbar\omega\, \hat{N}_{\lambda,\vec{k}}$ donde $\hat{N}_{\lambda,\vec{k}}$ es el operador número asociado a $N_{\lambda,\vec{k}}$ fotones con su correspondiente momento $\vec{k}$ y polarización λ. El hamiltoniano (4) se puede escribir como $H = H_0 + U + H_{\mathbf{int}}$ donde $H_0 = \frac{p^2}{2m} + qV$ es el hamiltoniano de la carga q (atómicos, moleculares, puede generalizarse), $\hat{U}$ es el Hamiltoniano de los fotones y $H_{\mathbf{int}} = -\frac{q}{m}\vec{A}\cdot\vec{p} + \frac{q^2}{2m}A^2$.

El operador $\hat{U} = \sum_{\lambda,\vec{k}} \hbar\omega\, \hat{N}_{\lambda,\vec{k}} = \sum_{\lambda,\vec{k}} \hbar\omega\, a^{\perp}_{\lambda,\vec{k}}\, a_{\lambda,\vec{k}}$ actúa sobre las funciones asociadas a los fotones de manera que $\hat{U}\left|N_{\lambda,\vec{k}}\right\rangle = N_{\lambda,\vec{k}}\, \hbar\omega \left|N_{\lambda,\vec{k}}\right\rangle$, y los operadores $a^{\perp}_{\lambda,\vec{k}}$, $a_{\lambda,\vec{k}}$ son operadores de creación y destrucción con las propiedades conocidas: $a^{\perp}_{\lambda,\vec{k}}\left|N_{\lambda,\vec{k}}\right\rangle = \sqrt{N_{\lambda,\vec{k}}+1}\;\left|N_{\lambda,\vec{k}}+1\right\rangle$ y $a_{\lambda,\vec{k}}\left|N_{\lambda,\vec{k}}\right\rangle = \sqrt{N_{\lambda,\vec{k}}}\;\left|N_{\lambda,\vec{k}}-1\right\rangle$.

Dada la transición del sistema radiación-materia desde los estados i→ f, las probabilidades de transición estarán dadas por la regla de oro de Fermi

$$\frac{dW_{if}}{dt\,df} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(E_i - E_f\right)\left|\left\langle N_f\psi_f\left|H_{\mathbf{int}}\right|N_i\psi_i\right\rangle\right|^2 \qquad (5)$$

donde $\delta\left(E_i - E_f\right)$ expresa la conservación de la energía y $\left|N_j\right\rangle$, $\left|\psi_j\right\rangle$ son autoestados de U y H_0 respectivamente.

---

4. Dada la transición entre estados φ_i y φ_f, con energías ε_i y ε_f, hay ciertos elementos de matriz de interés en el cálculo de las probabilidades de transición:

i) $\left\langle\vec{p}\right\rangle_{fi} = \left\langle\varphi_f\left|\vec{p}\right|\varphi_i\right\rangle = \left\langle\varphi_f\left|-i\hbar\nabla_{\vec{r}}\right|\varphi_i\right\rangle$, momento

ii) $\left\langle\vec{r}\right\rangle_{fi} = \left\langle\varphi_f\left|\vec{r}\right|\varphi_i\right\rangle$, posición

iii) $\left\langle\vec{f}\right\rangle_{fi} = \left\langle\varphi_f\left|-\vec{\nabla}V\right|\varphi_i\right\rangle$, fuerza

Demuestre que $\left\langle\vec{f}\right\rangle_{fi} = \frac{1}{i\hbar}(\varepsilon_i - \varepsilon_f)\left\langle\vec{p}\right\rangle_{fi} = \frac{m}{\hbar^2}(\varepsilon_i - \varepsilon_f)^2\left\langle\vec{r}\right\rangle_{fi}$. Ayuda: use que $\vec{p} = im/\hbar\left[H_0,\vec{r}\right]$ y $-\nabla V = i/\hbar\left[H_0,\vec{p}\right]$.

5. Decaimiento radiativo: el átomo de hidrógeno excitado H(2p) decae espontáneamente emitiendo un fotón. Calcule la energía del fotón en la transición 2p→1s y la vida media del estado 2p del hidrógeno. Recuerde que en aproximación dipolar ($\mathbf{exp}\left(i\vec{k}.\vec{r}\right)\approx 1$, equivalente a considerar al fotón como una partícula con energía pero sin momento), la probabilidad de transición por unidad de tiempo entre dos estados ligados i-->f está dada por $P_{if} = \frac{4\,\omega_{if}{}^3}{3\hbar\,c^3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left|\left\langle\varphi_f\left|\vec{r}\right|\varphi_i\right\rangle\right|^2$, con $\omega_{if} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar}$. Y la vida media es $\tau = 1/P_{if}$.

6. Calule la vida media del estado 2p de un átomo hidrogénico y carga nuclear Z. Compruebe que la dependencia con Z es proporcional a Z^{-4}.

7. Efecto fotoeléctrico: calcule el umbral de energías del fotón para ionizar un electrón de la capa K del Ne. El Ne^+ queda en un estado excitado (con un hueco en la capa K) y decae vía decaimiento radiativo 2p→1s. Exprese la probabilidad de transición y calcule la energía del fotón emitido.

8. Oscilador strengths: dada una transición entre 2 estados con energías ε_i y ε_f, ya sea absorbiendo o emitiendo un fotón con frecuencia ω_{if}, se define la fuerza de oscilador, u oscilador strength, como $F_{if} = \frac{2m}{3\hbar}\omega_{if}\left|\left\langle\varphi_f\left|\vec{r}\right|\varphi_i\right\rangle\right|^2$. De esta manera la probabilidad de transición P_{if} será proporcional a $\omega_{if}{}^2 F_{if}$.

a) Calcule $F_{2p,3s}$ y $F_{2p,3d}$ para el átomo de hidrógeno.

b) Calcule los tiempos de vida medias de esos estados.

9. Regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn: demuestre que para un electrón en un átomo (estados inicial y finales ligados) se verifica que la suma sobre todos los estados finales es $\sum_f F_{if} = 1$