Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Física

FIZ 0412 Mecánica Cuántica
Profesor: Max Bañados
Ayudantes: Ariel Norambuena *ainoramb@uc.cl*

Guía 3: Teoría de pertubaciones tiempo independiente

3 de Mayo de 2013

1. Función de onda a segundo orden: caso no degenerado

Demuestre que la corrección a segundo orden de la función de onda en teoría de perturbaciones no degenerada está dada por

$$\mid \psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{l\neq m}\sum_{m\neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)}\rangle\langle \psi_l^{(0)} \mid H' \mid \psi_m^{(0)}\rangle}{\left(E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)}-E_l^{(0)}\right)} \mid \psi_l^{(0)}\rangle - \sum_{l\neq n} \frac{\langle \psi_l^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)}\rangle\langle \psi_n^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)}\rangle}{\left(E_n^{(0)}-E_l^{(0)}\right)^2} \mid \psi_l^{(0)}\rangle,$$

donde $H_0 \mid \psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \mid \psi_n^{(0)}\rangle$ y el Hamiltoniano completo del sistema está dado por $H = H_0 + \lambda H'$. Se le recomienda seguir la misma derivación hecha en clases, para ello expanda

$$E_n = E_n^{(1)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots, \qquad \mid \psi_n\rangle = \mid \psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \mid \psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \mid \psi_n^{(2)}\rangle + \ldots$$

siendo $\mid \psi_n\rangle$ y E_n las autofunciones de onda y autoenergías del Hamiltoniano H, es decir, $H \mid \psi_n\rangle = E_n \mid \psi_n\rangle$.

2. Electroabsorption quantum well

Considere un electrón de masa m y carga $-e$ ($e > 0$) que está inmerso en un pozo de potencial unidimensional de ancho $2L$. El pozo de potencial es modelado con el siguiente Hamiltoniano

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}, \qquad -L < x < L,$$

Suponga que se aplica un campo eléctrico débil $\boldsymbol{E} = E_x\hat{x}$ que genera un interacción Coulombiana con electrón del pozo cuántico y que está dada por el Hamiltoniano

$$H' = -eE_x x, \qquad e > 0,$$

(a) Encuentre las funciones de onda normalizadas $\mid \psi_n^{(0)}\rangle$ y los niveles de energía $E_n^{(0)}$ asociado al problema

$$H_0 \mid \psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \mid \psi_n^{(0)}\rangle,$$

demuestre que

$$\mid \psi_n^{(0)}\rangle = \sqrt{\frac{1}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{2L}(x-L)\right), \qquad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8mL^2}, \qquad n = 1,2,3,...$$

Note que los valores de n negativos no son considerados puesto que generan funciones de onda idénticas, salvo un cambio de signo. Por lo tanto, en este problema *no hay degeneración.*

(b) Al resolver de manera perturbativa el Hamiltoniano

$$H = H_0 + \lambda H', \qquad \lambda = 1 \text{ (perturbation on)}, \qquad \lambda = 0 \text{ (perturbation off)},$$

se pueden hallar las funciones de onda $\mid \psi_n \rangle$ y los niveles de energía E_n asociados al problema

$$H \mid \psi_n \rangle = E_n \mid \psi_n \rangle,$$

donde

$$\mid \psi_n \rangle = \mid \psi_n^{(0)} \rangle + \lambda \mid \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \mid \psi_n^{(2)} \rangle + \dots \qquad E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda E_n^{(2)} + \dots,$$

Demuestre que

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)} \rangle = 0,$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle \psi_m^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{1}{E_1^{(0)}} \left(\frac{8eE_x L^2}{\pi^2} \right)^2 \sum_{m \neq n} \frac{\left(1 + (-1)^{1+n+m}\right)^2}{(n^2 - m^2)^5} n^2 m^2,$$

para ello use las siguientes integrales

$$\int_{-L}^{L} x \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2L} (x - L) \right) dx = 0,$$

$$\int_{-L}^{L} \sin \left(\frac{m\pi}{2L} (x - L) \right) x \sin \left(\frac{n\pi}{2L} (x - L) \right) dx = \frac{8L^2}{\pi^2} \frac{nm(1 + (-1)^{1+m+n})}{(n^2 - m^2)^2},$$

