Tecnociencia 2019, Vol. 21, N° 2: 93-106
julio-diciembre 2019

AMPLITUD DE TRANSICIÓN ENTRE CENTROS DE ABSORCIÓN

Miguel Silvera.
Universidad de Panamá, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Tecnología.
Departamento de Física
E-mail: miguel.silvera@up.ac.pa

RESUMEN
Se calcula la integral de transición de un estado oscilatorio a otro estado de fase oscilatorio con diferente punto de equilibrio. Se entiende que las funciones de ondas entre osciladores armónicos forman un sistema completo de funciones ortogonales, no obstante, resulta que la integral de transición entre un nivel energético y otro es diferente de cero. Esto es posible debido a que los osciladores se mueven alrededor de un punto de equilibrio en desface. Se utilizan dos métodos, uno analítico y otro algebraico, que por su forma simétrica nos permite una visión mucho más intuitiva del fenómeno. Se representan los resultados gráficos que comprueban que el proceso de interacción fonón electrón tiene lugar con alta probabilidad junto a los múltiples intercambios de modos entre los centros de absorción.

PALABRAS CLAVES
Integral de transición, operadores de nacimiento y aniquilación, teorema del residuo, estados vibratorios.

AMPLITUDE OF TRANSITION BETWEEN ABSORPTION CENTERS

ABSTRACT

The transition integral is calculated from an oscillatory state to another oscillatory phase state with a different equilibrium point. It is understood that the wave functions between harmonic oscillators form a complete system of orthogonal functions, however, it turns out that the transition integral between one energy level and another is different from zero. This is possible because the oscillators move around a point of balance in desface. Two methods are used, one analytical and the other algebraic, which due to its symmetrical shape allows us a much more intuitive view of the phenomenon. Graphical results are shown that prove that the electron phonon interaction process takes place with high probability together with the multiple mode exchanges between the absorption centers.

KEYWORDS

Integral of transition, operators of birth and annihilation, theorem of the residue, vibratory states.

INTRODUCCION

En la teoría del estado sólido, se llaman procesos multifonónicos a las transiciones, en las cuales la energía de la red en un acto cambia en una magnitud, que en muchas veces (a veces en decenas) supera a la energía de un cuánto. Entendiéndose por fonón una excitación elemental, correspondiente a pequeñas oscilaciones de los núcleos cercanos a los nodos de la red cristalina. En la teoría de la conductividad eléctrica de los átomos de semiconductores, la interacción débil se considera como una perturbación, causante de las transiciones entre los estados electrónicos. En este caso, sin embargo, las transiciones multifonónicas han de surgir solamente en las aproximaciones de órdenes superiores de la teoría de perturbación, y poseer poca probabilidad en contradicción a los factores experimentales mencionados anteriormente

En el presente trabajo, se analizan transiciones ópticas y acústicas entre dos niveles electrónicos discretos de un centro local. La probabilidad de absorción y emisión de luz durante las transiciones de un estado a otro se calcula por los métodos semiclásicos de la teoría de emisión, la cual interpreta el campo de la onda de luz como una frecuencia cíclica Ω. El operador de perturbación se elige como $-(d,E)$ en donde d es el momento dipolar efectivo de un centro de absorción que depende de las coordenadas electrónicas, que incluyen las interacciones adicionales de los electrones locales con el cristal, que surgen como consecuencias de la polarización de los electrones fuertemente enlazados con el campo de la onda de luz. La intensidad se puede escribir como (Kun & Rhys A, 1950, Sinba, 1973, Koch & Oppen, 2005)

$$I = A|d_{ij}|^2 \sum_n \prod_s |\langle N_s'|N_s\rangle|^2 \qquad (1.1)$$

en donde

$$d_{ij} = \int \phi_i^{(o)*}\, \hat{d}\, \phi_j^{(o)}$$

y $\phi_j^{(o)}$ es la función de onda electronica en la aproximaón cero de la teoría de perturbaciones y

$$\langle N_s'|N_s\rangle = \int \Phi(q-q_\alpha)\Phi(q-q_\beta)dq \qquad (1.2)$$

Es la integral de transición de un estado del oscilador con coordenada de equilibrio distintas.

