

Física
F911
1969
C.1

C.1

CAUSALIDAD EN LA TRANSFERENCIA
DE EXCITACION ENTRE DOS
SISTEMAS RESONANTES.



David Friedländer

Dpto. Física, Facultad de Ciencias

Universidad de Chile.

Diciembre, 1969.

06326

UNIVERSIDAD DE CHILE
SEDE SANTIAGO ORIENTE
BIBLIOTECA CENTRAL

CAUSALIDAD EN LA TRANSFERENCIA
DE EXCITACION ENTRE DOS SISTEMAS
RESONANTES.

Introducción.

Estudiaremos el intercambio de excitación dependiente del tiempo entre dos átomos, separados por una distancia grande, comparada con sus respectivos radios de Bohr.

El problema fue tratado originalmente por Kikuchi y Fermi (1), (2), quienes obtuvieron un resultado causal. Esto es, la probabilidad de transferencia de excitación obtenida para un tiempo inferior a $\frac{R}{c}$, donde R es la distancia interatómica, resultó ser nula. M. I. Shirokov (3) reexaminó el problema, obteniendo un resultado distinto de cero para $t < \frac{R}{c}$, en aquellos casos donde la energía transferida es del orden o menor que $\frac{hc}{R}$. Esto le llevó a afirmar que se violaba el principio de relatividad especial, en tales circunstancias, puesto que significaría que un fotón puede viajar entre dos puntos, separados por una distancia R , en un tiempo menor que $\frac{R}{c}$.

En la sección I, discutiremos el problema de intercambio de excitación entre dos átomos distantes, dependiente del tiempo, originado por la interacción coulombiana instantánea, que dará una probabilidad claramente distinta de cero para tiempos inferiores a $\frac{R}{c}$. Esto no nos preocupará, pues partimos con una interacción no causal.

En la sección II, utilizaremos la teoría de perturbaciones no covariante, donde se cuantiza solamente la componente transversal del campo electro-

magnético, correspondiente a fotones "reales" (y donde fotones "reales" en un sistema inercial no lo son necesariamente en otro). Al emplear en este cálculo la aproximación $\lambda \ll R$, donde $\lambda = \frac{hc}{E}$, llegaremos al resultado causal deseado.

En la sección III, haremos un resumen de la cuantización de la ecuación de Schrödinger no relativista, con el fin de aclarar algunos conceptos que se utilizarán en la sección IV.

En la sección IV, utilizaremos el formalismo de la matriz S, para calcular la probabilidad de intercambio de interacción, mediante la cuantización covariante del campo electromagnético. Aquí obtendremos el resultado no causal indicado por Shirokov, para el caso en que $\lambda \gtrsim R$. En la aproximación utilizada en la sección III, reencontraremos el resultado causal.

Finalmente, en la sección V, comentaremos este resultado, en conexión con el principio de incertidumbre para la energía y el tiempo. Veremos de este modo que no tiene sentido hablar de un intercambio de energía E en un tiempo inferior a $\frac{h}{E}$. Por tal razón, si queremos investigar intercambios de energía en tiempos inferiores a $\frac{R}{c}$, deberemos suponer $\lambda \ll R$, recobrando el resultado causal.

Nuestra discusión no está restringida al caso de átomos solamente, sino también a moléculas o "sistemas cuánticos" en general. Lo importante es la existencia de niveles tales que permitan el intercambio resonante de energía. Estos sistemas podrán ser idénticos o distintos. Nosotros utilizaremos el término "átomo" y trabajaremos con sistemas idénticos. Además, cuando sea conveniente, nos referiremos al átomo de hidrógeno.

Interacción clásica de átomos

a grandes distancias.

Consideremos dos átomos, uno de ellos en el origen, inicialmente en su estado fundamental "O". El otro se encuentra en un punto distante P, definido por el vector \vec{R} , inicialmente en un estado excitado "P". Las funciones de onda normalizadas en cuestión son $\psi_0(\vec{r}_1)e^{-i\omega_0 t}$ y $\psi_p(\vec{r}_2)e^{-i\omega_p t}$ respectivamente. Los vectores \vec{r}_1 , \vec{r}_2 y \vec{R} se ilustran en el gráfico 1.

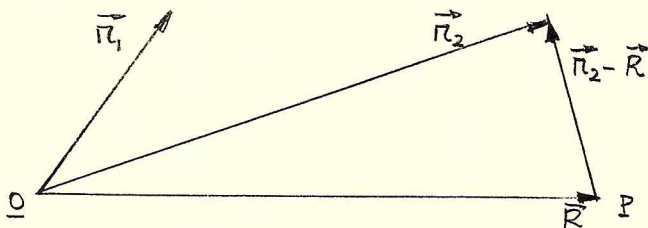


Gráfico 1.

Por "grandes distancias" entendemos $\frac{a_0}{R} \ll 1$, donde a_0 es el radio de Bohr. Suponemos además $\frac{m}{M} \ll 1$, donde m es la masa del electrón y M es la masa del núcleo. Supondremos que los niveles energéticos tienen un ancho nulo. En el hamiltoniano incluiremos sólo potenciales coulombianos instantáneos. Después de separar el movimiento del centro de masa y de los núcleos, el hamiltoniano se reduce a

$$H' = H_0 + V = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad [1.1]$$

V será tratado como una perturbación independiente del tiempo al hamiltoniano inicial H_0 (4).

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}|}$$

$$V = \frac{-e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

La función de onda en el instante inicial es

$$\Psi_1 = \Psi_0(\vec{r}_1) \Psi_p(\vec{r}_2 - \vec{R})$$

Nos preguntamos por la probabilidad de que en un tiempo posterior los átomos hayan cambiado la excitación, esto es, que el átomo en el origen esté excitado, pasando el átomo en el punto P al estado fundamental. Este estado lo denotaremos por Ψ_2 .

$$\Psi_2 = \Psi_p(\vec{r}_1) \Psi_0(\vec{r}_2 - \vec{R})$$

En este momento es conveniente abrir un paréntesis, para referirnos a los dos tipos de intercambios que pueden presentarse: el intercambio de electrones (o partículas en general) y el intercambio de excitación. El caso que nos ocupa se refiere al intercambio de excitación. Ante este tipo de intercambio, la función Ψ_1 se transforma en Ψ_2 .

$$\Psi_0(\vec{r}_1) \Psi_p(\vec{r}_2 - \vec{R}) \xrightarrow{\text{int. excitación}} \Psi_p(\vec{r}_1) \Psi_0(\vec{r}_2 - \vec{R})$$

Por otro lado, intercambio de partículas significa $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$, de manera que ante intercambio de electrones, la función pasará a otra que, para el caso en que $R \gg a_0$, es completamente distinta de Ψ_2 .

$$\Psi_0(\vec{r}_1) \Psi_p(\vec{r}_2 - \vec{R}) \xrightarrow{\text{int. partículas}} \Psi_0(\vec{r}_2) \Psi_p(\vec{r}_1 - \vec{R})$$

Para R grande, los elementos de matriz que dan cuenta del intercambio de partículas son mucho más pequeños que aquellos que dan cuenta del intercam-

bio de partículas son mucho más pequeños que aquellos que se refieren al intercambio de excitación, pues los elementos de matriz para intercambio de partículas son integrales bicéntricas, que decrecen más rápido que $e^{-\frac{R}{a_0}}$. Para $R \rightarrow 0$ ambos intercambios se confunden.

