# Absorção e Emissão de fótons
(parte 1)

Emissão estimulada,  Coeficientes de Einstein e equações de taxa

*Outras formulações*: (usando os conteúdos vistos até agora)
Excitações coerentes e emissão espontânea via matriz densidade
Equações ópticas de Bloch e Equação mestra (dinâmica do op. densidade)

# Hamiltonianos dependentes do tempo

Suponha que conhecemos

$$\hat{H}_o\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$$

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$$

**Deseja-se resolver:**

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n(t)\exp\left(-iE_n t/\hbar\right)|\psi_n\rangle$$

$$i\hbar\;\dot{c}_m(t) = \sum_n V_{mn}e^{i\omega_{mn}t}c_n(t)$$

$$\omega_{mn} \equiv \frac{(E_m - E_n)}{\hbar}$$

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

**Solução é exata...**

**Resumo:** Teoria de Perturbação Independente do tempo

$$H_0 \left|\phi_p^i\right\rangle = E_p^0 \left|\phi_p^i\right\rangle$$

$$\begin{cases} \left\langle \phi_p^i \mid \phi_q^j \right\rangle = \delta_{pq}\delta_{ij} \\ \sum_p \sum_i \left|\phi_p^i\right\rangle \left\langle \phi_p^i\right| = 1 \end{cases}$$

$$H = H_0 + \lambda V$$

$$H(\lambda)\left|\Psi_n(\lambda)\right\rangle = E(\lambda)\left|\Psi_n(\lambda)\right\rangle$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p\neq n} \sum_i \frac{\left|\langle \phi_p^i | V | \phi_n \rangle\right|^2}{E_n^0 - E_p^0} + O\left(\lambda^3\right)$$

$$\begin{aligned} \left|\Psi_n(\lambda)\right\rangle = {} & \left|\phi_n\right\rangle + \lambda \sum_{p\neq n} \sum_i \frac{\langle \phi_p^i | V | \phi_p \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \left|\phi_p^i\right\rangle \\ & + \lambda^2 \sum_{p\neq n} \sum_i \left[ -\frac{\langle \phi_p^i | V | \phi_p \rangle \langle \phi_p^i | V | \phi_p \rangle}{\left(E_n^0 - E_p^0\right)^2} + \sum_{q\neq n} \sum_j \frac{\langle \phi_p^i | V | \phi_q^j \rangle \langle \phi_q^j | V | \phi_n \rangle}{\left(E_n^0 - E_p^0\right)\left(E_n^0 - E_q^0\right)} \right] \left|\phi_p^i\right\rangle + O\left(\lambda^3\right) \end{aligned}$$

# Teoria de Perturbação dependente do tempo

**Até aqui, temos a solução exata...**

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n(t) \exp\left(-iE_n t/\hbar\right) |\psi_n\rangle$$

$$i\hbar\, \dot{c}_m(t) = \sum_n V_{mn} e^{i\omega_{mn} t} c_n(t)$$

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

**Aqui entra a aproximação...**

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \ldots$$

$$= \sum_k \lambda^k c_n^{(k)}(t)$$

**Ordens de aproximação...**

$$\dot{c}_n^{(k+1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k c_n^{(k)}\, e^{i\omega_{mn} t}\, \hat{V}_{mn}$$

$$\hat{V}_{mn} = \left\langle \psi_m \left| \hat{V}(t) \right| \psi_n \right\rangle$$

# Operador de evolução temporal: Série de Dyson

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t,t_0) = V_I(t) U_I(t,t_0) \quad \Longrightarrow \quad U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t') U_I(t',t_0) dt'$$

$$\begin{aligned}
U_I(t,t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t') \left[ 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'} V_I(t'') U_I(t'',t_0) dt'' \right] dt' \\
&= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') \\
&\quad + \cdots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \cdots \\
&\quad \times \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \cdots V_I(t^{(n)}) \\
&\quad + \cdots .
\end{aligned}$$

(*) ver Sakurai, Cap. 5. (seção 5.7)

(Esse formalismo é geral e interessante p/ matéria condensada, QED, partículas e etc.)

