

Mecánica cuántica avanzada - Curso 2013/14 - Problemas Perturbaciones dependientes del tiempo

PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN

Problema 1. Un campo eléctrico

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\mathcal{E}_0}{\sqrt{\pi} \tau} e^{-t^2/\tau^2},$$

con \mathcal{E}_0 y τ constantes, actúa sobre un oscilador armónico unidimensional. En $t = -\infty$ el sistema se encuentra en el estado fundamental. Calcular en la aproximación de Born la probabilidad de que se encuentre en $t = +\infty$ en el primer estado excitado. Estudiar los casos particulares $\omega\tau \ll 1$ y $\omega\tau \gg 1$, donde ω denota la frecuencia del oscilador. Encontrar el rango de validez de la aproximación de Born.

Problema 2. Un campo eléctrico

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\mathcal{E}_0}{\pi} \frac{\tau}{t^2 + \tau^2},$$

con \mathcal{E}_0 y τ constantes, actúa sobre un oscilador armónico unidimensional. ¿A qué orden de teoría de perturbaciones es necesario acudir para que la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el n -ésimo estado excitado sea distinta de cero? Calcular la primera contribución no trivial a la probabilidad de transición de que el estado fundamental en $t = -\infty$ pase al segundo estado excitado en $t = +\infty$.

Solución:

$$P_{0 \rightarrow 2}^{(2)}(-\infty, +\infty) = \left(\frac{q^2 \mathcal{E}_0^2}{2\sqrt{2} \hbar m \omega} \right)^2 e^{-4\omega\tau}$$

con q , m y ω respectivamente la carga, masa y frecuencia del oscilador.

Problema 3. Sobre un átomo de hidrógeno en su estado fundamental se actúa en el instante $t = 0$ con un campo eléctrico uniforme

$$\mathcal{E}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ \mathcal{E}_0 e^{-t/\tau} & \text{si } t \geq 0 \end{cases}$$

dirigido según el eje Oz . Sabiendo que \mathcal{E}_0 y τ son constantes, calcular la probabilidad de que el átomo se encuentre en el estado $|n, l, m\rangle$ en $t = +\infty$.

Solución:

$$P_{100 \rightarrow nlm}^{(B)}(0, \infty) = \frac{1}{3} \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 |\langle n1|r|10\rangle|^2 \frac{\tau^2}{1 + \tau^2\omega_{n1}^2} \delta_{l1} \delta_{m0}.$$

Problema 4. Un átomo de hidrógeno en su estado fundamental se somete a un campo eléctrico uniforme

$$\mathcal{E}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ \frac{\mathcal{E}_0}{2\tau^2} t e^{-t/\tau} & \text{si } t \geq 0 \end{cases}$$

dirigido según el eje Ox , con \mathcal{E}_0 y τ constantes positivas. Calcular en la aproximación de Born la probabilidad de que el átomo se encuentre en el estado $|2\ell m\rangle$ en $t = \infty$. Hallar los posibles valores de ℓ y m del estado final. Encontrar los valores de \mathcal{E}_0 para los que la aproximación de Born es válida cuando τ es mucho menor que el período de las capas electrónicas del átomo.

Solución:

$$P_{100 \rightarrow 2\ell m}^{(B)}(0, \infty) = \frac{2^{12}}{3^{10}} \frac{a_0^2 e^2}{\hbar^2} \frac{\mathcal{E}_0^2}{(1 + \tau^2 \omega_{21}^2)^2} \delta_{\ell,1} \delta_{m,\pm 1} \quad \mathcal{E}_0 \ll \frac{3^5}{2^6} \frac{\hbar}{a_0 e} \approx \frac{\hbar}{a_0 e} .$$

Problema 5. Considérese un sistema formado por dos electrones en un campo magnético constante y uniforme dirigido según el eje Oz , cuyo hamiltoniano es

$$H_0 = \omega_1 S_z^{(1)} + \omega_2 S_z^{(2)} ,$$

con ω_1 y ω_2 constantes y $\mathbf{S}^{(1)}$ y $\mathbf{S}^{(2)}$ los operadores de spin de cada una de las partículas. Supóngase que se introduce una interacción

$$V(t) = a(t) \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} \quad a(t) = \frac{a_0}{\hbar^2} e^{-t^2/\tau^2} .$$

Calcular en la aproximación de Born la probabilidad de que, si el sistema se encuentra en $t = -\infty$ en el estado $|m_1, m_2\rangle = |+-\rangle$, se encuentre en $t = +\infty$ en el estado $| - + \rangle$.

