Pauta Control 1 (P1)

P1| Idea conceptual: el electrón ingresa en el estado ϕ_{100}, autoestado del Hamiltoniano H_0. Una vez adentro, ϕ_{100} no es autoestado del nuevo Hamiltoniano $H = H_0 + H'$ ⇒ el estado va a evolucionar en el tiempo, es una superposición de autoestados de H. Al salir el estado será una superposición de $\phi_{n\ell m}$, y queremos ver la probabilidad que $n=2$.

Dentro del condensador, $H' = -eEz$, y $\boxed{|\Psi(t)\rangle = \sum a_n e^{-iE_nt/\hbar}|\varphi_n\rangle, \quad H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle}$

Sabemos que $H_0|\phi_{n\ell m}\rangle = E_n^0|\phi_{n\ell m}\rangle$, y suponemos que el espacio de Hilbert no cambia al agregar H' ⇒ los $|\phi_{n\ell m}\rangle$ forman una base completa ⇒ $\boxed{|\varphi_n\rangle = \sum_{k\ell m} b^n_{k\ell m}|\phi_{k\ell m}\rangle \cdot \overset{\text{normalización}}{N}}$

Tenemos que el electrón sale en $T = L/v$, entonces queremos calcular, a 1er orden en teoría de perturbaciones, $P \equiv |\langle\phi_{200}|\Psi(T)\rangle|^2 + |\langle\phi_{211}|\Psi(T)\rangle|^2 + |\langle\phi_{21-1}|\Psi(T)\rangle|^2 + |\langle\phi_{210}|\Psi(T)\rangle|^2$

⇒ En la expansión para $\Psi(T)$, solo nos van a interesar los estados con $\phi_{2\ell m}$.

Sabemos que $|\Psi(0)\rangle = |\phi_{100}\rangle$ ⇒ $\boxed{a_n = \langle\varphi_n|\phi_{100}\rangle}$

Si no hay perturbación, $|\varphi_1\rangle = |\phi_{100}\rangle$. Para $O(1)$, tenemos

$$\boxed{|\varphi_1\rangle = \Big(|\phi_{100}\rangle + \underbrace{\sum_{\substack{k\ell m\\ \neq 100}} b^1_{k\ell m}|\phi_{k\ell m}\rangle}_{\text{corrección } O(1)}\Big) N} \quad \Rightarrow \quad a_1 = N$$

Para encontrar $|\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle$, etc. es más complicado por la degeneración. Para encontrar las correcciones a los estados con $n=2$, hay que diagonalizar la matriz $M = \langle 2\ell m|H'|2\ell' m'\rangle$, con notación $|n\ell m\rangle = |\phi_{n\ell m}\rangle$.

$M = \int \phi^*_{2\ell m}(-eEz)\,\phi_{2\ell'm'}\,dV$. $\phi_{n\ell m} \sim Y_\ell^m$, que tiene paridad $(-1)^\ell$. z tiene paridad -1 ⇒ $\phi^*_{2\ell m}\, z\, \phi_{2\ell'm'}$ tiene paridad $(-1)^{\ell+\ell'+1}$ ⇒ si $\ell+\ell'$ es par, el elemento de M se anula. Esto ocurre para $\ell=\ell'$ aquí. Además, $Y_\ell^m \sim e^{im\phi}$, y $\int_0^{2\pi} e^{im\phi}\,d\phi = 0$

En M aparece $\int e^{i(m'-m)\phi}\,d\phi$ ⇒ se anula para $m \neq m'$.

$$\Rightarrow M = \begin{array}{c|cccc} \ell,m & 0,0 & 1,-1 & 1,0 & 1,1 \\ \hline 0,0 & 0 & 0 & I & 0 \\ 1,-1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,0 & I & 0 & 0 & 0 \\ 1,1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

con $I = -eE\int \phi^*_{210}\, z\, \phi_{200}\,dV$

El orden que escogimos es arbitrario. Es equivalente considerar

$$M = \begin{array}{c|cccc} & 0,0 & 1,0 & 1,-1 & 1,1 \\ \hline 0,0 & 0 & I & 0 & 0 \\ 1,0 & I & 0 & 0 & 0 \\ 1,-1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1,1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

⇒ De aquí vemos que dos "buenos" vectores que diagonalizan la matriz son ϕ_{21-1} y ϕ_{211}

⇒ Podemos usar $\boxed{|\varphi_2\rangle = |\phi_{211}\rangle}$, $\boxed{|\varphi_3\rangle = |\phi_{21-1}\rangle}$ a $O(0)$.