# Série de Dyson & coeficientes da expansão perturbativa... *(representação de interação)*

⇒ Para o caso geral (q$^{\underline{do}}$ operadores ñ comutam em tempos diferentes) podemo considerar propagações infinitesimais, de forma recursiva...

$$U_I(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\, U_I(t',t_0)\, dt'$$

Aplicações recursivas ...

$$= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\left[\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t'} V_I(t'')\, U_I(t'',t_0)\, dt''\right] dt'$$

$$= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\, dt' + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'')\left[\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{0}^{t''} V_I(t''')\, U(t''',t_0)\, dt'''\right]$$

$$\boxed{\text{Série de Dyson}} = \underbrace{\mathbb{1}}_{\text{ordem zero}} + \underbrace{\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\, dt'}_{1^{\underline{a}}\text{ ordem}} + \underbrace{\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'')}_{2^{\underline{a}}\text{ ordem}} + \underbrace{\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} V_I(t')\, V_I(t'')\, V_I(t''')}_{3^{\underline{a}}\text{ ordem} \ldots}\, U(t''',t_0)\, dt'''$$

podemos continuar expansão ...

coeficientes: $c_M(t) \quad c_M^{(0)} + c_M^{(1)} + c_M^{(2)} + c_M^{(3)} + \ldots$

# Série de Dyson & coeficientes da expansão perturbativa... *(representação de interação)*

de forma mais compacta:

$$U_I(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \cdots \int_{0}^{t_n} dt_n \, V_I(t_1) V_I(t_2) V_I(t_3) \cdots V_I(t_n) \Bigg\} \text{Série de Dyson}$$

$$U_I(t,t_0) = \hat{\mathcal{T}}\Big( \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_I(t')\,dt'}}_{\hat{U}_I(t,t_0)} \Big)$$

operador de ordenamento temporal

↳ Coeficientes da teoria de perturbação

$\boxed{t_0 = 0}$ → $|\Psi(t)\rangle_I = U_I(t)\,|\Psi(0)\rangle_I = \sum_{q=1}^{N} c_q(t)\,|q\rangle$ ← vetores da base ($\mathcal{H}_0$)

↳ $c_k(t) = \langle k|\, \underbrace{\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t V(t')\,U_I(t')\,dt'}_{\text{Série de Dyson}} \,|i\rangle$ ← estado inicial

⇓

$c_k^{(0)} = \mathbb{1} = \langle k|\mathbb{1}|i\rangle = \delta_{ki}$

$c_k^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle k|V_I|i\rangle\,dt' = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{ki}(t')\,e^{i\omega_{ki}t'}\,dt'$

$c_k^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \; V_{kn}(t')\,V_{ni}(t'')\,e^{i\omega_{kn}t'}\,e^{i\omega_{ni}t''}$

**Ordens de aproximação...**

$$\dot{c}_m^{(k)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_n c_n^{(k-1)}\, e^{i\omega_{mn}t}\,\hat{V}_{mn}$$

$$\hat{V}_{mn} = \left\langle \psi_m \middle| \hat{V}(t) \middle| \psi_n \right\rangle$$

# Exemplo: perturbação harmônica

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}(t)$$

$$\hat{V}(t) = V(\mathbf{r})\cos(\omega t)$$

$$c_n^{(1)}(t) \cong -\frac{V_{ni}}{2\hbar}\left[\cancel{\frac{e^{i(\omega_o+\omega)t}-1}{(\omega_o+\omega)}} + \frac{e^{i(\omega_o-\omega)t}-1}{(\omega_o-\omega)}\right]$$