MÉTODOS

Mediante un cálculo analítico calcularemos la integral de Condon que representa la amplitud de probabilidad de que un estado oscilatorio pueda pasar a otro con diferente valor de la coordenada de equilibrio, en otras palabras, la transferencia de energía de un modo fonónico a otro. Se utilizarán dos métodos, el de la función de onda del oscilador (método analítico) y el de la representación de vectores de estado (método algebraico) utilizando para ello los operadores de nacimiento y aniquilación de un fonón.

Calculemos esta integral, de gran importancia para explicar los procesos ligados a la absorción por centros que luego emiten radiación fonónica de una alta coherencia. La fórmula (1.2) podría interpretarse como la probabilidad de que un oscilador con función de onda $\Phi(q-q_\alpha)$ intercambie de estado con otro oscilador, cuya función de onda es $\Phi(q-q_\beta)$. La función de onda tiene la forma

$$\Phi_n(q-q_\alpha)=\frac{e^{-(q-q_\alpha)^2/2}}{\sqrt{2^n n!\pi^{1/2}}}H_n(q-q_\alpha) \quad (1.3)$$

haciendo un cambio de variable $q-q_\alpha=q$ y $\Delta=q_\alpha-q_\beta$ la integral toma la forma

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi\,(q-q_\alpha)\Phi(q-q_\beta)dq=$$
$$\frac{1}{\|H_n\|}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\left[-\left(q^2+q\Delta+\frac{\Delta^2}{2}\right)\right]}H_n(q)H_m(q-\Delta)dq \qquad (1.4)$$

En donde $\|H_n\|$ es la norma de los polinomios de Hermite; Con ayuda de la función generatriz para los polinomios de Hermite y utilizando las propiedades de la integral de Cauchy encontraremos una representación integral para los polinomios de Hermite (Lavrentev. 1987, p549)

$$H_n(q)=\frac{\partial^n\Psi(t,q)}{\partial t^n}|_{t=0}=\frac{n!}{2\pi i}\oint\frac{\Psi(\xi,q)}{\xi^{n+1}} \qquad (1.5)$$

en donde $\Psi(t,q)$ es la funcion generatriz de los polinomios de Hermite.

$$\Psi(t,q)=e^{2tq-t^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}H_n(q) \qquad (1.6)$$
$$\Psi(t,q)=e^{2tq-t^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial^n\Psi(t,q)}{\partial t^n}|_{t=0}\frac{t^n}{n!} \qquad (1.7)$$

Colocando esta representación de los polinomios de Hermite en la integral (1.4), obtenemos

$$I = \frac{1}{\|H_n\|}\frac{n!^2}{(2\pi i)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-q^2 - q\Delta - \frac{\Delta^2}{2}\right)}\, dq \, * \oint \frac{\Psi(\xi,q)}{\xi^{n+1}} d\xi \oint \frac{\Psi(\eta, q+\Delta)}{\eta^{n+1}} d\eta \qquad (1.8)$$

(I.S Gradshteyn and I.M. Ryzhik, 1994). Luego de realizar algunas operaciones algebraicas con los exponentes contenidos en las funciones generatrices de los polinomios se puede integrar por la variable q. Considerando que es una integral de tipo gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{|a|}}\, e^{b^2/4a}$$

es fácil obtener un resultado que permite que una de las integrales de contorno pueda ser calculada por el teorema del residuo

$$\frac{m!}{2\pi i}\oint \frac{\exp((\Delta + 2\xi)\eta)}{\eta^{m+1}} d\eta = (\Delta + 2\xi)^m = 2^m \left(\frac{\Delta}{2} + \xi\right)^m \qquad (1.9)$$

Sustituyendo esta expresión (1.9) y el resultado de la integral gaussiana por la variable q en la integral I obtenemos.

$$I = \frac{2^n n! \sqrt{\pi}}{\|H_n\|} \frac{e^{-\Delta^2/4}}{2\pi i} \oint \frac{e^{\Delta\xi}\left(\frac{\Delta}{2} + \xi\right)^n}{\xi^{n+1}} d\xi \qquad (1.10)$$

La función $\left(\frac{\Delta}{2} + \xi\right)^n$ es un binomio de enesima potencia y por eso se puede descomponer en serie

$$\left(\frac{\Delta}{2}+\xi\right)^n=\sum_{m=0}^{n}\binom{n}{n-m}\left(\frac{\Delta}{2}\right)^m\xi^{n-m} \qquad (1.11)$$