Si quisiéramos tratar nuestro problema con mayor rigor, la función inicial debería ser del tipo $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0(\vec{r}_1) \Psi_p(\vec{r}_2 - \vec{R}) \pm \Psi_0(\vec{r}_2) \Psi_p(\vec{r}_1 - \vec{R})]$ Con lo cual queremos dar cuenta de que hay un electrón en el estado fundamental, ligado a un núcleo en el origen y otro, en un estado excitado, ligado a un núcleo en el punto P, sin poder especificar cual es el electrón que está en una determinada región o la otra. Sin embargo utilizaremos Ψ_1 como nuestra función inicial, para poder considerar a nuestro V como una perturbación. Esto no sería posible hacer inmediatamente para una función inicial como Ψ . Nuestro procedimiento se justifica, debido a las consideraciones hechas acerca de los elementos de matriz.

Planteado el problema nos abocaremos ahora al cálculo de la probabilidad de transferencia de excitación.

Ψ_1 y Ψ_2 son dos soluciones correspondientes a la misma energía $E_0 + E_p$ asociada al hamiltoniano H' . Estamos frente al problema de un nivel doblemente degenerado. Esta degeneración es removida por la perturbación V . Las funciones de onda estacionarias de orden cero son las siguientes: (5)

$$\begin{aligned} \Psi'_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0(\vec{r}_1) \Psi_p(\vec{r}_2 - \vec{R}) + \Psi_p(\vec{r}_1) \Psi_0(\vec{r}_2 - \vec{R})] \\ \Psi'_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0(\vec{r}_1) \Psi_p(\vec{r}_2 - \vec{R}) - \Psi_p(\vec{r}_1) \Psi_0(\vec{r}_2 - \vec{R})] \end{aligned} \quad [1.2]$$

Las energías, corregidas en la primera aproximación, están dadas por

$$E_1' = E_0 + E_p + V_{11} + V_{12}$$

$$E_2' = E_0 + E_p + V_{11} - V_{12}$$

Escribimos la solución al problema como combinación lineal de Ψ_1' y Ψ_2' , introduciendo la condición que especifica que inicialmente el sistema se encuentra en el estado Ψ_1 (no estacionario). La función de onda que describe al sistema se reduce a

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_1'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-\frac{i}{\hbar} V_{12} t} + \Psi_2'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{\frac{i}{\hbar} V_{12} t} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + E_p + V_{11}) t}$$

o bien,

$$\Psi(t) = \left[\Psi_1 \cos\left(\frac{V_{12}}{\hbar} t\right) - i \Psi_2 \sin\left(\frac{V_{12}}{\hbar} t\right) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + E_p + V_{11}) t}$$

De aquí vemos que la excitación pasa de un átomo a otro en un tiempo característico $\tau = \frac{\hbar}{V_{12}}$. Podemos hablar además, para tiempos cortos $t \ll \frac{\hbar}{V_{12}}$ de una probabilidad de transición $w(t)$,

$$w(t) = \left(\frac{V_{12}}{\hbar} t \right)^2$$

La no causalidad del resultado no debe extrañar, pues trabajamos con una perturbación instantánea. No podemos introducir una perturbación retardada puesto que el formalismo empleado es válido sólo para perturbaciones independientes del tiempo.

II.

Cálculo de la probabilidad de intercambio de excitación utilizando la cuantización no covariante del campo electromagnético. (6)

Consideremos dos átomos, uno de ellos en el origen, excitado, y otro en el punto P, definido por el vector \vec{R} , en el estado fundamental. Tal estado global estará denotado por A. Queremos calcular la probabilidad de que el átomo en el origen se desexcite, pasando el átomo en P al estado excitado. Este estado global lo denotaremos por B.

Haremos las aproximaciones siguientes: $\frac{m}{M} \ll 1$, $\frac{a_0}{R} \ll 1$, donde m y M son las masas del electrón y del núcleo, respectivamente y a_0 es el radio de Bohr del átomo. Trabajaremos en un sistema de unidades donde $\hbar = c = 1$.

El segundo orden de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo es el primer orden distinto de cero que da cuenta de este intercambio. La amplitud de probabilidad asociada es: (7)

$$a(t) = \sum_m \frac{V_{Am} V_{mB}}{E_m - E_A} \left\{ it - \frac{e^{i(E-E_m)t} - 1}{E - E_m} \right\} \quad [2.1]$$

Donde E es la energía del estado A (igual a la del estado B) y E_m es la energía del estado intermedio. V_{kl} representa el elemento de matriz "kl" de la perturbación V . El símbolo \sum_m representa la suma (integración) sobre estados intermedios, que en nuestro caso serán de dos tipos, que llamaremos m_1 y m_2 , siguiendo la descripción que damos a continuación. El término it proviene de que los estados A y B tienen la misma energía E

$E = E_p + E_0$. m_1 denota el estado en el cual ambos átomos están desexcitados y existe un fotón de momentum \vec{k} y polarización $\vec{\epsilon}$. La energía de este estado es $E_{m_1} = 2E_0 + \hbar\omega$, donde E_0 es la energía del nivel fundamental de un átomo aislado. Más adelante escribiremos $0\vec{k}$ en lugar de m_1 . Por m_2 entenderemos aquel estado que corresponde a la situación en que ambos átomos están excitados y hay un fotón presente con momentum \vec{k} y polarización $\vec{\epsilon}$, siendo la energía de este estado $E_{m_2} = 2E_p + \hbar\omega$, donde E_p es la energía del nivel excitado del átomo aislado. Más adelante denotaremos m_2 por $p\vec{k}$. Claramente este estado intermedio no conserva energía. En su trabajo, Shirokov hace notar que Fermi y Kikuchi no consideran este último tipo de estado. Veremos, dentro de las aproximaciones que se hacen más adelante, que la contribución de los estados intermedios de tipo m_2 es nula.