(c) Usando $\lambda = 1$ demuestre que para $n = 1$, a segundo orden en teoría de perturbaciones se obtiene que

$$E_1 \approx E_1^{(0)} - \alpha \frac{8}{E_1^{(0)}} \left(\frac{8eE_x L^2}{\pi} \right)^2,$$

con $\alpha = 0{,}004$ para ello use el siguiente resultado

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{m^2}{(1 - 4m^2)^5} = \frac{\pi^4}{12288} - \frac{5}{4096} \pi^2 \approx -0{,}004,$$

esto quiere decir que la perturbación disminuye la energía del ground state del sistema.

3. Oscilador Armónico perturbado con x^4

Considere un oscilador armónico unidimensional cuyo Hamiltoniano está dado por

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2,$$

sabemos que al resolver el problema de autovalores

$$H_0 \mid \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \mid \psi_n^{(0)} \rangle,$$

se obtiene que los niveles de energía están dados por

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n \right), \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

y que usando los operadores de creación y destrucción definidos como

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right), \qquad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right),$$

respectivamente, se puede escribir el hamiltoniano del sistema como

$$H_0 = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + a^\dagger a\right),$$

donde la acción de estos operadores sobre la base de funciones de onda $\mid \psi_n^{(0)}\rangle$ está dada por

$$a^\dagger \mid \psi_n^{(0)}\rangle = \sqrt{n+1} \mid \psi_{n+1}^{(0)},\rangle, \qquad a \mid \psi_n^{(0)}\rangle = \sqrt{n} \mid \psi_{n-1}^{(0)}\rangle,$$

Considere que el sistema es perturbado con un Hamiltoniano de la forma $H' = x^4$, demuestre que usando teoría de perturbaciones no degenerada a segundo orden y un sistema de unidades en donde $\hbar/(2m\omega) = 1$, la corrección a la energía del ground state estará dada por

$$E_0 = E_0^{(0)} + \lambda E_0^{(1)} + \lambda^2 E_0^{(2)} + \ldots = 1 + \frac{3}{4}\lambda - \frac{21}{16}\lambda^2 + \ldots$$

Para resolver este problema se recomienda expresar

$$H' = x^4 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (a^\dagger + a)^4 = (a^\dagger + a)^4,$$

y usar la acción de los operadores de subida y bajada al momento de calcular valores de expectación. Note que la última igualdad se debe únicamente a las unidades utilizadas.

4. Solución exacta v/s teoría de perturbaciones

Considere el siguiente Hamiltoniano

$$H = H_0 + \lambda H, \qquad H_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}, \qquad H' = \begin{pmatrix} 0 & ia \\ -ia & 0 \end{pmatrix},$$

(a) Resuelva el problema de autovalores de manera exacta, es decir, resuelva

$$H \mid \psi_n\rangle = E_n \mid \psi_n\rangle,$$

y demuestre que

$$E_1 = \frac{\varepsilon_1}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \tan^2\theta}\right) + \frac{\varepsilon_2}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \tan^2\theta}\right),$$
$$E_2 = \frac{\varepsilon_1}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \tan^2\theta}\right) + \frac{\varepsilon_2}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \tan^2\theta}\right),$$

donde

$$\tan\theta = \frac{2\lambda a}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2},$$

y que los autofunciones de onda son

$$\mid \psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ -i\sin\theta/2 \end{pmatrix}, \qquad \mid \psi_2\rangle = \begin{pmatrix} -i\sin\theta/2 \\ \cos\theta/2 \end{pmatrix},$$

(b) Ahora use teoría de perturbaciones, primero, resuelva el problema

$$H_0 \mid \psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \mid \psi_n^{(0)}\rangle,$$

y luego con ello encuentre las correcciones a primer y segundo orden de la energía, es decir

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(0)} + ...$$

encuentre $E_n^{(1)}$ y $E_n^{(2)}$ para $n = 1, 2$.