(No voy a $O(1)$ por algo que comento después)

$O(1)$ Con $\boxed{E_2 = E_3 = E_2^0}$

Para los otros estados es un poco más complicado. Consideramos la matriz

$$\tilde{\mathcal{M}} = \begin{array}{c|cc} & 0,0 & 1,0 \\ \hline 0,0 & 0 & I \\ 1,0 & I & 0 \end{array}$$

Autovalores salen con $\lambda^2 - I^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm I$

$\Rightarrow$ obtenemos las energías $\boxed{E_4 = E_2^0 - I,\ E_5 = E_2^0 + I}$ (a $\mathcal{O}(1)$)

(es raro que $E_4 < E_3, E_2$. Perdón por la mala notación.) Autoestados:

$$\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm I \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{array}{l} b = a \ \text{ para } + \\ b = -a \ \text{ para } - \end{array} \Bigg\} \boxed{\begin{array}{l} |\varphi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_{200}\rangle - |\phi_{210}\rangle\right) \\ |\varphi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_{200}\rangle + |\phi_{210}\rangle\right) \end{array}}$$

también a $\mathcal{O}(0)$.

Nos interesa ahora encontrar $a_2, \ldots, a_5$ en la sumatoria $|\Psi(t)\rangle = \sum a_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle$.

Pero a $\mathcal{O}(0)$, $a_n = 0\ \forall n \neq 1$! Por esto es necesario ir a un orden mayor.

Por ejemplo, $|\varphi_2\rangle = \Big(|\phi_{211}\rangle + \underbrace{\sum_{\substack{klm \\ \neq 211}} b^2_{klm} |\phi_{klm}\rangle}_{\mathcal{O}(1)}\Big) N$ Pero para a_2, lo único que importa es la parte con $|\phi_{100}\rangle$!

$|\varphi_2\rangle = \left(|\phi_{211}\rangle + b^2_{100}|\phi_{100}\rangle + \ldots\right) N$. De esta forma, vemos que

$a_2 = b^2_{100} N, \ldots, a_5 = b^5_{100} N$, todos de $\mathcal{O}(1)$. Entonces hasta ahora tenemos

$$\boxed{|\Psi(t)\rangle = N \left\{ e^{-iE_1 t/\hbar} \sum_{\substack{n=2 \\ lm}} |\phi_{2lm}\rangle b^1_{2lm} + e^{-iE_2 t/\hbar} b^2_{100} |\phi_{211}\rangle + \ldots + e^{-iE_5 t/\hbar} b^5_{100} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left(|\phi_{200}\rangle + |\phi_{210}\rangle\right) \right\} + \ldots}$$

No es difícil convencerse que las únicas contribuciones $\mathcal{O}(1)$ a $\langle \phi_{2lm} | \Psi(t)\rangle$ vienen del término en paréntesis*. Entonces solo nos falta encontrar los b. Para esto recurrimos a la ec. de Schridinger. Notación: $|\varphi_n\rangle = |\varphi_n^0\rangle + |\varphi_n^1\rangle$, con solo los términos $\mathcal{O}(0)$ y $\mathcal{O}(1)$. Consideramos la parte $\mathcal{O}(1)$ de $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$, i.e., miramos $H_0|\varphi_n^1\rangle + H^1|\varphi_n^0\rangle = E_n^0|\varphi_n^1\rangle + E_n^1|\varphi_n^0\rangle$. Aplicamos esto a $|\varphi_1\rangle = \Big(|\phi_{100}\rangle + \sum_{\substack{nlm \\ \neq 100}} b^1_{nlm}|\phi_{nlm}\rangle\Big) N$