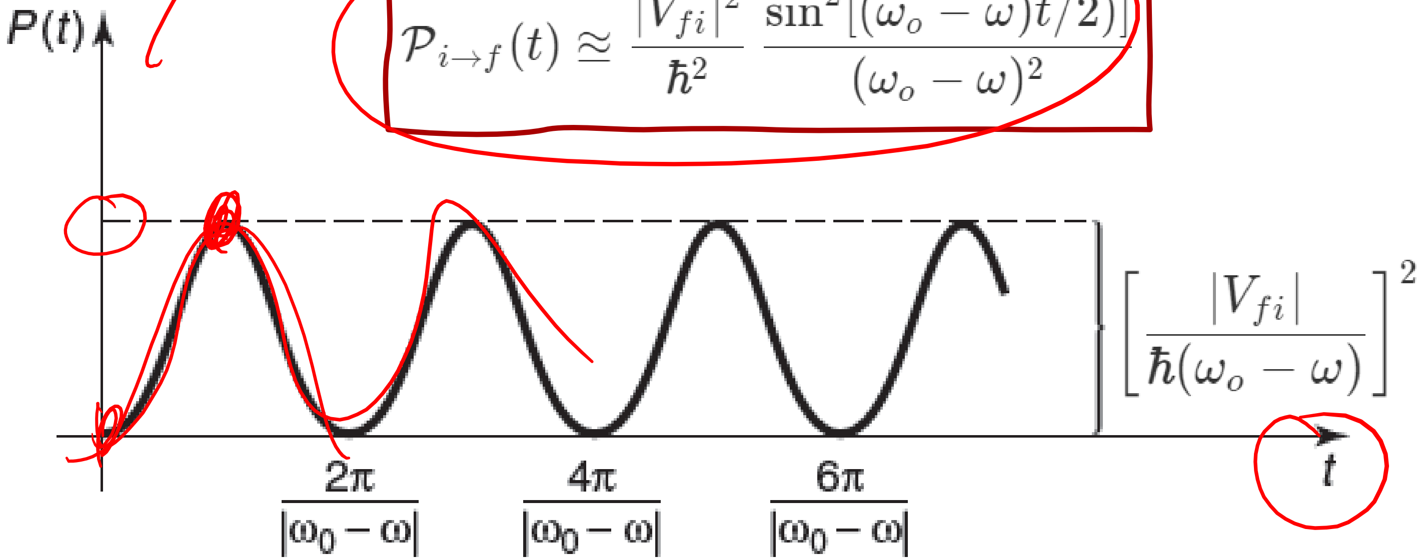
$$\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega|$$

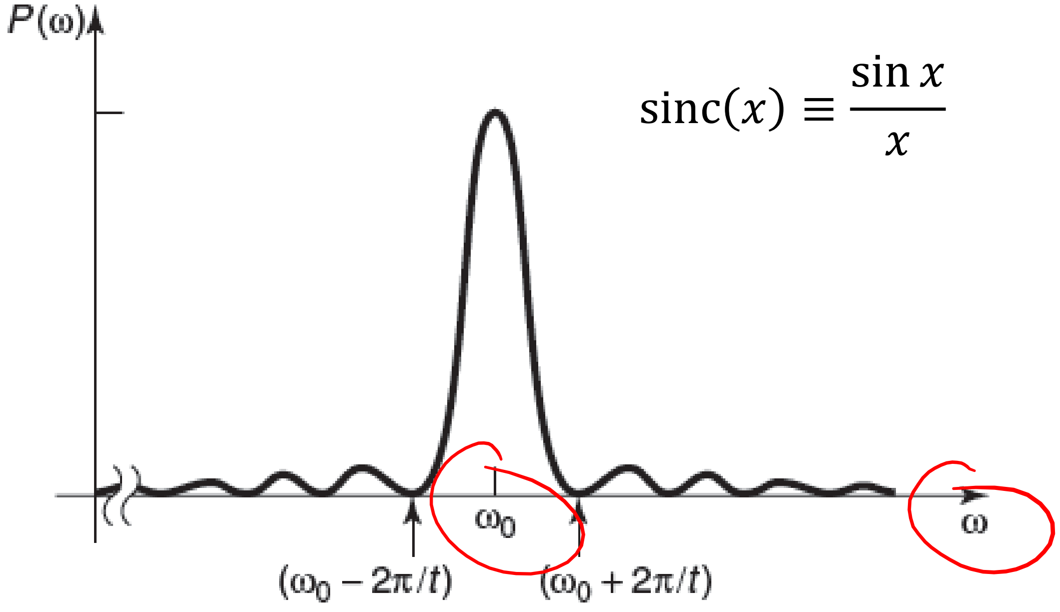
$$\mathcal{P}_{i\to f}(t) = |c_f(t)|^2$$

