Procese QED în câmpuri laser intense
tema 17

M. Penţia

April 22, 2021

”Verbum sapienti sat est”

Cuprins

Capitol 1

Teoria perturbaţiilor in mecanica cuantică

- *Funcţia de undă plană* ca soluţie a ecuaţiei Schrödinger: de particulă liberă cu energia E_n şi impulsul $\vec{p}_n$:

$$\psi_n(x) = a_n\, e^{i(\vec{p}_n\cdot\vec{x}-E_n t)/\hbar} = c_n\, \phi_n(\vec{x})\, e^{-i\, E_n t/\hbar} \tag{1.1}$$

- Componenta independentă de timp $\phi_n(\vec{x})$, satisface ecuaţia Schrödinger staţionară:

$$\hat{H}_0\, \phi_n(\vec{x}) = E_n\, \phi_n(\vec{x}) \tag{1.2}$$

şi condiţiile de normare

$$\int_V \phi^*_m(\vec{x})\phi_n(\vec{x})\; d^3x = \delta_{mn} \quad \text{sau} \quad \langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn} \tag{1.3}$$

$\hat{H}_0$ este hamiltonianul de particulă liberă (neperturbat), independent de timp.

In absenţa perturbaţiei, evoluţia în timp a sistemului este dată de (1.1), iar probabilitatea de a găsi sistemul în starea ψ_n la un moment t ulterior este:

$$P_n(t) = |\psi_n(t)|^2 = \left|c_n\, \phi_n(\vec{x})\, e^{-iE_n t/\hbar}\right|^2 = |c_n|^2 = P_n(t_0) \tag{1.4}$$

deoarece, conform (1.3) $|\phi_n(x)|^2 = 1$.

Deci, în absenţa perturbaţiei ($V = 0$), probabilitatea de a găsi sistemul în starea $\psi_n(t)$ la momentul t este exact aceeaşi ca cea de a găsi sistemul în starea iniţială (la t_0).

- Dacă însă avem o perturbaţie ($V \neq 0$), ne aşteptăm ca $P_n(t)$ să difere, să varieze în timp, adică să avem $c_n \to c_n(t)$. Astfel, putem scrie:

$$\psi_n(t) = c_n(t)\, \phi_n(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{1.5}$$

iar *probabilitatea de ocupare a stării* ϕ_n este $P_n(t) = |c_n(t)|^2$

Aici, în dependenţa de timp, am separat oscilaţia rapidă de fază $e^{-iE_nt/\hbar}$ a stărilor proprii depinzând de hamiltonian-ul neperturbat, de variaţia lentă a amplitudinilor $c_n(t)$, care depind doar de perturbaţie (adică c_n este constanta dacă $V = 0$). De observat că stările proprii $\phi_n(\vec{x})$ din (1.5) nu depind de timp (ele sunt stările proprii (1.2) ale hamiltonian-ului neperturbat $\hat{H}_0$).

- Scopul urmărit este cel de rezolvare a *ecuaţiei Schrödinger dependente de timp* cu perturbaţia $V(\vec{x}, t)$.
$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{x}, t)\right] \psi(t) \tag{1.6}$$
pentru o particulă ce se mişcă sub influenţa unui potenţial de interacţie $V(\vec{x}, t)$.

- Soluţiile ecuaţiei (1.6) se caută sub forma unei dezvoltări după soluţiile de unde plane (de particule libere) (1.1), folosind metoda variaţiei constantelor ($c_n \to c_n(t)$), adică sub forma,
$$\psi = \sum_n c_n(t)\ \phi_n(\vec{x})\ e^{-iE_nt/\hbar} \tag{1.7}$$