Los elementos de matriz en cuestión son del tipo (8)

$$V_{Am} = V_{A,0\vec{k}} = \frac{e}{m} L^{-3/2} \sqrt{\frac{2\hbar}{k}} \left(\Psi_p(\pi_1) \Psi_0(\pi_2), e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \vec{\epsilon}\cdot\vec{p}_1 \Psi_0(\pi_1) \Psi_p(\pi_2) \right) \quad [2.2]$$

Hemos remplazado aquí las soluciones de la ecuación de Dirac, para el átomo aislado, por las correspondientes soluciones de la ecuación de Schrödinger. La función $e^{i\vec{k}\cdot\vec{\pi}}$ satisface las condiciones de periodicidad para un cubo de lado L . Se ha usado además la aproximación dipolar, al remplazar $\vec{\pi}_1 - \vec{\pi}_2 + \vec{R}$ por \vec{R} . Esta aproximación se justifica en el caso que $E_p - E_0 \ll \frac{\hbar^2}{2m a_0^2}$ puesto que en tal situación habrá una contribución considerable sólo para aquellos $\vec{\pi}_1$ y $\vec{\pi}_2$ que cumplan con $\pi_1 \approx a_0$, $\pi_2 \approx a_0$. Definamos además $E_p - E_0 =: E_{p0}$.

Podemos usar la relación que proviene de las reglas de conmutación entre las componentes de $\vec{\pi}$ y \vec{p} y la expresión para el hamiltoniano del átomo aislado.

$$(\Psi_k, \bar{p} \Psi_l) = im(E_k - E_l) (\Psi_k, \bar{\pi} \Psi_l) \quad [2.3]$$

En la expresión [2.2] utilizamos la ortonormalidad de las funciones de onda $\Psi_{0,p}$: $(\Psi_{0,p}(\vec{\pi}_2), \Psi_{0,p}(\vec{\pi}_2)) = 1$ y recordamos que

$$-ed_{kl} = -e (\Psi_k, \bar{\pi} \Psi_l) \quad [2.4]$$

representa el elemento de matriz kl del momento dipolar del átomo. Usando las expresiones [2.2], [2.3], [2.4], la amplitud de probabilidad dada por la relación [2.1] se puede escribir de la manera siguiente:

$$a(t) = -\frac{\alpha E_{p0}}{(2\pi)^2} \int k dk d\Omega \sum_{\vec{\epsilon}} (\vec{\epsilon} \cdot \vec{d}_{p0}) (\vec{\epsilon} \cdot \vec{d}'_{op}) \left\{ \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}}{k - E_{p0}} \left[it + \frac{e^{-i(k - E_{p0})t} - 1}{k - E_{p0}} \right] \right. \\ \left. + \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}}}{k + E_{p0}} \left[it + \frac{e^{-i(k + E_{p0})t} - 1}{k + E_{p0}} \right] \right\} \quad [2.5]$$

Donde α es la constante de estructura fina ($\alpha \approx \frac{1}{137}$). La suma sobre $\vec{\epsilon}$ es sobre las polarizaciones del fotón transversal que se intercambia.

Esta suma puede expresarse como

$$\sum_{\alpha=1,2} \epsilon_i^\alpha \epsilon_j^\alpha = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad [2.6]$$

Al sumar en la expresión [2.5] sobre las polarizaciones, utilizando la fórmula [2.6] e integrando sobre el ángulo sólido $d\Omega$ se obtiene, con cierto trabajo algebraico,

$$a(t) = -i\alpha E_{p0}^2 \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_0^\infty \frac{k dk}{\sqrt{k} R} \left\{ \left[t + \frac{e^{-i(k + E_{p0})t} - 1}{i(k - E_{p0})} \right] \frac{1}{k - E_{p0}} + \right. \\ \left. + \left[t + \frac{e^{-i(k + E_{p0})t} - 1}{i(k + E_{p0})} \right] \frac{1}{k + E_{p0}} \right\} \left\{ (\vec{d}_{p0} \cdot \vec{d}'_{op}) \left[\frac{2}{3} J_{\frac{1}{2}}(kR) - \frac{1}{3} J_{\frac{3}{2}}(kR) \right] - \right.$$

$$- (\vec{d}_{p0} \cdot \vec{R}) (\vec{d}'_{op} \cdot \vec{R}) J_{\frac{5}{2}}(kR) \} \quad [2.7]$$

Donde $J_{\frac{1}{2}}$ y $J_{\frac{5}{2}}$ son funciones de Bessel. Para calcular las integrales que aparecen en la expresión [2.7] hacemos uso de las expansiones asintóticas, válidas para grandes argumentos de las funciones de Bessel.

$$J_{\frac{1}{2}}(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x \quad J_{\frac{5}{2}}(x) \sim -\sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x$$

Notemos que en las integrales que aparecen en la expresión [2.7] el principal aporte proviene de aquellos términos con denominadores que se anulan, esto es, cuando $k \sim E_{p0}$. Por lo tanto, despreciaremos aquellos términos con $k + E_{p0}$ en el denominador (que provienen de estados del tipo m_2) y extenderemos la integración desde $-\infty$ a $+\infty$. Esta aproximación es válida para $E_{p0}R \gg 1$. La relación [2.7] se reduce entonces a:

$$a(t) = D \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[t + \frac{e^{-i(k-E_{p0})t} - 1}{i(k-E_{p0})} \right] \frac{\sin(kR)}{k-E_{p0}} \quad [2.8]$$

donde

$$D = \frac{-i\kappa E_{p0}}{\pi R} \left[\vec{d}_{p0} \cdot \vec{d}'_{op} + \frac{(\vec{d}_{p0} \cdot \vec{R})(\vec{d}'_{op} \cdot \vec{R})}{R^2} \right] \quad [2.9]$$

Si en la expresión [2.8] se efectúa la integración, tras algunas transformaciones, concluimos que la amplitud de probabilidad se puede escribir como

$$a(t) = D \left\{ \pi t \omega(E_{p0}R) - \frac{\pi \sin(E_{p0}R)}{2i} \left[(R+t) + (R-t) \operatorname{sgn}(R-t) - 2R \right] - \frac{\pi \omega(E_{p0}R)}{2} \left[(R+t) - (R-t) \operatorname{sgn}(R-t) \right] \right\} \quad [2.10]$$

Esta amplitud provee los siguientes resultados, según $R > t$ ó $R < t$. Se obtiene de este modo

$$\left\{ \begin{array}{l} a(t) = 0, \quad t < R \\ a(t) = \frac{i\alpha E_{p_0}^2}{R} e^{iRE_{p_0}} (t-R) \left[\vec{d}_{p_0} \cdot \vec{d}_{op}' + \frac{(\vec{d}_{p_0} \cdot \vec{R})(\vec{d}_{op}' \cdot \vec{R})}{R^2} \right], \quad t > R \end{array} \right. \quad [2.11]$$

que puede también escribirse en la forma

$$a(t) = \frac{i\alpha E_{p_0}^2}{R} e^{iRE_{p_0}} (t-R) \vartheta(t-R) \left[\vec{d}_{p_0} \cdot \vec{d}_{op}' + \frac{(\vec{d}_{p_0} \cdot \vec{R})(\vec{d}_{op}' \cdot \vec{R})}{R^2} \right] \quad [2.12]$$

Como se desprende de esta relación, el resultado es causal, es decir, está de acuerdo con el principio de relatividad especial. Recordemos, sin embargo, que hemos supuesto $\lambda \ll R$, donde $\lambda = \frac{1}{E_{p_0}}$.