En donde

$$\binom{n}{n-m}=\frac{n!}{(n-m)!}$$

Colocando (1.11) en (1.10)

$$I=e^{-\Delta^2/4}\sum_{m=0}n\binom{n}{n-m}\left(\frac{\Delta}{2}\right)^m\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{e^{-\Delta\xi}}{\xi^{m+1}}d\xi \qquad (1.12)$$

Nuevamente utilizando las propiedades de la integral de Cauchy, la integral por el contorno cerrado es fácil de calcular

$$\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{e^{-\Delta\xi}}{\xi^{m+1}}d\xi=\frac{1}{m!}\frac{d^m e^{-\Delta\xi}}{d\xi^m}|_{\xi=0}=\frac{(-1)^m\Delta^m}{m!} \qquad (1.13)$$

Finalmente obtenemos que la integral es igual

$$\int\Phi(q-q_\alpha)\Phi(q-q_\beta)dq$$
$$=\exp\left(-\frac{\Delta^2}{4}\right)\sum_{m=0}^{n}\binom{n}{n-m}\frac{(-1)^m}{m!}\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)^m \qquad (1.14)$$

La serie obtenida no es más que la definición exacta de los polinomios de Laguerre en forma explicita

$$\mathcal{L}_n\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)=\sum_{m=0}^{n}\binom{n}{n-m}\frac{(-1)^m}{m!}\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)^m \qquad (1.15)$$

De tal manera que podemos reescribir

$$\int\Phi(q-q_\alpha)\Phi(q-q_\beta)dq=\exp\left(-\frac{\Delta^2}{4}\right)\mathcal{L}_n\left(\frac{\Delta^2}{2}\right) \qquad (1.16)$$

Calculemos la integral de Condon de otra manera, empecemos haciendo el cambio de variable $q - q_\alpha = q$ y $\Delta = q_\alpha - q_\beta$.

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-q^2 - q\Delta - \frac{\Delta^2}{2}\right) \mathcal{H}_n(q)\mathcal{H}_n(q+\Delta)dq \qquad (1.17)$$

Encontremos una expresión explicita para los polinomios $\mathcal{H}_n(q+\Delta)$ con ayuda de la función generatriz

$$\exp(2tx - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \mathcal{H}_n(x) \qquad (1.18)$$

para el caso $x = x + \Delta$ tenemos

$$\exp(2t(x+\Delta) - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \mathcal{H}_n(x+\Delta) \qquad (1.19)$$

Por otro lado

$$\exp(2tx - t^2)\exp(\Delta t) = \sum_{k} \sum_{s} \frac{t^{k+s}\Delta^s}{k!\,s!} \mathcal{H}_n(x) \qquad (1.20)$$

Haciendo el siguiente cambio de variable en la expresión (20) $k + s = p$ y $k = l$, cuando $s = 0$ y $p = l$ tenemos que $0 \leq l \geq p$; de tal manera que

$$\exp(2t(x+\Delta) - t^2) = \sum_{p}^{\infty} \sum_{l=0}^{p} \frac{t^p \Delta^{p-l}}{l!\,(p-l)!} \mathcal{H}_l(x) \qquad (1.21)$$

Comparando (1.21) con (1.19) por las potencias de t, obtenemos una expresión para los polinomios

$$\mathcal{H}_n(x+\Delta) = \sum_{l=0}^{n} \binom{n}{n-l} \Delta^{n-l} \mathcal{H}_l(x) \qquad (1.22)$$

Colocando esta expresión en (17)

$$I = \sum_{m=0}^{n} \binom{n}{n-m} (2\mathit{\Delta})^{n-m} \exp\left(-\frac{\mathit{\Delta}^2}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n(q) \exp(-q\mathit{\Delta}) \Psi_m(q) dq \quad (1.23)$$

En donde $\Psi_m(q)$ son las funciones de onda de un oscilador, definidas en la expresión (2). Utilizando la escritura de los vectores bra y ket podemos reescribir

$$I = \sum_{m=0}^{n} \binom{n}{n-m} (2\mathit{\Delta})^{n-m} \exp\left(-\frac{\mathit{\Delta}^2}{2}\right) \langle n|\exp(-q\mathit{\Delta})|m\rangle \qquad (1.24)$$

Para calcular los elementos matriciales cambiemos las coordenadas reales q por su representación a través de los operadores de nacimiento y anihilación para un oscilador armónico.