(c) Compare el resultado exacto con el resultado perturbativo, para ello expanda en series de Taylor en resultado exacto, usando que

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x, \qquad \text{para } x = \tan^2\theta \ll 1,$$

esto quiere decir que $a\lambda/(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \ll 1$, lo que se puede justificar al considerar que H' es una perturbación al Hamiltoniano H_0 cuando $a \ll \varepsilon_i$ $(i = 1, 2)$.

5. Ecuación secular: perturbaciones con degeneración f

Supongamos que queremos resolver la ecuación de Schrödinger

$$H \mid \phi_n\rangle = E_n \mid \phi_n\rangle, \qquad H = H_0 + \lambda H'$$

siendo $H' \ll H_0$ la perturbación. En el caso degenerado se tiene que $H_0 \mid \phi_i^{(0)}\rangle = E_1^{(0)} \mid \phi_i^{(0)}\rangle$ para $i = 1, 2, ..., f$, es decir

$$\underbrace{\mid \phi_1^{(0)}\rangle, \mid \phi_2^{(0)}\rangle, ..., \mid \phi_f^{(0)}\rangle}_{\text{estados con la misma energía } E_1^{(0)}} \qquad \underbrace{\mid \phi_{f+1}^{(0)}\rangle, \mid \phi_{f+2}^{(0)}\rangle, ...}_{\text{estados con diferente energía}} \qquad ,$$

usando la expansión

$$\mid \phi_n\rangle = \sum_{i=1}^{f} a_i^{(n)} \mid \phi_i^{(0)}\rangle, \qquad a_i \in \mathbb{C},$$

y luego reemplazándola en la ecuación de Schrödinger $H \mid \phi_n\rangle = E_n \mid \phi_n\rangle$, usando la ortogonalidad de las funciones de onda, *i.e*, $\langle \phi_j^{(0)} \mid \phi_i^{(0)}\rangle = \delta_{ji}$ y ocupando

$$H_0 \mid \phi_i^{(0)}\rangle = E_1^{(0)} \mid \phi_i^{(0)}\rangle, \qquad i = 1, 2, .., f$$

demuestre que se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$a_j^{(n)} \left(E_1^{(0)} - E_n + \lambda H'_{ji} \right) + \sum_{i \neq j, i=1}^{f} a_i^{(n)} H'_{ji} = 0,$$

donde

$$H'_{ji} = \langle \psi_j^{(0)} \mid H' \mid \psi_i^{(0)}\rangle,$$

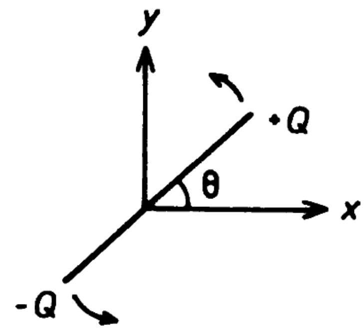
dado que queremos resolver este sistema matricial para los coeficientes $a_i^{(n)}$ de manera de no obtener soluciones triviales, imponiendo que el determinando del sistema sea igual a cero, deduzca la famosa *ecuación secular*

$$\begin{vmatrix} \left(E_1^{(0)} - E_n + \lambda H'_{11}\right) & \lambda H'_{12} & ... & \lambda H'_{1f} \\ \lambda H'_{21} & \left(E_1^{(0)} - E_n + \lambda H'_{22}\right) & ... & \lambda H'_{2f} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda H'_{1f} & \lambda H'_{2f} & ... & \left(E_1^{(0)} - E_n + \lambda H'_{ff}\right) \end{vmatrix} = 0, \qquad \text{ecuación secular}$$

donde se tiene que hallar E_n como solución de este determinante.