$$\boxed{\mathcal{P}_{i\to f}(t) \approx \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2[(\omega_o-\omega)t/2)]}{(\omega_o-\omega)^2}}$$

$$c_n(t) \approx -\frac{V_{ni}}{2\hbar}\frac{e^{i(\omega_o-\omega)t/2}}{(\omega_o-\omega)}\left[e^{i(\omega_o-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_o-\omega)t/2}\right]$$

$$= -i\frac{V_{ni}}{\hbar}\frac{\sin[(\omega_o-\omega)t/2)]}{(\omega_o-\omega)}e^{i(\omega_o-\omega)t/2}$$




$$\mathrm{sinc}(x) \equiv \frac{\sin x}{x}$$

# Teoria de Perturbação dependente do tempo

$\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega|$

## Potencial harmônico

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}(t)$$

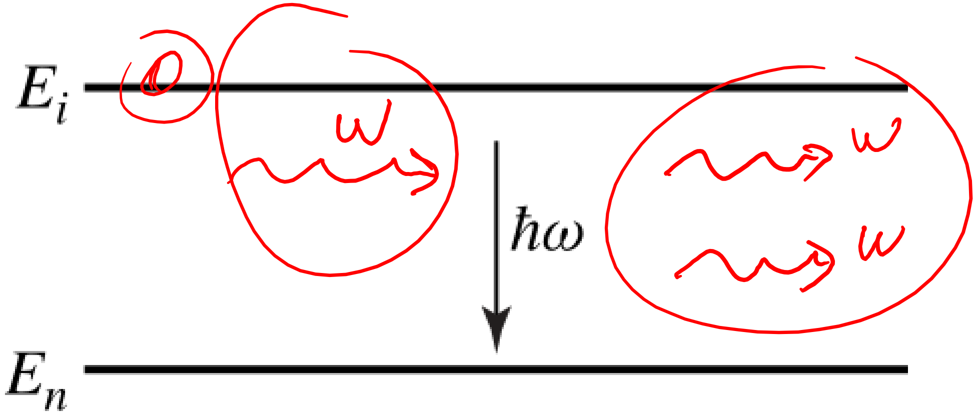
$$\hat{V}(t) = V(\mathbf{r})\,\cos(\omega t)$$

$$c_n(t) \approx -\frac{V_{ni}}{2\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_o+\omega)t}-1}{(\omega_o+\omega)} + \frac{e^{i(\omega_o-\omega)t}-1}{(\omega_o-\omega)}\right]$$

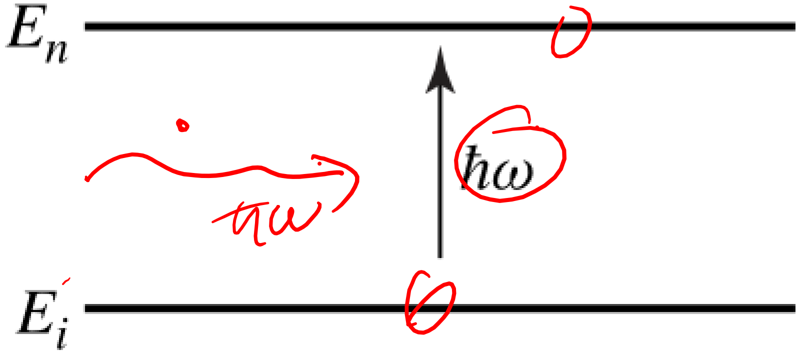
$\omega \approx -\omega_o$ ??😧??

$\omega_o \equiv (E_n - E_i)/\hbar$

Absorção e Emissão estimulada surgem naturalmente da teoria de perturbação...




Emissão estimulada




Absorção