Solución:

$$P_{|+-\rangle \rightarrow |-+\rangle}^{(B)}(-\infty, \infty) = \frac{\pi a_0^2 \tau^2}{4\hbar^2} e^{-\omega^2 \tau^2 / 2} \quad \omega = \omega_2 - \omega_1 .$$

Problema 6. Un electrón se mueve con velocidad constante v en la dirección del eje z . En su movimiento pasa a una distancia b de un átomo de hidrógeno que se encuentra en su estado fundamental, con cuyo electrón cortical interacciona mediante un potencial coulombiano

$$\frac{e^2}{|\mathbf{z}(t) - \mathbf{x}|} ,$$

siendo $\mathbf{z}(t)$ la trayectoria del electrón que viaja y \mathbf{x} el vector de posición del electrón del átomo. Suponiendo que el movimiento del electrón que pasa no se modifica como consecuencia de esta interacción y que el parámetro de impacto b es mucho mayor que las dimensiones características del átomo, calcular en la aproximación de Born la probabilidad de que el átomo salte al primer estado excitado.

Ayuda. Para $a > 0$, $|\arg z| < \frac{\pi}{2}$ y $\operatorname{Re}(\nu + \frac{1}{2}) > 0$, se tiene que

$$\frac{\Gamma(\nu + \frac{1}{2})(2z)^\nu}{a^\nu \Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^\infty \frac{\cos(at)}{(t^2 + z^2)^{\nu + \frac{1}{2}}} dt = K_\nu(az).$$

Problema 7. (Junio 2011) Un átomo de hidrógeno se ve sometido a una perturbación

$$V = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ f(r) \mathbf{a} \cdot \mathbf{P} & t \geq 0 \end{cases},$$

donde $r = |\mathbf{x}|$ es la distancia radial, $f(r)$ es una función que depende solamente de r y \mathbf{a} es un vector conocido.

- (i) Calcular las reglas de selección para el momento angular en la aproximación de Born para la transición $|n, \ell, m\rangle \rightarrow |n', \ell', m'\rangle$.
- (ii) ¿Es posible a este orden en teoría de perturbaciones una transición entre estados con el mismo número cuántico n ? Razonar la respuesta. En caso de serlo, calcular la probabilidad de transición en un tiempo T para $n = n' = 2$ y $\ell = 0$ y una función

$$f(r) = \frac{f_0}{r} \quad r > 0,$$

con f_0 una constante de dimensiones adecuadas.

Problema 8. (Junio 2011) Sobre un oscilador armónico unidimensional de frecuencia angular ω , que en $t_i \rightarrow -\infty$ se encuentra en el estado fundamental, actúa un campo externo cuya contribución al hamiltoniano es

$$V(x, t) = V_0 [\theta(x + vt) - \theta(x - vt)].$$

Calcular a orden más bajo en teoría de perturbaciones (Born) la probabilidad de que salte al primer estado excitado ($t_f \rightarrow \infty$).

PETURBACIONES ARMÓNICAS. INTERACCIÓN RADIACIÓN EM-MATERIA

Problema 9. Sobre un átomo de hidrógeno que se encuentra en su estado fundamental actúa un campo eléctrico $\mathbf{E}(t) = 2\epsilon_0 \cos(\omega t)$, con ϵ_0 un vector unitario y ω tal que $\omega > me^4/2\hbar^3$. Encontrar la probabilidad por unidad de tiempo de que el átomo se ionice. Suponer que la función de ondas del electrón en el estado ionizado es una onda plana.

Solución:

$$W_{\text{ion.}} = \frac{2^{10}}{3} \frac{e^2 [2\mu\hbar(\omega - \omega_0)]^{3/2}}{\mu^5 a_0^5 \omega^6} \quad \hbar\omega_0 = \text{energ. est. fundamental.}$$

Problema 10. Considérese el problema anterior. Usando la descomposición de una onda plana en ondas parciales, encontrar el momento angular del electrón en el estado ionizado y la probabilidad de ionización por unidad de tiempo. Si $\epsilon_0 = \hat{\mathbf{k}}$, calcular la probabilidad por unidad de tiempo de que la tercera componente del momento angular del electrón emitido sea

0. Calcular la probabilidad de que sea +1 si $\epsilon_0 = \hat{\mathbf{j}}$.

Solución: $w_{e^-} = 1$, $w_{\text{ion},m=0} = w_{\text{ion}}$, $w_{\text{ion},m=1} = \frac{1}{2} w_{\text{ion}}$.