6. Rotor Cuántico

Considere dos partículas de igual masa que están separadas a una distancia d fija, ambas partćulas tienen cargas opuestas y por ende forman un dipolo eléctrico. Este dipolo eléctrico puede rotar en el plano XY con respecto al eje que pasa por su centro, tal como se muestra en la figura



Como el rotor puede girar entonces su Hamiltoniano H_0 está asociado a su energía rotacional, de esta manera

$$H_0 = \frac{L}{2I},$$

donde $L = |\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}|$ es el momentum angular e I es su momento de inercia. Usando coordenadas polares y promoviendo $\boldsymbol{p} = -i\hbar\nabla$ se obtiene que

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\theta^2},$$

Suponga que en cierto momento se coloca un campo eléctrico débil $\boldsymbol{E} = E_x\hat{x}$ que genera una interacción dipolar eléctrica dada por el Hamiltoniano

$$H' = -QdE_x\cos\theta,$$

(a) Resuelva el problema $H_0 \mid \psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \mid \psi_n^{(0)}\rangle$ y demuestre que las autofunciones de onda normalizadas del rotor cuántico están dadas por

$$\mid \psi_n^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta}, \qquad n = 0, \pm1, \pm2, ...$$

y que los niveles de energía son simplemente

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 n^2}{2I}, \qquad n = 0, \pm1, \pm2, ...$$

(b) Dado que todas las funciones de onda $\mid \psi_{\pm n}^{(0)}\rangle$ poseen la misma energía, entonces estamos bajo un problema con doble degeneración, donde $H = H_0 + \lambda H'$. Usando teoría de perturbaciones degeneradas para

$$\mid \psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta}, \qquad \mid \psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-in\theta},$$

calcule los elementos de matrices H'_{11}, H'_{22} y H'_{12}, y usando la ecuación secular para $E_1^{(0)} = E_{\pm n}^{(0)}$ encuentre los niveles de energía E_n que son los niveles de energía tales que $H \mid \phi_n\rangle = E_n \mid \phi_n\rangle$.

(c) Usando la ecuación

$$a_j^{(n)}\left(E_k^{(0)} - E_n + \lambda H'_{ji}\right) + \sum_{i\neq j, i=1}^{2} a_i^{(n)} H'_{ji} = 0$$

encuentre los coeficientes $a_j^{(n)}$ una vez que ya ha encontrado las dos soluciones para E_n. Estos coeficientes nos permiten escribir

$$\mid \phi_n\rangle = \sum_{m=1}^{2} a_m^{(n)} \mid \psi_m\rangle,$$

y así construir un autoestado del Hamiltoniano completo $H = H_0 + \lambda H'$ cuya energía es E_n (halladas en la parte (b)).

7. Perturbaciones con degeneración triple: La caja cuántica 3D

Considere un pozo de potencial cúbico de largo L cuyas autofunciones de onda está dadas por

$$\mid \psi^{(0)}_{n_1,n_2,n_3}\rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_1\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{n_3\pi z}{L}\right),$$

donde $0 < x < L$, $0 < y < L$ y $0 < z < L$. Los niveles de energía están dados por

$$E^{(0)}_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right), \qquad n_i \in \mathbb{N},$$

en este sistema se observa que el primer estado excitado posee degeneración triple, en otras palabras, las funciones de onda

$$\mid \psi_1\rangle = \mid \psi^{(0)}_{112}\rangle, \qquad \mid \psi_2\rangle = \mid \psi^{(0)}_{121}\rangle, \qquad \mid \psi_3\rangle = \mid \psi^{(0)}_{211}\rangle$$

poseen la misma energía, puesto que $E_1^{(0)} \equiv E_{112} = E_{121} = E_{211} = 3\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}$. Supongamos que se introduce la perturbación

$$H' = \begin{cases} V_0 & \text{si} \qquad 0 < x < a/2 \quad 0 < y < a/2 \\ 0 & \text{en cualquier otro lugar} \end{cases},$$

de modo que $H = H_0 + \lambda H'$. Usando la ecuación secular para $f = 3$ demuestre que

$$E_1 = 3\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \begin{cases} \lambda\frac{V_0}{4} & \text{para} & \mid \psi_1\rangle \\ \lambda(1+k)\frac{V_0}{4} & \text{para} & \mid \psi_2\rangle \\ \lambda(1-k)\frac{V_0}{4} & \text{para} & \mid \psi_3\rangle \end{cases}$$

donde $k = (8/3\pi)^2$.