Es importante recalcar que si no suponemos $\lambda \ll R$, la probabilidad de transición conduce a un resultado no causal, de acuerdo al planteamiento de Shirokov. Sin embargo, como se verá en la discusión de la sección V, no tiene sentido hablar de probabilidad de transferencia de excitación para el caso $\lambda \gtrsim R$. Aún más, suponiendo que fuera posible referirse a un intercambio de excitación en estas condiciones, sería necesario modificar el formalismo.

III

C u a n t i z a c i ó n d e l a e c u a c i ó n d e
S c h r ö d i n g e r n o r e l a t i v i s t a .

A continuación, hacemos uso del método para la cuantización de un campo ondulatorio, para esquematizar la segunda cuantización de la ecuación de Schrödinger [3.1].⁽⁹⁾ Como se quiere tratar el caso de electrones, que obedecen al principio de exclusión de Pauli, la cuantización se hace por medio de reglas de anticonmutación.

La ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad [3.1]$$

se puede obtener en la formulación de Lagrange mediante la densidad lagrangiana

$$\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* \dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi - V \Psi^* \Psi \quad [3.2]$$

a la cual está asociada el hamiltoniano

$$H = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi + V \Psi^* \Psi \right] dV \quad [3.3]$$

La cuantización del campo Ψ , que es un operador en el cuadro de Heisenberg, se efectúa al i) prescribir reglas de anticonmutación, que dan cuenta del principio de Pauli; ii) especificar el hamiltoniano H , que representa la energía del campo; iii) dar la ecuación de movimiento para el campo Ψ .



$$i) \quad \{ \Psi(\vec{r}, t), \Psi(\vec{r}', t) \} = \{ \Psi^\dagger(\vec{r}, t), \Psi^\dagger(\vec{r}', t) \} = 0 \quad [3.4]$$

$$\{ \Psi(\vec{r}, t), \Psi^\dagger(\vec{r}', t) \} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$ii) \quad H = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi^\dagger \cdot \nabla \Psi + V \Psi^\dagger \Psi \right] dV \quad [3.5]$$

$$iii) \quad i\hbar \dot{\Psi} = [\Psi, H] \quad [3.6]$$

Tales prescripciones permiten encontrar para el campo Ψ una ecuación de movimiento análoga a aquella para la función de onda del campo original, no cuantizado, esto es, la ecuación [3.1].

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad [3.7]$$

Se define además el operador "número de partículas"

$$N = \int \Psi^\dagger \Psi dV \quad [3.8]$$

Puede verse que este operador es hermitiano y conmuta con el hamiltoniano H . Por lo tanto, sus valores propios son reales y existen representaciones donde N y H son simultáneamente diagonales. El nombre "número de partículas" se justifica, pues se puede demostrar que los valores propios de N son números enteros no negativos.

Para trabajar en una representación donde N es diagonal, es conveniente expandir Ψ en términos de una base ortonormal $\{ u_k \}$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) u_k(\vec{r}) \quad \Psi^+(\vec{r}, t) = \sum_k a_k^+(t) u_k^*(\vec{r}), [3.9]$$

Los u_k son funciones numéricas en el espacio de las coordenadas, mientras que los a_k son operadores en un espacio cuyas particularidades se señalan más adelante. En nuestra notación el subíndice k representa un parámetro discreto. Cuando este parámetro toma valores continuos se hacen, de la manera habitual, las sustituciones $\sum_k \rightarrow \int dk$, $\delta_{kk'} \rightarrow \delta(k-k')$.

Debido a las relaciones [3.4] y a las expansiones [3.9], los operadores a_k , a_k^+ satisfacen las siguientes reglas de anticonmutación:

$$\{a_k(t), a_{k'}^+(t)\} = \delta_{kk'} \quad [3.10]$$

$$\{a_k(t), a_{k'}(t)\} = \{a_k^+, a_{k'}^+\} = 0$$

Las expansiones [3.9] permiten escribir el operador "número de partículas" N como una suma de operadores N_k , que se denominan "número de ocupación".

$$N = \sum_k N_k \quad a_k^+ a_k =: N_k \quad [3.11]$$

Las relaciones de anticonmutación [3.10] permiten ver que los N_k conmutan entre ellos. Sin embargo, debido a la arbitrariedad en la elección del conjunto $\{u_k\}$, los operadores N_k no conmutan, en general, con el hamiltoniano H . Las mismas reglas de anticonmutación permiten demostrar que los autovalores de N_k son 0 y 1, lo que está de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli y justifica el nombre "número de ocupación".

Las propiedades más importantes de los operadores a_k se obtienen al

observar la manera en que operan sobre los vectores propios de los operadores N_k . Estos vectores los denotaremos por Φ .

$$\Phi = \Phi(m_1, m_2, \dots, m_k, \dots) \quad [3.12]$$

$$N_k \Phi(m_1, \dots, m_k, \dots) = m_k \Phi(m_1, \dots, m_k, \dots) \quad [3.13]$$

Donde m_k es el valor propio del operador N_k asociado al vector propio Φ . De este modo, $\Phi(m_1, \dots, m_k, \dots)$ se interpreta como el estado del sistema en que m_1 ^{electrones} ocupan el primer estado, ..., m_k electrones ocupan el estado k -ésimo, etc. De este modo, vemos como el principio de Pauli viene dado por la limitación de los valores m_k a 0 y 1.

Un estado particularmente importante es el estado vacío, cuyos números de ocupación son todos nulos, es decir: $m_1 = m_2 = \dots = m_k = \dots = 0$

Se puede demostrar que el efecto de los operadores a_k sobre los vectores Φ es el siguiente:

$$a_k \Phi(m_1, \dots, m_k, \dots) = \vartheta_k m_k \Phi(m_1, \dots, m_k - 1, \dots) \quad [3.14]$$

$$a_k^+ \Phi(m_1, \dots, m_k, \dots) = \vartheta_k (1 - m_k) \Phi(m_1, \dots, m_k + 1, \dots)$$

donde $\vartheta_k = (-1)^{\nu_k}$ con $\nu_k = \sum_{j=1}^{k-1} m_j$

Las relaciones [3.14] nos llevan a interpretar a a_k como un operador de aniquilación o destrucción, que baja en una unidad el número de ocupación m_k del estado k -ésimo, originalmente ocupado. De manera análoga, el efecto de a_k^+ es el de construir un electrón en el estado k -ésimo, originalmente

desocupado. De este modo, por aplicaciones sucesivas de operadores de creación y aniquilación sobre un vector dado, se puede obtener un vector Φ arbitrario.