y tomamos corchete con $\langle \phi_{2lm}|$. $\Rightarrow b^1_{2lm} E_2^0 + \langle \phi_{2lm}|H^1|\varphi_1^0\rangle$ en lado izq, y en lado derecho $E_1^0 \cdot b^1_{2lm} + E_1^1 \cdot 0 \Rightarrow$ $\boxed{b^1_{2lm} = \frac{\langle \phi_{2lm}|H^1|\varphi^0\rangle}{E_1^0 - E_2^0} = \frac{\langle \phi_{2lm}|H^1|\phi_{100}\rangle}{E_1^0 - E_2^0}}$, lo calculamos en un momento.

Análogamente, podemos aplicarlo para $n = 2, \ldots, 5$ y tomar $\langle \phi_{100}|$. Con eso llegamos a

$\boxed{b^n_{100} = \frac{\langle \phi_{100}|H^1|\varphi_n^0\rangle}{E_n^0 - E_1^0}}$. Por ejemplo, $b^5_{100} = \frac{\langle \phi_{100}|H^1|\left(|\phi_{200}\rangle + |\phi_{210}\rangle\right)}{E_2^0 - E_1^0} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$. Ahora calculamos $\langle \phi_{2lm}|\Psi(t)\rangle$

$l=m=0 \,|\, \langle \phi_{200}|\Psi(t)\rangle = N\left\{ e^{-iE_1 t/\hbar} b^1_{200} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_4 t/\hbar} b^4_{100} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_5 t/\hbar} b^5_{100} \right\}$

Por propiedades de paridad es fácil ver que $b^1_{200} = 0$, entonces

$\langle \phi_{200}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} N \left\{ e^{-iE_4 t/\hbar} b^4_{100} + e^{-iE_5 t/\hbar} b^5_{100} \right\}$.

$l=1, m=0 \,|\, \langle \phi_{210}|\Psi(t)\rangle = N\left\{ b^1_{210} e^{-iE_1 t/\hbar} - \frac{1}{\sqrt{2}} b^4_{100} e^{-iE_4 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} b^5_{100} e^{-iE_5 t/\hbar} \right\}$

$l=1, m=-1 \,|\, \langle \phi_{21-1}|\Psi(t)\rangle = N\left\{ b^1_{21-1} e^{-iE_1 t/\hbar} + b^3_{100} e^{-iE_3 t/\hbar} \right\}$

$l=1, m=1 \,|\, \langle \phi_{211}|\Psi(t)\rangle = N\left\{ b^1_{211} e^{-iE_1 t/\hbar} + b^2_{100} e^{-iE_2 t/\hbar} \right\}$

En lo que sigue desarrollamos todo explícitamente.

* $|\varphi_1\rangle$ contribuye $\mathcal{O}(1)$ porque a_1 es $\mathcal{O}(0)$ pero b^1_{2lm} son $\mathcal{O}(1)$.
$|\varphi_2\rangle, \ldots |\varphi_5\rangle$ contribuyen $\mathcal{O}(1)$ porque $a_2, \ldots, a_5$ son $\mathcal{O}(1)$ pero sus $|\phi_2\rangle$ no tienen b's multiplicando.
$|\varphi_6\rangle, \ldots$ son $\mathcal{O}(2)$ porque $a_6, \ldots$ son $\mathcal{O}(1)$, y los $|\phi_2\rangle$ van multiplicados por b's, que son $\mathcal{O}(1)$.

