Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo

Planteamiento del problema

$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$ (conocidos)

independiente de t

Consideramos $H(t) = H_0 + W(t)$ $\quad W(t) = 0$ si $t<0$

$= H_0 + \lambda \hat{W}(t)$ $\quad \lambda \ll 1$ adimensional

En $t=0$ el sistema está en el estado $|\varphi_i\rangle$ e-vector de H_0

Buscaremos la probabilidad $\mathcal{P}_{if}(t)$ de encontrar al sistema en el estado $|\varphi_f\rangle$ e-vector de H_0 al tiempo t.
Buscamos estudiar la transición $|\varphi_i\rangle \to |\varphi_f\rangle$ causada por $W(t)$.

El sistema evoluciona de acuerdo a

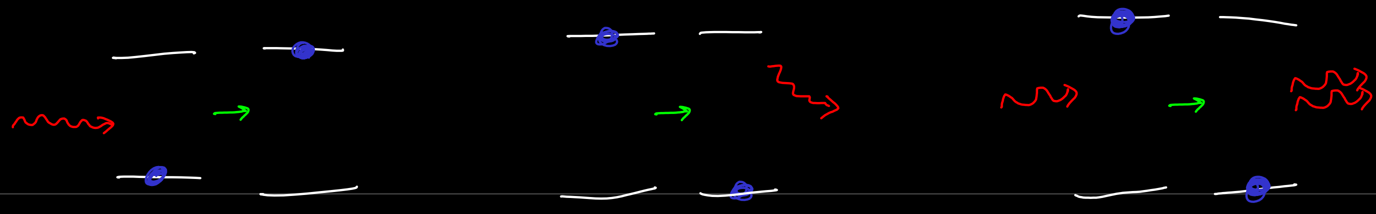
$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = [H_0 + \lambda \hat{W}(t)] |\psi(t)\rangle$$

$$\text{con} \quad |\psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle$$

Buscamos $\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t)\rangle|^2 = |\langle \varphi_f | U(t) | \varphi_i\rangle|^2$

¿Cómo encontrar $|\psi(t)\rangle$? (No siempre se puede de forma exacta).

Consideraremos dos situaciones:
1) H_0 tiene espectro discreto.
2) $|\varphi_i\rangle$ acoplado a un continuo de estados finales.



absorción   emisión espontánea   emisión estimulada

Dependiendo del tratamiento (cuántico o semi-clásico), estos procesos se pueden ver como procesos de tipo 1) o 2).

Con $\mathcal{P}_{if}(t)$ involucra $|\varphi_i\rangle$ y $|\varphi_f\rangle$. Usamos la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ para facilitarnos la vida.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\varphi_n\rangle \quad \text{con} \quad c_n(t) = \langle\varphi_n|\psi(t)\rangle$$

Proyectando

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = [H_0 + \lambda\hat{W}(t)]|\psi(t)\rangle$$

con un estado arbitrario $\langle\varphi_n|$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda \underbrace{\langle\varphi_n|\hat{W}(t)|\varphi_k\rangle}_{\hat{W}_{nk}(t)} c_k(t) \quad (1)$$

- Si no hubiera $\hat{W}(t)$, sería un conjunto de ecuaciones desacopladas. $\hat{W}(t)$ acopla las ecuaciones.

Cambio de variable (esquema de interacción).

Si no hay W. La ecuación (1) toma la forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) \longrightarrow c_n(t) = b_n e^{-iE_nt/\hbar}$$

determinado por las condiciones iniciales

Si W no es cero pero es pequeño esperaríamos que las soluciones sean similares

$$c_n(t) = b_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}$$

Al sustituir esto en (1), obtenemos

$$i\hbar e^{-iE_nt/\hbar}\frac{d}{dt}b_n(t)+\cancel{E_nb_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}}=\cancel{E_nb_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}}+\sum_k\lambda\hat{W}_{nk}(t)b_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}$$

definimos $\omega_{nk}=\frac{E_n-E_k}{\hbar}$

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n(t)=\sum_k\lambda\hat{W}_{nk}(t)b_k(t)e^{i\omega_{nk}t}\quad(2)$$

(equivalente a ecuación de Schrodinger)

Ecuaciones de perturbación.

$$b_n(t)=b_n^{(0)}(t)+\lambda b_n^{(1)}(t)+\lambda^2b_n^{(2)}(t)+\dots$$

Sustituyendo en (2) y agrupando en potencias de λ

$\lambda^0)$ $i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(0)}(t)=0 \quad\Rightarrow\quad b_n^{(0)}(t)=\text{cte}$

$\lambda^r)$ $i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(r)}(t)=\sum_k e^{i\omega_{nk}t}\hat{W}_{nk}(t)\,b_k^{(r-1)}(t)$ (relación de recurrencia $b_n^{(r)}$ de $\{b_k^{(r-1)}\}$)