- Acum, pentru a determina *amplitudinea undelor parţiale* $c_n(t)$, vom substitui (1.7) în ecuaţia Schrödinger (1.6),
$$i\hbar \sum_n \left(\frac{dc_n}{dt}\ \phi_n(\vec{x})\, e^{-i\,E_nt/\hbar} - \frac{i}{\hbar}\ \cancel{E_n}\, c_n(t)\, \phi_n(\vec{x})\ e^{-i\,E_nt/\hbar} \right)$$
$$= \left[\cancel{\hat{H}_0} + \hat{V}(\vec{x}, t)\right] \sum_n c_n(t)\, \phi_n(\vec{x})\ e^{-i\,E_nt/\hbar}$$

unde, folosind ecuaţia (1.2) $\hat{H}_0\, \phi_n(\vec{x}) = E_n\, \phi_n(\vec{x})$, obţinem
$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n}{dt}\ \phi_n(\vec{x})\ e^{-iE_nt/\hbar} = \sum_n \hat{V}(\vec{x}, t)\ c_n(t)\ \phi_n(\vec{x})\ e^{-iE_nt/\hbar}$$

- Pentru a afla toate amplitudinile necunoscute $c_m(t)$ ale undelor parţiale de particulă liberă $\phi_m(\vec{x})$ din dezvoltarea (1.7), proiectăm ecuaţia pe fiecare stare $\phi_m(\vec{x})$, adică înmulţim ecuaţia cu $\phi_m^*(\vec{x})$ şi integrăm pe volum (înmulţim la stânga cu $\langle m|$), folosind relaţia de normare (1.3) ($\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \int \phi_m^*\, \phi_n\, d^3x = \delta_{mn}$). In acest fel în membrul stâng se separă termenul cu dc_m/dt,
$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} e^{-iE_mt/\hbar} = \sum_n c_n(t) \underbrace{\int \phi_m^*(\vec{x})\, \hat{V}(\vec{x}, t)\, \phi_n(\vec{x})\ d^3x}_{V_{mn}(t)}\ e^{-iE_nt/\hbar}$$

unde elementul de matrice

$$V_{mn}(t) = \int \phi_m^*(\vec{x})\, \hat{V}(\vec{x},t)\, \phi_n(\vec{x}) \qquad \text{sau} \qquad V_{mn}(t) = \langle m|\hat{V}(\vec{x},t)|n\rangle$$

astfel obţinem următorul set de *ecuaţii diferenţiale lineare cuplate* pentru *amplitudinile parţiale* c_m:

$$\boxed{\frac{dc_m}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\sum_n c_n(t)\, V_{mn}(t)\, e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}} \tag{1.8}$$

sau dacă notăm

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

avem sistemul de ecuaţii diferenţiale cuplate (1.8) explicit sub forma

$$\begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dot{c}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & V_{13}e^{i\omega_{13}t} & \cdots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & V_{23}e^{i\omega_{23}t} & \cdots \\ V_{31}e^{i\omega_{31}t} & V_{32}e^{i\omega_{32}t} & V_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

Acesta este sistemul de bază de ecuaţii diferenţiale cuplate care trebuie rezolvat pentru a obţine probabilitatea $|c_m(t)|^2$ de a afla starea $\psi_m(\vec{x},t)$, în funcţie de t.

De remarcat că ecuaţia (1.8) este una exactă, deoarece nu am făcut nici o aproximaţie în obţinerea acesteia. Din nefericire, nu putem afla o soluţie generală a acestei ecuaţii, astfel că va trebui să apelăm la soluţii aproximative, folosind diverse dezvoltări în serie. Totuşi, pentru cazul particular al unui sistem cu două stări (adică $N = 2$), este posibil a rezolva ecuaţia (1.8) exact.

1.1 Sistem cu două stări: Soluţie exactă

Pentru cazul particular al unui sistem cu două stări care este perturbat de un câmp periodic extern $V\, e^{i\omega t}$, ecuaţia matricială de mai sus (1.9) se poate rezolva exact.