Problema 11. En el estudio de las transiciones atómicas en un átomo con un electrón cortical en interacción con la radiación EM aparece el elemento de matriz

$$\langle f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P} | i \rangle ,$$

donde $|i\rangle$ y $|f\rangle$ son los estados ligados inicial y final. Para números atómicos Z pequeños es lícito desarrollar la exponencial en serie de potencias

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = 1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \frac{1}{2} (i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})^2 + \dots$$

El primer término de este desarrollo da lugar a las transiciones dipolares eléctricas, ya estudiadas en clase. Demostrar que para el segundo término se tiene

$$\begin{aligned} \langle f | (\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P}) | i \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \langle f | (\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P}) - (\mathbf{k}\cdot\mathbf{P}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{x}) | i \rangle + \frac{1}{2} \langle f | (\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P}) + (\mathbf{k}\cdot\mathbf{P}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{x}) | i \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{k} \wedge \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \langle f | \mathbf{L} | i \rangle + \frac{m}{2i\hbar} (E_f - E_i) k^i \langle f | x^i x^j - \frac{1}{3} \mathbf{x}^2 \delta^{ij} | i \rangle \epsilon^j , \end{aligned}$$

donde E_f y E_i son las energías de los estados inicial y final y \mathbf{L} es el operador momento angular orbital. El sumando que va con \mathbf{L} da lugar a las transiciones dipolares magnéticas, y el que va con el tensor $x^i x^j - \frac{1}{3} \mathbf{x}^2 \delta^{ij}$ a las cuadrupolares eléctricas. Utilizando que \mathbf{L} bajo rotaciones se comporta con $\ell = 1$, demostrar que las reglas de selección dipolares magnéticas son

$$M1 : \text{Paridad no cambia, } \Delta\ell = 0, \pm 1 \text{ (} 0 \not\rightarrow 0 \text{)} \Rightarrow \ell_i = \ell_f \neq 0 .$$

Demostrar que $x^i x^j - \frac{1}{3} \mathbf{x}^2 \delta^{ij}$ se comporta bajo rotaciones con $\ell = 2$ y usar este resultado para probar que las reglas de selección cuadrupolares eléctricas son:

$$E2 : \text{Paridad no cambia, } \Delta\ell = 0, \pm 1, \pm 2 \text{ (} 0 \not\rightarrow 0 \text{)} \Rightarrow |\ell_i - \ell_f| = 0, 2 \text{ (} 0 \not\rightarrow 0 \text{)} .$$

Problema 12.

(a) Considérense N_0 sistemas cuánticos idénticos, todos ellos en el estado $|i\rangle$. Si $N(t)$ denota el número de sistemas que en el instante t se encuentran en el estado $|i\rangle$, demostrar que

$$N(t) = N_0 e^{-\Gamma_i t/\hbar} \quad \Gamma_i = \hbar \int d\alpha w_{i \rightarrow \alpha}^{(B)} .$$

A Γ_i se le llama anchura media del estado $|i\rangle$ y $\tau_i = \hbar/\Gamma_i$ recibe el nombre de vida media del mismo.

(b) Considérese un átomo de hidrógeno en el estado $|3p\rangle$, el cual emite radiación y pasa a un estado $|f\rangle$ de menor energía. La radiación está descrita por un campo

$$\mathbf{A} = 2A_0 \boldsymbol{\epsilon} \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t) ,$$

donde A_0 es una constante y $\boldsymbol{\epsilon}$ es un vector de polarización real unitario. Suponer que la radiación se emite en forma de un fotón de momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ arbitrario. Usando la regla de oro

de Fermi, demostrar que, en la aproximación dipolar eléctrica, la probabilidad de transición del estado $|3p\rangle$ a un estado final $|f\rangle$ está dada por

$$w_{3p \rightarrow f}^{(B)} = \sum_{\text{polarizaciones}} \frac{e^2 \omega^3}{2\pi \hbar c^3} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \left| \langle f | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{x} | 3p \rangle \right|^2.$$

Probar que

$$\sum_{\text{polarizaciones}} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \epsilon^i \epsilon^j = \frac{8\pi}{3} \delta^{ij}$$

Utilizando este resultado y teniendo en cuenta que para cada \mathbf{k} hay dos polarizaciones físicas, calcular la vida media del estado $3p$ del átomo de hidrógeno.

Solución: 5.25×10^{-9} s.

Problema 13. Calcular la vida media del estado $2p$ del átomo de hidrógeno.

Solución: 1.59×10^{-9} s.

Problema 14. Considérese el nivel $3p$ del átomo de hidrógeno. Calcular la probabilidad por unidad de tiempo para transiciones dipolares magnéticas y cuadrupolares eléctricas.