Una elección del conjunto $\{u_k\}$ particularmente importante es aquella donde los u_k son autofunciones del hamiltoniano H de la ecuación original [3.1].

$$H u_k = E_k u_k \quad [3.15]$$

con

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

En tales circunstancias, el hamiltoniano H se escribe simplemente como una suma sobre energías E_k .

$$H = \sum_k a_k^\dagger a_k E_k = \sum_k N_k E_k \quad [3.16]$$

De modo que $\Phi(m_1, \dots, m_k, \dots)$ es un vector propio del hamiltoniano H con autovalor $\sum_k m_k E_k$, que es la energía total de un sistema de m partículas, con $m = \sum_k m_k$. Vemos así que una partícula en el estado k -ésimo contribuye a la energía total con una energía E_k .

En particular, podemos considerar que H sea el hamiltoniano asociado al problema del átomo de hidrógeno, con el núcleo en el origen. Los u_k , autofunciones de dicho hamiltoniano, correspondientes al espectro discreto, se denotan comúnmente por u_{nlm} . En este caso, a_{nlm} , por ejemplo, será un operador de aniquilación de un electrón con energía E_m , momento angular $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ y proyección del momento angular sobre el eje z igual a $\hbar m$. Este electrón estará ligado al origen.

Por otro lado, consideremos el caso donde H' es el hamiltoniano aso-

ciado al problema del átomo de hidrógeno, con el núcleo en el punto P. La expansión del campo que permite escribir el hamiltoniano como una suma sobre energías, se hace ahora en términos del conjunto $\{u_k^i\}$ de autofunciones de H^i . Dichas autofunciones son por supuesto $u_{mlm}^i(\vec{r}-\vec{R})$, donde \vec{R} es el vector que define el punto P. En este caso, a_{mlm}^+ , por ejemplo, es un operador de creación de un electrón ligado a un núcleo en el punto P, cuya energía es E_m y cuyo momento angular y proyección del momento angular sobre el eje z son $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ y $\hbar m$, respectivamente.

Con estos ejemplos queremos destacar la importancia de la elección del origen en problemas con potenciales dependientes de la posición, en contraposición con los problemas habituales, donde se tienen electrones libres y donde un cambio en la elección del origen no trae más que un cambio de fase.

IV

Cálculo de la probabilidad de
intercambio de excitación por
medio de la matriz S.

Consideremos nuevamente el problema del intercambio de excitación entre dos átomos distantes. Como nos interesa una probabilidad dependiente del tiempo, la matriz S tendrá una forma distinta de la habitual, al cambiar en las integraciones los límites temporales.

$$S = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)^m}{m!} \int \dots \int d^4x_1 d^4x_2 \dots d^4x_m \mathcal{P} \left\{ \mathcal{H}_I(x_1) \mathcal{H}_I(x_2) \dots \mathcal{H}_I(x_m) \right\} \quad [4.1]$$

\int simboliza una integración sobre todo el espacio tridimensional, extendiéndose la integración temporal entre $t_i=0$ y $t_i=t$. De este modo, la matriz S describe la evolución temporal de un estado $\bar{\Phi}(t)$ de la manera:

$$\bar{\Phi}(t) = S \bar{\Phi}(0) \quad [4.2]$$

\mathcal{H}_I es la densidad hamiltoniana de interacción entre el campo electromagnético y las cargas.

$$\mathcal{H}_I(x) = ieN \left(\bar{\Psi}(x) \gamma_\mu A_\mu \Psi(x) \right) \quad [4.3]$$

N es el producto normal, donde operadores de destrucción figuran a la derecha. Los operadores $\bar{\Psi}(x)$ están expandidos en términos de spinores de Dirac $\Psi(x)$, los γ_μ son matrices de Dirac, y además

$$\bar{\Psi}(x) = \Psi^\dagger(x) \gamma_4$$

El sistema de unidades que empleamos es tal que $\hbar = c = 1$. Las cuartas componentes de los cuadvectores son imaginarias, de modo que no es necesario distinguir entre componentes contravariantes y covariantes de un tensor.

En el problema que nos interesa, que se refiere a electrones ligados a átomos distantes, la corriente $j_\mu = (\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi)$ será el resultado de la suma de las corrientes debidas a los electrones de cada átomo, es decir

$$j_\mu(x) = j_\mu^{(1)}(x) + j_\mu^{(2)}(x) \quad [4.4]$$

En este trabajo emplearemos la aproximación no relativista para la corriente j_μ , empleando en su expansión funciones de Schrödinger ordinarias, en lugar de los spinores de Dirac. De este modo

$$j_k^{(1,2)}(x) \rightarrow \frac{-e}{2im} \left[\Psi^{(1,2)\dagger}(x) \partial_k \Psi^{(1,2)}(x) - (\partial_k \Psi^{(1,2)\dagger}(x)) \Psi^{(1,2)}(x) \right]; k=1,2,3 \quad [4.5]$$

$$j_4^{(1,2)}(x) \rightarrow -ie \Psi^{(1,2)\dagger}(x) \Psi^{(1,2)}(x)$$

Donde el campo $\Psi^{(1)}$ estará expandido en términos del conjunto completo $\{\psi_m\}$ de soluciones de la ecuación de Schrödinger con un potencial $V(\vec{r}) = -\frac{e}{r}$ mientras que el campo $\Psi^{(2)}$ está dado en términos del conjunto completo $\{\psi_m\}$ de soluciones de la ec. de Schrödinger, con un potencial $V'(\vec{r}) = -\frac{e}{|\vec{r}-\vec{R}|}$

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(x) &= \sum_m a_m \psi_m(\vec{r}) e^{-iE_m t} \\ \Psi^{(2)}(x) &= \sum_m r_m \psi_m(\vec{r}) e^{-iE_m t} \end{aligned} \quad [4.6]$$

En esta expansión, r_m y a_m son operadores de aniquilación de electrones en el estado "m" de un átomo de hidrógeno en el punto P, definido por el vector \vec{R} ó con el núcleo en el origen, respectivamente.