Funcţia de undă generală (1.7) pentru un sistem cu două stări este

$$\psi(t) = c_1(t)\, \phi_1(\vec{x})\, e^{-iE_1t/\hbar} + c_2(t)\, \phi_2(\vec{x})\, e^{-iE_2t/\hbar}$$

iar sistemul de ecuaţii diferenţiale (1.9) pentru amplitudinile $c_n(t)$ este,

$$\begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & V e^{i\omega t} e^{i\omega_{12}t} \\ V e^{-i\omega t} e^{-i\omega_{12}t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

Notăm $\alpha = \omega + \omega_{12}$. Atunci sistemul de două ecuaţii cuplate va fi:

$$\begin{cases} \dot{c}_1 = -\dfrac{i}{\hbar} V\, e^{i\alpha t} c_2 \\[2ex] \dot{c}_2 = -\dfrac{i}{\hbar} V\, e^{-i\alpha t} c_1 \end{cases}$$

Acest sistem de ecuaţii diferenţiale de ordin întâi se poate transforma într-o singură ecuaţie diferenţială de ordin doi dacă diferenţiem în raport cu timpul a doua ecuaţie şi înlocuim apoi $\dot{c}_1$ din prima ecuaţie, obţinem

$$\ddot{c}_2 = -i\alpha\dot{c}_2 - \frac{V^2}{\hbar^2}c_2$$

Aceasta este o ecuaţie diferenţială standard de ordin doi, care se rezolvă prin căutarea soluţiei sub forma,

$$c_2(t) = c_2(0)\, e^{i\,\Omega\, t}$$

Inlocuind în ecuaţia diferenţială de ordin doi de mai sus, obţinem

$$\Omega = -\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \frac{V^2}{\hbar^2}}$$

Revenind la variabilele iniţiale $\omega + \omega_{12} = \alpha$, avem soluţia generală,

$$c_2(t) = e^{-i\,\frac{(\omega-\omega_{21})}{2}\,t}\left(A\,e^{i\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2+\frac{V^2}{\hbar^2}}\;t} + B\,e^{-i\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2+\frac{V^2}{\hbar^2}}\;t}\right)$$

Luând condiţiile iniţiale

$$c_1(0) = 1 \qquad c_2(0) = 0$$

obţinem $A = -B$.

Pentru a determina şi constanta generală, considerăm că la $t = 0$,

$$\dot{c}_2(0) = \frac{V}{i\hbar}\,c_1(0) = \frac{V}{i\hbar}$$

Atunci, probabilitatea de ocupare a stării ”2” este

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\frac{V^2}{\hbar^2}}{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\sin^2\left(\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\,t\right)$$

Notă: pentru cazul particular $\omega = \omega_{12}$ avem

$$|c_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{V\,t}{\hbar}\right)$$

Dacă presupunem că $E_2 > E_1$ şi că sistemul a fost iniţial în starea fundamentală ϕ_1, aceasta înseamnă că după timpul $\hbar/4V$ sistemul va fi în mod cert în starea ϕ_2 şi va oscila între cele două stări cu o perioadă $\hbar/2V$.

De exemplu, un grup de molecule de amoniac (NH_3), aflate iniţial toate în starea fundamentală, după ce au fost introduse într-un câmp oscilant un timp finit, vor trece toate în starea excitată. Apoi, o nouă conectare la câmpul oscilant va conduce la dezexcitarea acestora, cu o perioadă de dezexcitarea mult mai scurtă, cu producere de radiaţie coerentă, intensă. Este vorba de emisia de radiaţie stimulată prin amplificare de microunde - Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation (MASER) pentru molecule de amoniac în câmp de microunde.

1.2 Aproximaţii succesive în calculul amplitudinii undelor parţiale

Pentru a putea determina în final probabilităţile de tranziţie între diversele stări posibile (cuantificate), va trebui să evaluăm întâi amplitudinile $c_n(t)$ ale stărilor de undă neperturbate ϕ_n: $\psi_n(t) = c_n(t)\,\phi_n(\vec{x})e^{-iE_nt/\hbar}$ (1.5) cu ajutorul cărora se exprimă apoi amplitudinea de probabilitate finală $\psi_f(t)$.