Recordamos que por argumentos de simetría, $\langle\phi_{100}|H'|\phi_{200}\rangle = 0 \Rightarrow b^4_{100} = \frac{-\langle\phi_{100}|H'|\phi_{210}\rangle}{\sqrt{2}(E_2^0-E_1^0)} = -b^5_{100}$

$$\Rightarrow \langle\phi_{200}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathcal{N} b^4_{100}\left\{e^{-iE_4t/\hbar} - e^{-iE_5t/\hbar}\right\} = \frac{e^{-iE_2^0t/\hbar}}{\sqrt{2}}\mathcal{N} b^4_{100}\cdot 2i\sin\left(\frac{It}{\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow |\langle\phi_{200}|\Psi(t)\rangle|^2 = 2\mathcal{N}^2 (b^4_{100})^2\sin^2(It/\hbar)$$

Recordar Hermiticidad

$b^1_{210} \sim \langle\phi_{210}|H'|\phi_{100}\rangle$. Vemos que $b^1_{210} = \frac{\langle\phi_{210}|H'|\phi_{100}\rangle}{E_1^0-E_2^0} = \sqrt{2}\, b^4_{100}$

$$\Rightarrow \langle\phi_{210}|\Psi(t)\rangle = \mathcal{N}\left\{b^4_{100}\right\}\left\{\sqrt{2}e^{-iE_1t/\hbar} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_4t/\hbar} + e^{-iE_5t/\hbar}\right)\right\} = \sqrt{2}\mathcal{N} b^4_{100}\left(e^{-iE_1t/\hbar} - e^{-iE_2^0t/\hbar}\cos(It/\hbar)\right)$$

$$\Rightarrow |\langle\phi_{210}|\Psi(t)\rangle|^2 = 2\mathcal{N}^2(b^4_{100})^2\left(1+\cos^2(It/\hbar) - 2\cos(It/\hbar)\cos\left(\frac{E_1-E_2^0}{\hbar}t\right)\right)$$

Por último, notamos que $b^2_{100} = b^3_{100} = 0$ por la propiedad de $[m\neq m' \Rightarrow \langle H'\rangle = 0]$ para esta perturbación. Análogamente, $b^1_{211} = b^1_{21-1} = 0$ por la misma razón $\Rightarrow$ los últimos dos términos no contribuyen.

$$\Rightarrow \mathbb{P} = 2\mathcal{N}^2(b^4_{100})^2\left[2 - 2\cos\left(\frac{It}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{E_1-E_2^0}{\hbar}t\right)\right].$$ (Evaluado en $t=T$)

$$= 2\mathcal{N}^2(b^4_{100})^2\left[2 - \left(\cos\left(\frac{I+E_1-E_2^0}{\hbar}t\right) + \cos\left(\frac{I-E_1+E_2^0}{\hbar}t\right)\right)\right]$$

Aproximamos $\mathcal{N}^2 \simeq 1$ porque cualquier corrección es $\mathcal{O}(1)$ o mayor y es despreciable en nuestra aproximación. Ahora hay que calcular integrales:

$$I = -eE\int \phi^*_{210}\, z\, \phi_{200}\, dV = -eE\cdot\frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\cdot\frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\int\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/a_0}\cdot r\cos\theta\cdot\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta\, r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

$$= \frac{-eE}{16\pi a_0^3}\cdot 2\pi\left[\int_0^\pi \cos^2\theta\sin\theta\, d\theta\right]\left[\int_0^\infty e^{-3r/2a_0}\left(\frac{r^4}{a_0} - \frac{r^5}{2a_0^2}\right)dr\right] = \frac{-eE}{8a_0^3}\left(\frac{2}{3}\right)\int_0^\infty e^{-3r/2a_0}\left(\frac{r^4}{a_0} - \frac{r^5}{2a_0^2}\right)dr$$

Cambio de variables $x = 3r/2a_0$, $r = 2a_0x/3 \Rightarrow I = \frac{-eE}{12a_0^3}\int_0^\infty e^{-x}\left(\frac{16}{81}a_0^3x^4 - \frac{16}{243}a_0^3x^5\right)\frac{2a_0}{3}dx$

$I = \frac{-eE}{12}\left[\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_0\int_0^\infty x^4e^{-x} - \frac{1}{3}x^5e^{-x}\, dx\right] = \frac{-eEa_0}{12}\cdot\left(\frac{2}{3}\right)^5\left(4! - \frac{1}{3}5!\right)$. Aquí me doy cuenta que había un error de tipeo en el enunciado; $\phi_{200}\sim e^{-r/2a_0}$ (no e^{-r/a_0}). Corrigiendo eso, $I = +3eEa_0$.