El primer orden en la teoría de perturbaciones que da cuenta de la interacción que estudiamos corresponde al segundo orden de la matriz S

$$S^{(2)} = -\frac{1}{2} \iint d^4x_1, d^4x_2 \mathcal{P} \{ \mathcal{H}_I(x_1) \mathcal{H}_I(x_2) \} \quad [4.7]$$

Expandiendo $S^{(2)}$ en productos normales, según el teorema de Wick, extraemos el término $S_c^{(2)}$ que contribuye al proceso que nos ocupa.

$$S_c^{(2)} = -\frac{1}{2} \iint d^4x_1, d^4x_2 N \{ (j_\nu A_\nu)(x_2) (j_\mu A_\mu)(x_1) \} \quad [4.8]$$

donde

$$A_\nu(x_1) A_\mu(x_2) = \frac{1}{2} \delta_{\mu\nu} D_F(x_1 - x_2) \quad [4.9]$$

y donde

$$D_F(x) = \frac{-2i}{(2\pi)^4} \int_{C_F} \frac{d^4k}{k^2} e^{ikx} \quad [4.10]$$

La integración en el plano complejo k_0 está ilustrada en el gráfico 2.

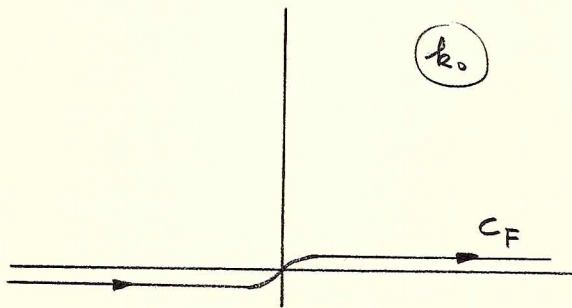


gráfico 2.

Con la ayuda de las expresiones [4.9] y [4.10], $S_c^{(2)}$ se reduce a:

$$S_c^{(2)} = \frac{-ie^2}{2(2\pi)^4} \int_{C_F} \frac{d^4k}{k^2} \iint d^4x_1, d^4x_2 e^{ik(x_2 - x_1)} \Psi^{(2)\dagger}(x_2) \frac{P_{\mu\nu}(k)}{m} \Psi^{(2)}(x_2) \Psi^{(1)\dagger}(x_1) \frac{P_{\mu\nu}(k)}{m} \Psi^{(1)}(x_1) +$$

$$+ \frac{-ie^2}{2(2\pi)^4} \int_{c_F} \frac{d^4 k}{k^2} \iint d^4 x_1, d^4 x_2 e^{i k \cdot (x_2 - x_1)} \Psi_{(x_2)}^{(1)\dagger} \frac{p_{\mu(2)}}{m} \Psi_{(x_2)}^{(1)} \Psi_{(x_1)}^{(2)\dagger} \frac{p_{\mu(1)}}{m} \Psi_{(x_1)}^{(2)} \quad [4.11]$$

donde no hemos anotado términos que se anulan dentro de la aproximación indicada a continuación de la expresión [4.16]. Además utilizamos $p_k = \frac{\partial}{\partial x_k}$, $p_4 = im$

El estado inicial, en el cual hay un electrón ligado al núcleo situado en el origen en un estado excitado "p" y un electrón ligado al núcleo en el punto P, en el estado fundamental "o" está descrito por

$$\Phi_i = a_{R_0}^+ a_p^+ \Phi_0$$

Nos preguntamos por la probabilidad de que el sistema pase a un estado descrito por

$$\Phi_f = a_{R_p}^+ a_o^+ \Phi_0$$

donde el electrón del núcleo en el origen ha pasado al estado no excitado, excitándose el electrón del núcleo en el punto P. Dicha probabilidad estará dada por $|a(t)|^2$, donde

$$a(t) = (\Phi_f, S_c^{(2)} \Phi_i) \quad [4.12]$$

La expresión [4.11] para $S_c^{(2)}$, con los campos expandidos en la manera indicada por las relaciones [4.6] provee de dos términos que dan cuenta de la transición deseada. Estos dos términos contribuyen con la misma cantidad a la amplitud $a(t)$.

$$a(t) = \frac{-ie^2}{(2\pi)^4} \int_{c_F} \frac{d^4 k}{k^2} \iint d^4 x_1, d^4 x_2 e^{i k \cdot (\vec{\pi}_2 - \vec{\pi}_1)} e^{-i k_0 (t_2 - t_1)},$$

$$\cdot a_{R_p}^* \Psi_{(x_2)}^* p_{\mu(2)} a_{R_0} \Psi_{(x_2)} a_o^* \Psi_{(x_1)}^* p_{\mu(1)} a_p \Psi_{(x_1)} \quad [4.13]$$

Esta expresión puede ser ilustrada por el diagrama de Feynman que aparece en el gráfico 3.

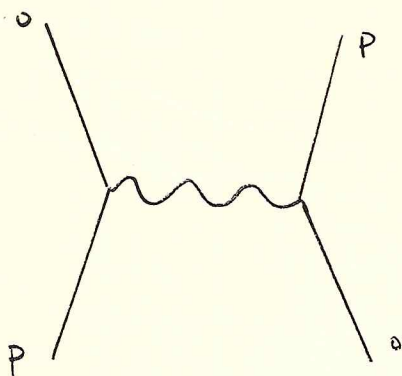


gráfico 3.

Las líneas rectas representan estados ligados de los electrones y la línea ondulada representa el fotón intercambiado, que transporta la excitación del átomo en el origen al átomo en el punto P. Podemos ver que en la expresión [4.13] no figuran términos que correspondan a intercambio de electrones. Esto proviene del enfoque que tomamos, al expandir $\Psi(x)$ según las relaciones [4.6] y es consecuente con la aproximación $(R\Psi_0, P\Psi_P) \approx 0$.

En la expresión [4.13] realizamos un cambio de variable en la integral sobre $\vec{\pi}_2$, refiriéndola al punto P. Utilizando la notación

$${}^0\Psi_{0,p} \rightarrow \Psi_{0,p}$$

$$E_p - E_0 =: E_{p0}$$

$$t_2 - t_1 =: t_{21}$$

dicha expresión se lee:

$$a(t) = \frac{-ie^2}{(2\pi)^4} \int_{CF} \frac{d^4k}{k^2} \iint d^4x_1 d^4x_2 \Psi_p^*(\vec{\pi}_2) \frac{p_{\mu}(2)}{m} \Psi_0(\vec{\pi}_2) \Psi_0^*(\vec{\pi}_1) \frac{p_{\mu}(1)}{m} \Psi_p(\vec{\pi}_1) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\pi}_2 - \vec{\pi}_1 - \vec{R})} e^{-ik_0 t_{21} + iE_{p0} t_{21}} \quad [4.15]$$

Como es sabido, el propagador de Feynman puede ser separado en funciones de argumento par e impar

$$D_F(x'x) = \frac{-1}{4\pi^2\pi} \left[P\left(\frac{1}{\pi-t}\right) + P\left(\frac{1}{\pi+t}\right) \right. \\ \left. + i \frac{\epsilon(t'-t)}{4\pi} \left[\delta(\pi-t) - \delta(\pi+t) \right] \right] \quad [4.16]$$

donde

$$\pi = |\vec{x}' - \vec{x}| \\ t = x'_0 - x_0 \quad \epsilon(t'-t) = \begin{cases} +1, & t' > t \\ -1, & t' < t \end{cases}$$