- *Probabilitatea de ocupare* a stării finale ϕ_f poate fi dezvoltată în serie perturbativă

$$P_f(t) = |c_f(t)|^2 = \left|\delta_{ni} + c_f^{(1)} + c_f^{(2)} + \dots\right|^2 \tag{1.11}$$

De notat, că prin ridicarea la pătrat apar şi termeni încrucişaţi, adică avem interferenţă între amplitudinile de diferite ordine.

- Presupunem că starea finală diferă de cea iniţială, de aceea studiem cazurile în care $f \neq i$, astfel că primul termen din relaţia (1.11) se anulează. Mai mult, dacă lucrăm doar în prima aproximaţie $P_f(t) = \left|c_f^{(1)}(t)\right|^2$.

Pentru evaluarea termenilor din dezvoltarea (1.11) folosim *metoda aproximaţiilor succesive*.

1.2.1 Starea iniţială - una din stările neperturbate de undă plană

Soluţiile în aproximaţia de ordin zero

Pentru integrarea ecuaţiei (1.8) folosim diverse condiţii iniţiale.

- Una din cele mai des întâlnite situaţii este cea conform căreia la momentul $t = t_0$, *înainte ca potenţialul $\hat{V}$ să intre în acţiune*, particula era într-una din stările neperturbate $\psi_i(x)$ de undă plană (1.1) cu soluţia $\phi_i(\vec{x})$ a hamiltonianului neperturbat (1.2), de aceea avem,

$$\begin{cases} c_i^{(0)}(t_0) = 1 \\ c_n^{(0)}(t_0) = 0 \quad \text{pentru} \quad n \neq i \end{cases} \tag{1.12}$$

- In absenţa perturbaţiilor are loc propagarea liberă a fiecărei unde plane conform (1.1). Astfel cunoscând evoluţia în timp a amplitudinii de probabilitate, putem scrie amplitudinea la un moment t ca fiind:

$$\boxed{c_n^{(0)}(t) = c_i^{(0)}(t_0) = \delta_{in}} \tag{1.13}$$

şi constituie soluţia de amplitudini parţiale în aproximaţia de ordin zero.

Soluţiile în aproximaţia de ordin întâi

Introducând acum soluţia din aproximaţia de ordin zero (1.13) în ecuaţia noastră (1.8), se separă doar termenul cu $n = i$, iar ecuaţia pentru amplitudinea de probabilitate $c_n^{(1)}$ în primă aproximaţie, devine:

$$\frac{dc_n^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\, c_i^{(0)}(t) V_{ni}(t)\, e^{i(E_n - E_i)t/\hbar} \tag{1.14}$$

sau explicit

$$\frac{dc_n^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\, c_i^{(0)}(t) \overbrace{\int \phi_n^*(\vec{x})\, \hat{V}(\vec{x},t)\, \phi_i(\vec{x})\, d^3x}^{V_{ni}(t)}\; e^{i(E_n - E_i)t/\hbar}$$

care prin integrare ne dă amplitudinea $c_n^{(1)}(t)$ în aproximaţia de ordin întâi.

Am văzut că în absenţa perturbaţiei (aproximaţia de ordin zero), (1.4) că probabilitatea de a găsi sistemul într-una din stările posibile $\phi_n(t)$ la momentul t este egală cu cea de a găsi sistemul în starea ϕ_i la momentul iniţial t_0, astfel din (1.13), pentru $n = i$, avem $c_i^{(0)}(t) = c_i^{(0)}(t_0) = 1$.