$$b^4_{100} = \frac{1}{\sqrt{2}(E_2^0-E_1^0)}\cdot eE\int\phi^*_{100}\, z\, \phi_{210}\, dV = \frac{eE}{\sqrt{2}(E_2^0-E_1^0)}\int\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\cdot\frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}\cdot r\cos^2\theta\cdot\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

$$= \frac{2\pi eE}{8\pi a_0^3(E_2^0-E_1^0)}\cdot\frac{2}{3}\int_0^\infty\frac{r^4}{a_0}e^{-3r/2a_0}dr \qquad x = \frac{3r}{2a_0} \quad r = \frac{2a_0x}{3}$$

$$= \frac{eE}{6a_0^3(E_2^0-E_1^0)}\int_0^\infty\left(\frac{2}{3}\right)^4a_0^3x^4e^{-x}\cdot\frac{2}{3}a_0\, dx = \frac{eE}{6a_0^3(E_2^0-E_1^0)}\cdot\left(\frac{2}{3}\right)^5a_0^4\cdot 4! = \frac{eEa_0}{E_2^0-E_1^0}\cdot\frac{128}{243}.$$

A primer orden, $E_1^0 = E_1$, $E_2^0 = E_1/2^2 = E_1/4$. $E_2^0 - E_1 = E_1(-3/4)$ (Stark a $\mathcal{O}(1)$ no afecta $n=1$)

$$\mathbb{P} = 2\cdot\left(\frac{eEa_0}{E_1}\right)^2\cdot\left(\frac{2^9}{3^6}\right)^2\left[2 - 2\cos\left(\frac{3eEa_0T}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{E_1\cdot 3T}{4\hbar}\right)\right] \approx \boxed{2\left(\frac{eEa_0}{E_1}\right)^2\left(1-\cos\left(\frac{3eEa_0T}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{3E_1T}{4\hbar}\right)\right)}$$

Después podemos analizarlo. Debemos calcular el t que maximiza esto para encontrar la combinación óptima de v y L. Broma, primero comentemos: Si $t=0$, $\mathbb{P}=0$, lo cual es muy razonable. En el mejor de los casos, $\mathbb{P}\sim 4(eEa_0/E_1)^2$. Un campo eléctrico razonable es (en un acelerador de partículas, que es mucho más fuerte que nuestro condensador) $10^7\, V/m$. $a_0\sim 10^{-10}m$. $-E_1^0 \simeq 13.6eV \sim 10^{-18}J$. $e\sim 10^{-19}C \Rightarrow \mathbb{P}_{max}\sim(10^{-19}\cdot 10^7\cdot 10^{-10}/10^{-18})^2 = 10^{-8}$. Muy chica!

Uno se podría preguntar por qué $\mathbb{P}$ aumenta con a_0 y con e. El e tiene sentido porque estamos aplicando un campo eléctrico (aunque E_1 también contiene e!). El aumento con a_0 tiene que ver con que $\phi_{100} \sim e^{-r/a_0}$; mientras más grande a_0, más "esparcida" va a estar la nube electrónica y mayor será la probabilidad de subir a $n=2$. Ahora, optimizar:

$$\frac{d\mathbb{P}}{dT} = 0 \Rightarrow -\frac{3ea_0E}{\hbar}\sin\left(\frac{3ea_0ET}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{3E_1T}{4\hbar}\right) - \frac{3E_1}{4\hbar}\cos\left(\frac{3ea_0ET}{\hbar}\right)\sin\left(\frac{3E_1T}{4\hbar}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \underline{\tan\left(\frac{3E_1T}{4\hbar}\right) = \frac{-4ea_0E}{E_1}\tan\left(\frac{3ea_0ET}{\hbar}\right)}$$

Ec. transcendental, muy difícil de resolver hasta numéricamente porque $\hbar$ es muy chico, entonces oscila muy rápidamente.