En nuestro caso vale $\pi = |\vec{n}_2 - \vec{n}_1 - \vec{R}|$, $t = t_{21}$

Debido a que consideramos solamente aquellos casos donde $q_0 E_{p_0} \ll 1$ y a que habrá contribución significativa a la expresión [4.15] sólo para aquellos n_1, n_2 próximos a q_0 , podemos hacer la aproximación $e^{i\vec{k} \cdot (\vec{n}_2 - \vec{n}_1 + \vec{R})} \approx e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ que permite expresar la amplitud $a(t)$ de la manera

$$a(t) = D [a_1(t) + a_2(t)] \quad [4.17]$$

donde

$$D = \frac{ie^2}{(2\pi m)^2 R} \iint d\vec{n}_1 d\vec{n}_2 \psi_p^*(\vec{n}_2) p_p^{(2)} \psi_0(\vec{n}_2) \psi_0(\vec{n}_1) p_p^{(1)} \psi_p(\vec{n}_1) \quad [4.18]$$

y

$$a_1(t) = \frac{i\pi}{2} \int_0^t \int_0^t \epsilon(t_{21}) e^{iE_{p_0} t_{21}} \left[\delta(\pi + t_{21}) - \delta(\pi - t_{21}) \right] dt_1 dt_{21} \quad [4.19]$$

$$a_2(t) = \frac{p}{2} \int_0^t \int_0^t e^{iE_{p_0} t_{21}} \left[\frac{1}{R+t_{21}} + \frac{1}{R-t_{21}} \right] dt_1 dt_{21} \quad [4.20]$$

De ahora en adelante suprimiremos el símbolo P , entendiendo que calcularemos los valores principales de las integrales que así lo requieran. El coefi-

ciente D , independiente del tiempo, dado por la expresión [4.18] es el mismo definido por la expresión [2.9], puesto que $(\psi_0, \psi_p) = 0$.

La integral [4.19] puede ser escrita como

$$a_1(t) = i\pi \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \omega(E_{p_0} t_{21}) \left[\delta(R+t_{21}) - \delta(R-t_{21}) \right] \quad [4.21]$$

Calculemos las integrales, teniendo en cuenta los intervalos de tiempo en juego. a) $\delta(R+t_{21}) = \delta(R-t_1+t_2)$, contribuye solamente cuando $t_2 = t_1 - R$. Como $0 < t_2 < t_1$ y $0 < t_1 < t$, este término contribuye solamente para $t > R$. b) $\delta(R-t_{21}) = \delta(R-t_2+t_1)$, contribuye solamente cuando $t_2 = t_1 + R$, pero como $0 < t_2 < t_1$, no hay contribución alguna de este término. Con estas consideraciones, $a_1(t)$ se reduce a

$$a_1(t) = i\pi \omega(E_{p_0} R) (t-R) \mathcal{D}(t-R) \quad [4.22]$$

Hacemos notar que este término es causal, es decir, se anula cuando $t < R$.

Para el cálculo de $a_2(t)$ es conveniente realizar en la integral [4.19] el siguiente cambio de variables:

$$\begin{cases} t_2 + t_1 = u \\ t_2 - t_1 = v \end{cases} \quad J = \frac{\partial(t_1, t_2)}{\partial(u, v)} = \frac{1}{2}$$

Los límites de integración en el plano (u, v) pueden ser obtenidos inmediatamente del gráfico 4.

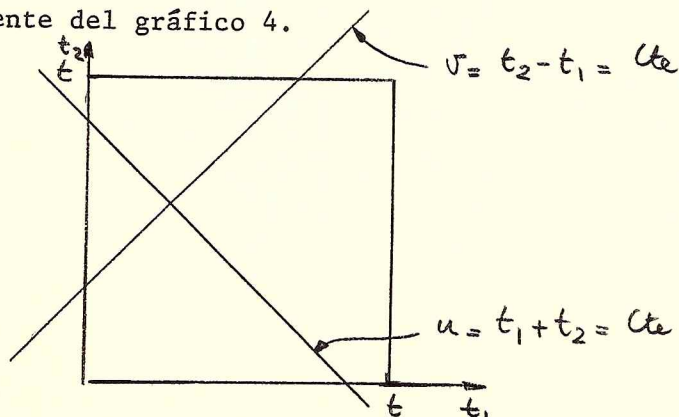


gráfico 4.

Con tal cambio de variables, $a_2(t)$ se expresa como

$$a_2(t) = \frac{1}{4} \int_0^t dv \int_v^{2t-v} du e^{iE_{p0}v} \left[\frac{1}{R-v} + \frac{1}{R+v} \right] + \\ + \int_{-t}^0 dv \int_{-v}^{2t+v} du e^{iE_{p0}v} \left[\frac{1}{R-v} + \frac{1}{R+v} \right]$$

Integrando sobre du se obtiene

$$a_2(t) = \int_0^t (t-v) \cos(E_{p0}v) \left[\frac{1}{R-v} + \frac{1}{R+v} \right] dv \quad [4.23]$$

Después de algunas transformaciones podemos llegar a:

$$a_2(t) = (R-t) \left[\cos(E_{p0}R) \int_{-R}^{t-R} \frac{dv}{v} \cos(E_{p0}v) - \sin(E_{p0}R) \int_{-R}^{t-R} \frac{dv}{v} \sin(E_{p0}v) + \right. \\ \left. + (R+t) \left[\cos(E_{p0}R) \int_R^{t+R} \frac{dv}{v} \cos(E_{p0}v) + \sin(E_{p0}R) \int_R^{t+R} \frac{dv}{v} \sin(E_{p0}v) \right] \right] \quad [4.24]$$

Recordando las definiciones para las funciones seno integral y coseno integral

$$\text{Si } x = \int_0^x \frac{\sin v}{v} dv \quad \text{Ci } x = \int_{\infty}^x \frac{\cos v}{v} dv \quad [4.25]$$

$$\text{Si } (-x) = -\text{Si } x$$

$$\text{Ci } (-x) = \text{Ci } (x)$$

se puede llegar a expresar $a_2(t)$ en la forma

$$a_2(t) = \sin(E_{p0}R) \left\{ (R+t) \text{Si}[(R+t)E_{p0}] - 2R \text{Si}(RE_{p0}) + (R-t) \text{Si}[(R-t)E_{p0}] \right\} + \\ + \cos(E_{p0}R) \left\{ (R+t) \text{Ci}[(R+t)E_{p0}] - 2R \text{Ci}(RE_{p0}) + (R-t) \text{Ci}[(R-t)E_{p0}] \right\} \quad [4.26]$$

Esta expresión no se anula en general para $t < R$.