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \qquad (1.25)$$

Entonces

$$\langle n|\exp(-q\mathit{\Delta})|m\rangle = \langle n|\exp\left(-\frac{\mathit{\Delta}}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)\right)|m\rangle \qquad (1.26)$$

Para calcular los elementos matriciales es necesario encontrar el producto normal de los operadores de nacimiento y anihilación de un fotón, esto se consigue mediante la conocida expresión

$$\exp(\xi(a+b)) = e^{\xi a} e^{\xi b} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}[a,b]\right)$$
$$= e^{\xi b} e^{\xi a} \exp\left(\frac{\xi^2}{2}[a,b]\right) \qquad (1.27)$$

obtenemos que

$$\langle n|\exp(-q\Delta)|m\rangle = \exp\left(\frac{\Delta^2}{4}\right)\langle n|\exp\left(-\frac{\Delta}{\sqrt{2}}a^\dagger\right)\exp\left(-\frac{\Delta}{\sqrt{2}}a\right)|m\rangle \qquad (1.28)$$

Es fácil ver que al descomponer en serie las funciones exponenciales se reciban series con signos alternos, también es evidente que nos interese solo aquellos productos normales de los operadores de nacimiento y anihilación cuyas potencias sean iguales; sin embargo, los signos alternos se pierden para este tipo de productos normales. Tomando en consideración que para una forma cuadrática es correcta la expresión

$$\sum_{i\ j} x_i\, x_j = \sum_i x_i^2 + \sum_{\substack{i\ j\\ i\neq j}} x_i\, x_j \qquad (1.29)$$

Podemos entonces escribir

$$\exp\left(-\frac{\Delta}{\sqrt{2}}a^\dagger\right)\quad \exp\left(-\frac{\Delta}{\sqrt{2}}a\right) = \sum_{s\ k}(-1)^{k+s}\left(\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\right)^{k+s}\frac{a^{\dagger\ k}a^s}{k!\,s!} =$$
$$\sum_k \left(\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\right)^{2k}\frac{a^{\dagger\ k}a^k}{(k!)^2} + \sum_{\substack{k\ s\\ k\neq s}}(-1)^{k+s}\left(\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\right)^{k+s}\frac{a^{\dagger\ k}a^s}{k!\,s!} \qquad (1.30)$$

Por lo que el elemento de matriz se divide en dos partes

$$\langle n|\exp(-q\Delta)|m\rangle = \langle n|\sum_k \left(\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\right)^{2k}\frac{a^{\dagger\ k}a^k}{(k!)^2}|m\rangle +$$
$$\langle n|\sum_{\substack{k\ s\\ k\neq s}}(\ -1)^{k+s}\left(\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\right)^{k+s}\frac{a^{\dagger\ k}a^s}{k!\,s!}|m\rangle \qquad (1.31)$$

Los elementos del segundo miembro de la derecha no tienen sentido físico ya que en ellos se viola la ley de conservación de las partículas en el campo, puesto que no pueden desaparecer dos o tres fotones y aparecer de la "nada" tres o cuatro respectivamente. Por tal razón no los tomaremos en cuenta. Para calcular el primer término utilicemos el siguiente (Loudon. 1973)

Teorema

Para un producto normal $a^{\dagger}a$ de grado r es correcta la ecuación

$$a^{\dagger\, r}a^{r} = a^{\dagger}a(a^{\dagger}a-1)(a^{\dagger}a-2)\cdots(a^{\dagger\, r}a^{r}-r+1) \qquad (1.32)$$

Demostración

Se sabe que

$$[a^{\dagger},\ a^{r}] = -ra^{r-1} \qquad (1.33a)$$

multiplicando la expresión (1.32) por $(a^{\dagger}a-r)$ a la izquierda

$$a^{\dagger\, r}a^{r}(a^{\dagger}a-r) = a^{\dagger}a(a^{\dagger}a-1)(a^{\dagger}a-2)\cdots(a^{\dagger\, r}a^{r}-r+1) * \\ *(a^{\dagger}a-r) \qquad (1.33b)$$

con ayuda de (1.33a) transformamos la parte izquierda de la ecuación (1.33b)

$$a^{\dagger\, r}a^{r}a^{\dagger}a - a^{\dagger\, r}a^{r}r = a^{\dagger\, r}(a^{\dagger\, r}a^{r}+ra^{r-1})a - a^{\dagger\, r}a^{r}r \\ = a^{\dagger\, r+1}a^{r+1} \qquad (1.33c)$$

Este resultado corresponde a la parte izquierda de la ecuación (1.33b), comparando con (1.32) demostramos la igualdad para los productos $a^{\dagger\, r+1}a^{r+1}$ por consiguiente también para $a^{\dagger\, r}a^{r}$.