A primer orden en λ

Condición inicial $|\Psi(t=0)\rangle=|\varphi_i\rangle$

$$b_n^{(0)}(t=0)=\delta_{ni}\quad\Rightarrow\quad b_n^{(0)}(t)=\delta_{ni}$$
$$b_n^{(r)}(t=0)=0$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}b_n^{(1)}(t)=\sum_k e^{i\omega_{nk}t}\hat{W}_{nk}(t)\underbrace{\delta_{ki}}_{b_k^{(0)}(t)}=e^{i\omega_{ni}t}\hat{W}_{ni}(t)$$

$$b_n^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'}\hat{W}_{ni}(t')\,dt'$$

$$\mathcal{P}_{if}(t)=|\langle\varphi_f|\Psi(t)\rangle|^2=|C_f(t)|^2=|b_f(t)|^2\approx\lambda^2|b_f^{(1)}(t)|^2$$

$C_n(t)=b_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}$

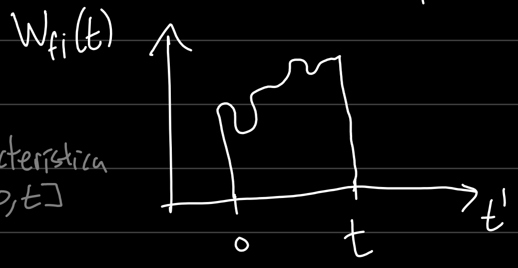
$b_f(0)=0$ empieza en estado inicial

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'}\, W_{fi}(t')\, dt'\right|^2}$$ (1er orden).

Si pensamos que W se prende en 0 y apaga en t.

$W_{fi}(t') = W_{fi}(t')\,\chi_{[0,t]}(t')$

función característica del conjunto $[0,t]$



Podemos hacer $\int_0^t \to \int_{-\infty}^{\infty}$ P_{if} es el cuadrado de la tranformada de Fourier de $W_{fi}(t)$.

Ejemplo de evolución de evolución exacta.

- Problema mas sencillo dependiente del tiempo

$$H_0 = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2\end{pmatrix} \qquad E_2 - E_1 \left\{ \begin{array}{l} \text{---}\ |2\rangle \\ \text{---}\ |1\rangle \end{array}\right.$$

$$W(t) = \hbar\Omega\left(e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1|\right) = \hbar\Omega\begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0\end{pmatrix}$$

Modela: interacción átomos-luz (semi-clásico)

Resonancia Magnética Nuclear

$W(t)$ causara transiciones $|1\rangle \rightleftarrows |2\rangle$

Condición inicial $|\psi(0)\rangle = C_1(0)|1\rangle + C_2(0)|2\rangle$

con $C_1(0) = 1$, $C_2(0) = 0$

$|\psi(0)\rangle = |1\rangle$

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_1(t) = E_1 C_1(t) + \cancelto{0}{\langle 1|W|1\rangle}\, C_1(t) + \overbrace{\langle 1|W|2\rangle}^{\hbar\Omega e^{i\omega t}}\, C_2(t)$$

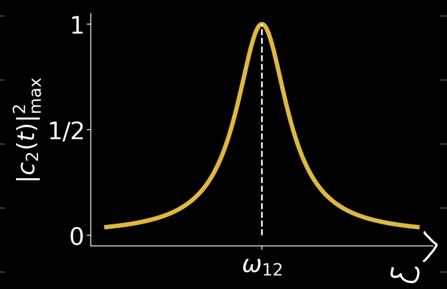
$$i\hbar\frac{d}{dt}C_2(t) = E_2 C_2(t) + \underbrace{\langle 2|W|1\rangle}_{\hbar\Omega e^{-i\omega t}}\, C_1(t) + \cancelto{0}{\langle 2|W|2\rangle}\, C_2(t)$$

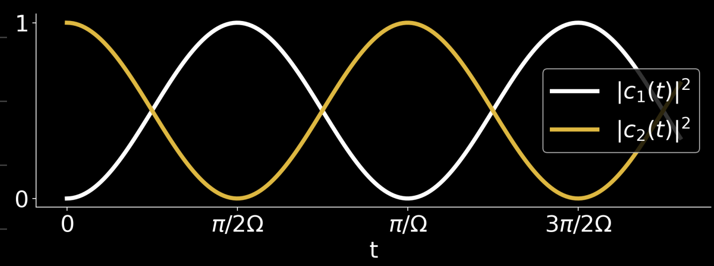
$$P_{12}(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \operatorname{sen}^2\left\{ \left[\Omega^2 + \frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\}$$

con $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$

- La solución oscila con frecuencia $\left[\Omega^2 + \frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2}$
- La amplitud de oscilación es $\frac{\Omega^2}{\Omega^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4}$

Por normalización de $|\psi(t)\rangle$, $|C_1(t)|^2 = 1 - |C_2(t)|^2$





para $\omega = \omega_{12}$