- In prezenţa perturbaţiei, prin integrarea ecuaţiei (1.14), cu $c_i^{(0)}(t) = 1$, obţinem amplitudinea stării finale ψ_n în aproximaţia de ordin întâi,

$$\boxed{c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} V_{ni}(t')\; e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar} dt'} \tag{1.15}$$

SAU

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \overbrace{\int \phi_n^*(\vec{x})\, \hat{V}(\vec{x},t')\, \phi_i(\vec{x})\, d^3x}^{V_{ni}(t')}\; e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar}\, dt' \tag{1.16}$$

SAU

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \langle n|\hat{V}(\vec{x},t')|i\rangle\, e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar}\, dt' \tag{1.17}$$

SAU

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \int \underbrace{\left[\phi_n(\vec{x})\, e^{-iE_n t'/\hbar}\right]^*}_{\psi_n^*(x)} \hat{V}(\vec{x},t')\; \underbrace{\left[\phi_i(\vec{x})\, e^{-iE_i t'/\hbar}\right]}_{\psi_i(x)} d^3x\, dt' \tag{1.18}$$

SAU sub formă invariantă, 4-dimensională

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int \psi_n^*(x)\, \hat{V}(x)\, \psi_i(x)\, d^4x \tag{1.19}$$

1.2.2 Starea iniţială - superpoziţie de stări neperturbate de undă plană

- In cazul în care folosim alte condiţii iniţiale, pentru integrarea ecuaţiei diferenţiale (1.8) $\frac{dc_n^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\sum_i c_i^{(0)}(t)\, V_{ni}(t)\, e^{i(E_n-E_i)t/\hbar}$ va trebui să luăm în considerare superpoziţia tuturor amplitudinilor undelor parţiale $c_i^{(0)}(t)$, astfel că soluţia generală pentru *amplitudinea de tranziţie* $c_n^{(1)}(t)$ în starea finală ψ_n, va fi integrala după toate amplitudinile iniţiale $c_i^{(0)}$, similar cu (1.15), adică

$$\boxed{c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_i \int_{t_0}^{t} c_i^{(0)}(t')\; V_{ni}(t')\; e^{i(E_n-E_i)t'/\hbar} dt'} \tag{1.20}$$

Soluţiile în aproximaţia de ordin doi

Similar cu cazul anterior, *amplitudinea în aproximaţia de ordin doi* $c_f^{(2)}(t)$, se exprimă prin soluţia generală (1.20) cu ajutorul soluţiei din aproximaţia anterioară $c_n^{(1)}(t)$ (1.15), adică

$$c_f^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_n \int_{t_0}^{t} c_n^{(1)}(t')\; V_{fn}(t')\; e^{i(E_f-E_n)t'/\hbar} dt' \tag{1.21}$$

In cazul cu o singură stare iniţială $c_i^{(0)}(t) = 1$, cu ajutorul soluţiei (1.20) din aproximaţia întâi, (1.21) devine,

$$\boxed{\begin{aligned} c_f^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{t_0}^{t} & \overbrace{\int_{t_0}^{t'} V_{ni}(t'')\, e^{i(E_n-E_i)t''/\hbar} dt''}^{c_n^{(1)}(t')} \times \\ & \times V_{fn}(t') e^{i(E_f-E_n)t'/\hbar}\; dt' \end{aligned}} \tag{1.22}$$

- Până acum am considerat doar o singură stare iniţială $\phi_i(\vec{x})$ de amplitudine nenulă (1.12), drept condiţie iniţială în integrarea sistemului de ecuaţii diferenţiale (1.8). Evident, putem îmbunătăţi aproximaţia de ordin întâi (1.15) prin înlocuirea în (1.20) $c_i^{(0)}(t)$ cu $c_n^{(1)}(t)$ în membrul drept al ecuaţiei (1.8), adică

$$T_{fi} \equiv \frac{dc_f^{(2)}}{dt} = \cdots + (-i)^2 \left[\sum_{n\neq i} V_{ni} \overbrace{\int_{t_0}^{t} e^{i(E_n-E_i)t'}\; dt'}^{c_n^{(1)}(t)} \right] V_{fn}\; e^{i(E_f-E_n)t} \tag{1.23}$$