Entonces el primer termino de (1.31) que corresponde a los elementos matriciales con productos normales de los operadores, obtenemos aplicando el teorema anterior.

$$\langle n|a^{\dagger\, k}a^{k}|m\rangle = \langle n|m(m-1)(m-2)\cdots(m-k+1)|m\rangle \\ = \frac{m!}{(m-k)!}\langle n|m\rangle \qquad (1.34)$$

Entonces podemos escribir que

$$\langle n|\exp\left(-\frac{\Delta}{\sqrt{2}}(a^{\dagger}+a)\right)|m\rangle$$
$$=\exp\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)\sum_{k}\frac{(-1)^k m!}{(k!)^2(m-k)!}\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)^k\langle n|m\rangle \qquad (1.35)$$

Pero si $k > m$ entonces la suma se rompe y por eso $k_{max} = m$, haciendo esto en la expresión (1.24) obtenemos

$$I=\exp\left(-\frac{\Delta^2}{4}\right)\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}(-1)^k\binom{n}{n-m}$$
$$*\binom{m}{m-k}\frac{\Delta^{n-m}}{k!}\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)^k\langle n|m\rangle \qquad (1.36)$$

La integral $\langle n|m\rangle$ es diferente de cero solo cuando $n = m$ entonces la suma por m desaparece y

$$\binom{n}{n-m}=1,\quad \Delta^{n-m}\big|_{m=n}=1 \qquad (1.37)$$

finalmente obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Phi\,(q-q_{\alpha})\Phi(q-q_{\beta})dq$$
$$=\exp\left(-\frac{\Delta^2}{4}\right)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k}{k!}\binom{m}{m-k}\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)^k \qquad (1.38)$$

En donde la suma en la formula no es más que la forma explícita de los polinomios de Laguerre.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Phi\,(q-q_{\alpha})\Phi(q-q_{\beta})dq=\exp\left(-\frac{\Delta^2}{4}\right)\mathcal{L}_n\left(\frac{\Delta^2}{2}\right)(1.39)$$

En las siguientes graficas del resultado (1.39), se puede observar que, para valores pequeños de n, ($n = 0{,}1{,}2$) (Ver Fig. 1) el aporte energético de la integral es poco en comparación a valores mayores de n ($n = 3{,}4{,}5$) (Ver fig. 2). Por otra parte, se observa el aumento de las veces que la curva corta el plano, que se traduce en la participación de mayores números de modos oscilatorios, aumentando la posibilidad de intercambio entre los modos de oscilación de los centros de absorción