Problema 15. Un electrón se mueve en un potencial armónico tridimensional isótropo

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2$$

de frecuencia ω , siendo μ la masa del electrón y r la distancia al centro de oscilación. Se desea utilizar teoría de perturbaciones dependiente del tiempo para estudiar la interacción de este sistema con la radiación electromagnética. Encontrar la condición que deben satisfacer la frecuencia ω y la masa μ para que el desarrollo multipolar sea válido. Se sabe que el estado fundamental es no degenerado y tiene energía y función de ondas

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad \psi_{100}(\mathbf{x}) = \left(\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\alpha^2 r^2/2} Y_0^0(\theta, \phi),$$

con $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ e $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ los armónicos esféricos. A su vez, el primer estado excitado tiene orden de degeneración tres y su energía y función de ondas son

$$E_1 = \frac{5}{2} \hbar \omega \quad \psi_{11m}(\mathbf{x}) = \left(\frac{8\alpha^5}{3\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} r e^{-\alpha^2 r^2/2} Y_1^m(\theta, \phi).$$

Calcular en la aproximación dipolar eléctrica la vida media del primer estado excitado. Tómese $\omega = 4.3 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$.

Solución:

$$\frac{\hbar\omega}{\mu c^2} \ll 1, \quad \tau = \frac{3}{2} \frac{\mu c^3}{e^2 \omega^2} \simeq 8.7 \times 10^{-11} \text{ s}.$$

Problema 16. (Junio 2011) Un átomo de hidrógeno experimenta una transición $3p \rightarrow 2p$ emitiendo un fotón. Indicar de que tipo de transición se trata.

Solución: [Transición cuadrupolar eléctrica.](#)

APROXIMACIÓN REPENTINA

Problema 17. Un átomo de tritio ${}^3_1\text{H}$ se encuentra en su estado fundamental ψ_{100} . En el instante $t = 0$ su carga nuclear se incrementa repentinamente en una unidad, de forma que el tritio se convierte en helio ionizado ${}^3_2\text{He}^+$. (El proceso físico que realmente tiene lugar es una desintegración beta de un neutrón en la que se produce un protón que se queda dentro del núcleo y se emiten un electrón y un antineutrino. El proceso tiene lugar en un tiempo suficientemente corto para que la aproximación repentina sea válida). Suponiendo que el tritio y el helio ionizado tienen la misma masa nuclear, encontrar la probabilidad de que el helio ionizado se encuentre en su estado fundamental.

Solución:

$$P_0 = \left| \langle \psi_{100}(Z=1) | \psi_{100}(Z=2) \rangle \right|^2 = \frac{2^9}{3^6} \approx 0.70 .$$

Problema 18. El núcleo de un átomo de hidrógeno que se encuentra en su estado fundamental experimenta durante un tiempo τ una colisión que le comunica una velocidad v . Suponiendo que $\tau \ll T$ y $\tau \ll a/v$, donde T y a son, respectivamente, del orden del período y radio típicos de las capas electrónicas del átomo, calcular la probabilidad de que el átomo después de la colisión se encuentre en su estado fundamental. Encontrar la probabilidad de que el átomo se excite o/y ionice.

Solución: La probabilidad de que permanezca en el estado fundamental es

$$P_0 = \left(1 + \frac{\mu^2 v^2 a_0^2}{4\hbar^2} \right)^{-4} ,$$

con μ la masa reducida del electrón y a_0 el radio de Bohr. La probabilidad de que se ionice o excite es $1 - P_0$.

Problema 19. Un oscilador armónico unidimensional se encuentra en su estado fundamental. En el instante $t = 0$ su centro de oscilación se desplaza instantáneamente una longitud a en el sentido positivo del eje Ox . Calcular la probabilidad de que el oscilador permanezca en el estado fundamental. Estimar para qué valores de a la aproximación repentina es aceptable.

Solución: Con $\alpha^2 = m\omega/\hbar$, se tiene

$$\text{probabilidad} = e^{-\alpha^2 a^2/2} \quad \text{validez : } \alpha^2 a^2 \ll 1 .$$

Problema 20. Una partícula de masa μ se encuentra en el estado fundamental de un pozo infinito unidimensional de anchura $2L$ centrado en $x = 0$. Sus paredes, situadas en $x = \pm L$, se

trasladan repentinamente a $x = \pm L/2$. Calcular en la aproximación repentina la probabilidad de que el sistema después del cambio se encuentre en el estado fundamental.

APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

Problema 21. Un oscilador armónico unidimensional se encuentra en su estado fundamental. Su centro de suspensión empieza a moverse lentamente en el instante $t = 0$ con velocidad constante v_0 y prosigue su movimiento hasta el instante T en el que se para, de forma que su hamiltoniano pasa a ser

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 [x - a(t)]^2 ,$$

con

$$a(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ v_0 t & \text{si } 0 < t < T \\ 0 & \text{si } T < t \end{cases} .$$

Encontrar en la aproximación adiabática la probabilidad de que el oscilador se encuentre al final del proceso en el primer estado excitado. Discutir la validez de la aproximación.

Solución:

$$\text{probabilidad} = \frac{mv_0^2}{\hbar\omega} (1 - \cos \omega T) \quad \text{validez : } v_0 \ll \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} .$$

Problema 22. Una partícula de spin $1/2$ se encuentra sometida a un campo magnético \mathbf{B} que gira con velocidad angular ω en torno al eje Oz , de forma que su hamiltoniano es

$$H = -\gamma \mathbf{B}(t) \cdot \mathbf{S} \quad \mathbf{B}(t) = \hat{\mathbf{i}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{j}} \sin \omega t ,$$

donde γ es una constante y \mathbf{S} es el operador de spin. Calcular en la aproximación adiabática la probabilidad de que al cabo de un tiempo $T = 2\pi/\omega$ la partícula se encuentre con el spin orientado en el sentido negativo del eje Ox si en $t = 0$ estaba orientado en el sentido positivo del mismo eje. Discutir la validez de la aproximación adiabática.

Solución:

$$P_{|+,x\rangle \rightarrow |-,x\rangle}(0, 2\pi/\omega) = \frac{\omega^2}{\gamma^2} \sin^2 \left(\frac{\pi\gamma}{\omega} \right) \quad \text{validez : } \omega \ll \gamma .$$

Problema 23. Calcular de forma exacta la probabilidad pedida en el problema anterior y demostrar que en el régimen adiabático ésta se reduce a la calculada en el problema anterior.

Solución:

$$P_{|+,x\rangle \rightarrow |-,x\rangle}(0, 2\pi/\omega) = \frac{\omega^2}{\omega^2 + \gamma^2} \sin^2 \left(\frac{\pi\sqrt{\omega^2 + \gamma^2}}{\omega} \right) .$$

Problema 24. Considérese el problema 18. Calcular en la aproximación adiabática la probabilidad de que, al cabo de un tiempo $T = \pi/2\omega$, la partícula se encuentre con spin orientado en el sentido negativo del eje Oy si en $t = 0$ estaba orientado en el sentido positivo del eje Ox .

Solución: El problema se resuelve análogamente al 17. La solución es:

$$P_{|+,x\rangle \rightarrow |-,y\rangle}(0, \pi/2\omega) = \frac{\omega^2}{\gamma^2} \sin^2 \left(\frac{\pi\gamma}{4\omega} \right) \quad \text{validez : } \omega \ll \gamma .$$

Problema 25. En un oscilador armónico unidimensional, la constante de recuperación $k = m\omega^2$ aumenta linealmente con el tiempo su valor, pasando en un tiempo T de un valor inicial k_0 a un valor final $4k_0$. Calcular en la aproximación adiabática la probabilidad de que el oscilador se encuentre en el tiempo $t = T$ con energía $5\hbar\omega_0$ si en $t = 0$ se encontraba en un estado de energía $\hbar\omega_0/2$. Discutir la validez de la aproximación.

Solución: Para todo T se tiene

$$P = \frac{1}{72} \left| \int_1^8 \frac{du}{u} e^{-4i\omega_0 T u/9} \right|^2 .$$

Por ser la integral absolutamente convergente,

$$P \leq \frac{1}{72} \left| \int_1^8 \frac{du}{u} \right|^2 = \frac{1}{8} (\ln 2)^2 \approx 0.06 .$$

Cuanto menor sea $\omega_0 T$, menos oscilaciones destructivas tendrán lugar en el integrando de P y más se aproximará ésta a la cota. Y al contrario, cuanto mayor sea $\omega_0 T$ más oscilaciones destructivas ocurrirán y menor será P . Ahora bien, por hipótesis, en la aproximación adiabática, el tiempo T que tarda en introducirse la perturbación es mucho mayor que el tiempo característico del sistema T_0 . En nuestro caso esto significa $T_0 = 2\pi/\omega \ll T$, o, lo que es lo mismo, $\omega_0 T \gg 1$, por lo que $P \ll 1$, quedando así justificada la validez de la aproximación. Por ejemplo, expresando la integral en términos de la función exponencial integral $Ei(z)$ y usando unas tablas o Maple para evaluar ésta, resulta que ya para $\omega_0 T = 10$ se tiene $P \approx 4 \times 10^{-4}$.