unde punctele ... reprezintă aproximaţia de ordin întâi (1.15), ce conduce la probabilitatea de tranziţie T_{fi} în această aproximaţie. Acum, corecţia pentru T_{fi} este:

$$T_{fi} = \cdots - \sum_{n \neq i} V_{fn} V_{ni} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_f - E_n)t}\, dt \int_{-\infty}^{t} e^{i(E_n - E_i)t'}\, dt'$$

- Pentru a face ca integrala după dt' să aibe sens fizic, trebuie să introducem un nou termen în exponent, sub forma unei mărimi mici pozitive ϵ, pe care apoi o facem să tindă la zero, după integrare

$$\int_{-\infty}^{t} e^{i(E_n - E_i - i\epsilon)t'}\, dt' = i\, \frac{e^{i(E_n - E_i - i\epsilon)t}}{E_i - E_n + i\epsilon}$$

Astfel, folosind $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_f - E_n)t} e^{i(E_n - E_i)t} dt = 2\pi\delta(E_f - E_i)$

corecţiile de ordin doi pentru T_{fi} vor fi

$$T_{fi} = \cdots - 2\pi i \sum_{n \neq i} \frac{V_{fn} V_{ni}}{E_i - E_n + i\epsilon} \delta(E_f - E_i) \tag{1.24}$$

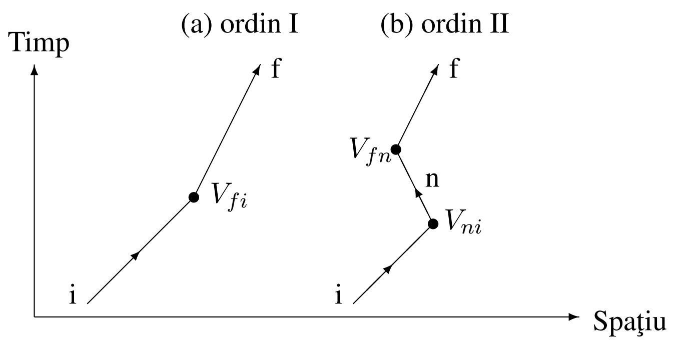

Figura 1.1: Contribuţiile de ordin I şi II la tranziţia $i \to f$

- Rata tranziţiei $i \to f$ în aproximaţia de ordin doi se obţine prin înlocuirea

$$V_{fi} \to V_{fi} + \sum_{n \neq i} V_{fn} \frac{1}{E_i - E_n + i\epsilon} V_{ni} + \ldots \tag{1.25}$$

Similar se obţin corecţiile de ordin superior.

$$\sum_{\substack{n \neq i \\ m \neq n}} V_{fn} \frac{1}{E_m - E_n + i\epsilon} V_{nm} \frac{1}{E_i - E_m + i\epsilon} V_{mi}$$

- Ecuaţia (1.25) reprezintă dezvoltarea amplitudinii în serie de perturbaţii, cu termeni de ordin întâi, doi, $\ldots$, în V. *Diagramele Feynman* din Figura 1.1 reprezintă primii doi termeni din seria de perturbaţii nerelativiste.
- Pentru fiecare vertex de interacţie, avem un factor V_{ni}, şi pentru propagarea fiecărei stări intermediare, avem un factor de "propagare" $1/(E_i - E_n)$. Stările intermediare sunt "virtuale", în sensul că energia nu se conservă, $E_n \neq E_i$, însă avem evident o conservare a energiei între stările iniţiale şi cele finale, $E_f = E_i$, după cum indică funcţia delta $\delta(E_f - E_i)$. Problema centrală este generalizarea acestei scheme pentru a putea descrie şi particulele relativiste, inclusiv antiparticulele.