Calculemos $a_2(t)$ para el caso particular $E_{p0}R \gg 1$, $E_{p0}(R-t) \gg 1$. Para ello utilizaremos las siguientes expresiones asintóticas, que se obtienen de las definiciones [4.25], mediante integración por partes.

$$\text{Si}(x) \approx \frac{\pi}{2} - \frac{\cos x}{x}, \quad \text{Ci}(x) \approx \frac{\sin x}{x}, \quad x \gg 1$$

$$a_2(t) = 0, \quad (R-t)E_{p0} \gg 1 \quad RE_{p0} \gg 1$$

Similarmente, podemos obtener

$$a_2(t) = -\pi [\text{sen}(E_{p0}R)] (t-R), \quad (t-R)E_{p0} \gg 1$$

De modo que podemos escribir para la amplitud de probabilidad de intercambio de excitación $a(t)$, utilizando las expresiones [2.9], [4.17], [4.22], [4.27], [4.28], para aquellos casos en que $RE_{p0} \gg 1$, $|(R-t)E_{p0}| \gg 1$ la siguiente expresión:

$$a_2(t) = \frac{\alpha E_{p0}^2}{R} (t-R) \Theta(t-R) e^{iE_{p0}R} \cdot \left[\vec{d}_{p0} \cdot \vec{d}'_{op} + \frac{(\vec{d}_{p0} \cdot \vec{R})(\vec{d}'_{op} \cdot \vec{R})}{R^2} \right] \quad [4.29]$$

que coincide con el resultado [2.11], calculado en la sección II. El resultado general, sin restricciones para el tiempo t , se obtiene de las expresiones [4.17], [2.9], [4.22].

$$a(t) = \frac{\alpha E_{p0}^2}{R} \left[\vec{d}_{p0} \cdot \vec{d}'_{op} + \frac{(\vec{d}_{p0} \cdot \vec{R})(\vec{d}'_{op} \cdot \vec{R})}{R^2} \right] \left\{ \cos(E_{p0}R) (t-R) \Theta(t-R) + \frac{1}{\pi} \text{sen}(E_{p0}R) \left[(R+t) \text{Si}[(R+t)E_{p0}] - 2R \text{Si}(E_{p0}R) + (R-t) \text{Si}[(R-t)E_{p0}] \right] + \frac{1}{\pi} \cos(E_{p0}R) \left[(R+t) \text{Ci}[(R+t)E_{p0}] - 2R \text{Ci}(E_{p0}R) + (R-t) \text{Ci}[(R-t)E_{p0}] \right] \right\} \quad [4.30]$$

Este resultado, que no se anula para tiempos inferiores a \mathcal{R} , es consecuencia de la no anulación del propagador de Feynman para argumentos de tipo espacio, es decir, para $|\vec{x}|^2 - t^2 > 0$. Sin embargo, como señalaremos en la sección V, el resultado [4.30] no contradice el principio de relatividad especial.

I n t e r c a m b i o d e e x c i t a c i ó n y e l

p r i n c i p i o d e i n c e r t i d u m b r e .

Veamos que suposiciones se deben hacer para explicar el proceso de intercambio resonante de excitación entre dos átomos distantes, mediante el intercambio de un fotón que viaja desde las inmediaciones del átomo que entrega energía, a las inmediaciones del átomo que la recibe.

Sea R la distancia que separa estos átomos y sea E_{p_0} la magnitud de la energía transportada. Para que tenga sentido la explicación recién descrita, es claro que la energía del fotón que efectúa el intercambio debe tener una incertidumbre menor que $\frac{E_{p_0}}{2}$. Debido a esto, la incertidumbre Δp en el momentum del fotón será menor que $\frac{E_{p_0}}{2c}$, lo que introduce una incertidumbre Δx en el conocimiento de la localización del fotón, dada por

$$\Delta p \Delta x \gg \frac{h}{2}$$

Por consiguiente, $\Delta x \gg \frac{hc}{E_{p_0}}$

Para que tenga sentido hablar de un camino de longitud R para el fotón, debe cumplirse que $R \gg \Delta x$, o bien

$$\frac{RE_{p_0}}{hc} \gg 1$$

que es precisamente aquella condición para la cual se obtiene el resultado causal.

Podría tal vez pensarse que es posible ignorar la interpretación dada para el proceso de intercambio de excitación, bastando con tomar la expresión

[4.30] como una fórmula que da la amplitud de probabilidad requerida. Recurrimos entonces al principio de incertidumbre para la energía y el tiempo que nos dice que el producto de la incerteza ΔE en la transferencia de energía a un átomo y la incerteza Δt del instante en que esta energía es absorbida es, por lo menos, del orden de $\frac{\hbar}{2}$. De aquí surge que, si queremos verificar la fórmula [4.30] experimentalmente, los tiempos investigados deberán ser mayores que $\frac{\hbar}{E_p}$. El mismo principio de incertidumbre para la energía y el tiempo hace que pierda sentido el término "intercambio resonante" cuando la energía intercambiada y el instante en consideración están ligados por la relación $E_p t \lesssim \frac{\hbar}{2}$.

De este modo, la no anulación de $a(t)$ para aquellos casos donde $R \lesssim \frac{\hbar c}{E_p}$ (o para tiempos que cumplan con $\left| \frac{(R-ct)E_p}{\hbar c} \right| \lesssim 1$, cuando se supone $\frac{RE_p}{\hbar c} \gg 1$) no contradice el principio de causalidad, que nos dice que ninguna señal se propaga a una velocidad mayor que la de la luz.

Notas y bibliografía.

1. S. Kikuchi, Zs. f. Phys. 66, 558 (1930).
2. E. Fermi, Rev. Mod. Phys., 4, 87 (1932).
3. M. I. Shirokov, I. U. I. N. P - 1719, Moscú (1964).
4. El potencial V se aproxima, salvo una constante, al potencial de Van der Waals

$$V \approx -\frac{1}{R} + \left[\frac{\vec{\pi}_1 \cdot \vec{\pi}_2}{R^3} - \frac{3(\vec{\pi}_1 \cdot \vec{R})(\vec{\pi}_2 \cdot \vec{R})}{R^5} \right]$$

5. Ver, por ej., Landau and Lifshitz, 39, problemas 1 y 3, Quantum Mechanics, Pergamon, London (1959).
6. Ver, por ej., W. Heitler, II 7, Q. Th. of Radiation, University Press, Oxford (1960).
- 7, 8. Ver, por ej., 29, 49, L. Schiff, Q. Mech., Mc Graw Hill, N. York (1955).
9. Ver, por ej., Cap. XIII, L. Schiff, loc. cit.