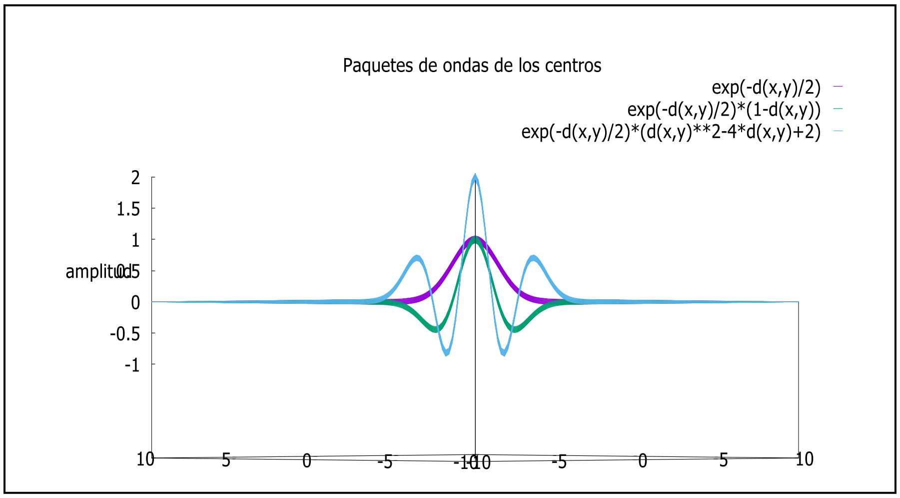

Fig. 1 Amplitud de transición entre centros. n=0,1,2

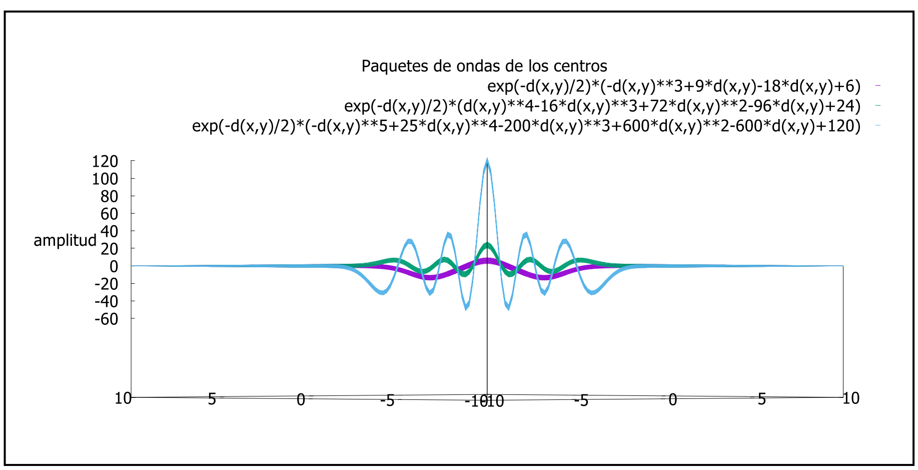

Fig. 2 Amplitud de transición entre centros. n=3,4,5

Por último, vemos que la Intensidad tiene el comportamiento típico de un escenario de difracción con el primer máximo central y los otros menores distribuidos a los lados (Ver fig. 3).

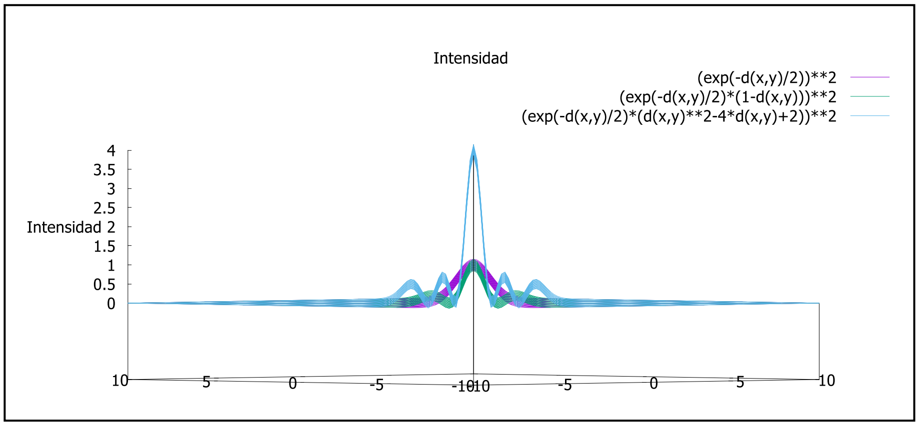

Fig. 3 Cuadrado de la amplitud de transición.

CONCLUSIONES

Hemos demostrado que la transición entre estados fonónicos con diferentes centros de oscilación son permisibles en una red cristalina, haciendo posible una emisión fonónica colectiva.

Este tipo de interacción se observa experimentalmente en el fenómeno de focalización de fonones por centros de absorción.

La interacción entre centros de absorción con diferentes niveles energéticos y su intercambio nos conduce a un escenario colectivo de emisión y absorción de fonones por toda la red y la posibilidad de intercambio de un centro por otro.

La intensidad depende en este caso directamente de la interacción electrón fonón, que a su vez es proporcional a la integral de transición entre fonónes, por lo que, al aumentar los modos de oscilación de la red, esta se verá aumentada.

REFERENCIAS

Lavrentev, M. A & Shabat, B. V. (1987). Method of theory complex function. Moscow. Nauka.

Loudon, R. (1973). The Quantum theory of light. Oxford. Clarendon Press.

Sinba, S. K. (1973) Phonons in semiconductors, C R C Critical Reviews in Solid.

State Sciences, 3:3, 273-334

Kun Huang and Rhys A, Proc. Roy. Soc. Load A204, p. 406-423 (1950).

Jens Koch and Felix Von Oppen PRL 94, 206804 (2005)

Gradshteyn, S. and Ryzhik, I. M. Table of Integrals, Series, and Products, 5ed. (Academic Press, New York, 1994)

Recibido 29 de octubre de 2018, aceptado 13 de junio de 2019.