8. Red Balmer line: Fine Structure

Considere el átomo de Hidrógeno y todas las transiciones posibles de $n = 3$ hacia $n = 2$ debidas a la estructura fina. Recuerde que la corrección perturbativa a primer orden de la estructura fina está dada por

$$E^{(1)}_{nj} = \langle H_{sf}\rangle = \frac{E_n^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+\frac{1}{2}}\right),$$

donde

$$E_n = -\frac{13{,}6 \text{ eV}}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

es el espectro del átomo de Hidrógeno sin perturbar. Para resolver este problema haga lo siguiente

(a) Primero calcule todas las energías posibles para $n = 2$ y $n = 3$, para ello recuerde que

$$l = 0, ..., n-1, \qquad j = |l - 1/2|, ..., l + 1/2$$

donde el número cuántico $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ es el momentum angular total, siendo $\boldsymbol{L}$ el momentum angular orbital y $\boldsymbol{S}$ el momentum angular de spin del electrón ($s = 1/2$).

(b) Luego encuentre las 6 transiciones posibles desde $n = 3$ hacia $n = 2$, dibújelas todas y encuentre la frecuencia del fotón emitido en cada transición.

9. Hyperfine Splitting: The 21 cm line in Astrophysics

El hamiltoniano de la estructura hiperfina está dado por

$$H'_{hs} = \frac{\mu_0 g e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{1}{r^3} \left(3(\boldsymbol{S}_p \cdot \hat{r})(\boldsymbol{S}_e \cdot \hat{r}) - \boldsymbol{S}_p \cdot \boldsymbol{S}_e\right) + \frac{\mu_0 g e^2}{3 m_p m_e} \boldsymbol{S}_p \cdot \boldsymbol{S}_e \delta^3(\boldsymbol{r}),$$

donde $\boldsymbol{S}_p$ y $\boldsymbol{S}_e$ son los operadores de spin del protón y el electrón, respectivamente. El factor $g = 2$. Usando teoría de perturbaciones tiempo independiente no degeneradas para el caso en que quiere perturbar el estado fundamental del átomo de Hidrógeno, es decir, cuando el átomo se encuentra en el estado

$$|\,\psi_{100}\rangle = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^3}} e^{-r/a},$$

usted puede hallar la corrección a primer orden debido a este Hamiltoniano, para ello haga lo siguiente

(a) Calcule el valor expectación $\langle H'_{hs}\rangle$ usando el estado $|\,\psi_{100}\rangle$, para ello primero demuestre que

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (\boldsymbol{a} \cdot \hat{r})(\boldsymbol{b} \cdot \hat{r}) \sin\theta \, d\theta \, d\phi = \frac{4\pi}{3} (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}), \qquad \forall \ \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^3,$$

use $\hat{r} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\cos\phi, \cos\theta)$. Usando esta identidad demuestre que por un parte

$$\langle \frac{1}{r^3} \left(3(\boldsymbol{S}_p \cdot \hat{r})(\boldsymbol{S}_e \cdot \hat{r}) - \boldsymbol{S}_p \cdot \boldsymbol{S}_e\right)\rangle = 0,$$

(b) Ahora demuestre que

$$\langle H'_{hs}\rangle = \frac{4 g \hbar^4}{3 m_p m_e^2 c^2 a^4} \frac{1}{2} \left(S(S+1) - \frac{3}{2}\right),$$

para tendrá que usar el radio de Bohr dado por

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2},$$

y la relación $\mu_0 \varepsilon_0 = c^{-2}$. Además le será útil trabajar con el operador de spin del sistema electrón-protón $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_p + \boldsymbol{S}_e$, de modo que

$$\boldsymbol{S}_p \cdot \boldsymbol{S}_e = \frac{1}{2}\left(S^2 - S_p^2 - S_e^2\right),$$

(c) Demuestre que el fotón emitido en la transición del estado triplete $S = 1$ al estado singlete $S = 0$ tiene una longitud de onda

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{\Delta E} = 21 \ cm,$$

que es la famosa línea