Guía 8 - Problema 7

Un sistema de tres niveles tiene una matriz hamiltoniana perturbada

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix},$$

donde $E_2 > E_1$, y las cantidades a y b son los elementos de matriz de la perturbación (su orden de magnitud es pequeño respecto de $E_2 - E_1$). Use la teoría de perturbaciones del caso no degenerado para calcular los autovalores a segundo orden. ¿Es este procedimiento correcto? Luego diagonalice la matriz y encuentre los autovalores en forma exacta. Finalmente, use la teoría de perturbaciones a segundo orden para el caso degenerado. Compare los tres resultados obtenidos.

(1)

Primero vamos a calcular los autovalores de manera exacta, que es una de las cosas que nos pide el ejercicio. Simplemente tenemos que diagonalizar la matriz Hamiltoniana, así como nos la da el enunciado. Sus autovalores, E, serán las energías exactas del sistema. Es fácil ver que:

$$\det\begin{pmatrix} E_1 - E & 0 & a \\ 0 & E_1 - E & b \\ a^* & b^* & E_2 - E \end{pmatrix} = (E_1 - E)^2 - (E_2 - E) - (E_1 - E)(|b|^2 + |a|^2) = 0 \tag{1}$$

Esto nos da como resultado, o bien $E = E_1$, o bien:

$$E = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1 - E_2)^2}{2} + |a|^2 + |b|^2} \tag{2}$$

Entonces, si ahora, teniendo el resultado exacto, suponemos que los términos no-diagonales son una perturbación (es decir, si suponemos que $a, b << E_1, E_2$, como indica el enunciado), podemos expandir la raiz, obteniendo las soluciones perturbativas para las tres energías (al orden más bajo no trivial, que es orden cuadrático en $|a|$ y $|b|$):

$$\begin{aligned} E =& E_1 \\ E =& E_1 + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1 - E_2} \\ E =& E_2 - \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1 - E_2} \end{aligned}$$

(2)

Después, el ejercicio nos pide que utilicemos la teoría de perturbaciones para el caso no-degenerado. Obviamente, no esperamos que esto nos de el resultado correcto, ya que el problema de hecho **es** degenerado. Escribimos, logicamente, la matriz de perturbación en la base en la que nos da el enunciado escrita la matriz hamiltoniana, a la que llamaremos $\{ |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle \}$. Esta base cumple que:

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{pmatrix}$$

A primer orden, las contribuciones a las energías son claramente nulas, dado que $\Delta_k^{(1)} = \langle k| V |k\rangle = 0$, de modo que tenemos que mirar qué pasa a segundo orden.

Seguramente habrán notado que, en un caso general, si uno no se diera cuenta de que hay una degeneración y quisiera utilizar el método de perturbaciones para el caso no degenerado, terminaría dandose cuenta del error porque en algún momento aparecería en un denominador, la resta de dos energías que valen lo mismo. Sin embargo, notemos que en este caso los elementos de matriz que aparecen en los numeradores son nulos, es decir, por ejemplo, el término:

$$\frac{|\langle 1| V |2\rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0} \tag{3}$$

se anula porque que $\langle 1| V |2\rangle = 0$, a pesar de que $E_1^0 = E_2^0 = E_1$ (hemos llamado E_k^0 a la enrgía de orden cero del estado $|k\rangle$). Las correcciones de segundo orden a la energía estarán dadas, entonces, por:

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{(2)} &= \sum_{k\neq 1} \frac{|\langle k| V |1\rangle|^2}{E_1^0 - E_k^0} = \frac{|\langle 3| V |1\rangle|^2}{E_1^0 - E_3^0} = \frac{|a|^2}{E_1 - E_2} \\
\Delta_2^{(2)} &= \sum_{k\neq 2} \frac{|\langle k| V |2\rangle|^2}{E_2^0 - E_k^0} = \frac{|\langle 3| V |2\rangle|^2}{E_2^0 - E_3^0} = \frac{|b|^2}{E_1 - E_2} \\
\Delta_3^{(2)} &= \sum_{k\neq 3} \frac{|\langle k| V |3\rangle|^2}{E_3^0 - E_k^0} = -\frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1 - E_2}
\end{aligned}$$

Notemos que el único caso que coincide con lo que encontramos perturbando la solución exacta es el que corresponde al subespacio no degenerado (es decir, $E_3^0 + \Delta_3^{(2)}$ coincide con lo encontrado en el punto anterior). Ahora vamos a usar la teoría de perturbaciones para el caso degenerado para encontrar las correcciones correctas a la energía dentro del subespacio degenerado.

(3)

Como la matriz de la perturbación V en el subespacio degenerado asociado a E_1 es $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, nuevamente no vamos a obtener ninguna corrección a primer orden. Y acá tenemos que mirar el probelma con cuidado, porque si la degeneración no se rompe completamente a primer orden, el método que da el Sakurai para encontrar la corrección a segundo orden, es decir, la ecuación (5.2.15), **no funciona**.

Entonces, lo que queremos es resolver el problema $(H_0+V)\,|q\rangle = E\,|q\rangle$ en el subespacio degenerado de dimensión dos (es decir, habrá dos soluciones exactas $|q\rangle$ independientes). Consideramos una expansión de la forma:

$$\begin{aligned}
|q\rangle &= |q^0\rangle + |q^1\rangle + ... \\
E &= E^0 + \Delta^{(1)} + ...
\end{aligned}$$

donde los superíndices indican el orden en la expansión perturbativa, y el superíndice cero indica la solución para el Hamiltonaino sin perturbación, es decir, $H_0\,|q^0\rangle = E^0\,|q^0\rangle$. El vector $|q^0\rangle$ que aparece aquí lo pensamos como perteneciente al subespacio degenerado que llamaremos D_1. Insertando esta expansión en la ecuación de autovalores $(H_0 + V)\,|q\rangle = E\,|q\rangle$, tenemos:

$$(E^0 - H_0)[\,|q^0\rangle + |q^1\rangle + ...] = (V - \Delta^{(1)} - \Delta^{(2)} - ...)[\,|q^0\rangle + |q^1\rangle + ...] \tag{4}$$

Miremos lo que pasa a primer orden:

$$(E^0 - H_0)\,|q^1\rangle = (V - \Delta^{(1)})\,|q^0\rangle \tag{5}$$

Pero antes ya vimos que $\Delta^{(1)} = 0$. Ahora, multiplico a izquierda por un bra que **no pertenece** al subespacio D_1, $\langle k^0|$,

$$\begin{aligned}
\langle k^0| E^0 - H_0\,|q^1\rangle &= \langle k^0| V\,|q^0\rangle \\
(E^0 - E_k)\langle k^0|\,|q^1\rangle &= \langle k^0| V\,|q^0\rangle
\end{aligned}$$

Entonces, podemos despejar $|q^1\rangle$:

$$|q^1\rangle = \sum_{k\notin D_1} \frac{|k^0\rangle\langle k^0| V\,|q^0\rangle}{E^0 - E_k} \tag{6}$$

Ahora miramos la expresión de (4) a segundo orden,

$$(E^0 - H_0) |q^2\rangle = V |q^1\rangle - \Delta^{(2)} |q^0\rangle \tag{7}$$

Multiplicamos a izquierda por otro estado del subespacio D_1 que llamamos $\langle p^0|$, y de esta manera se anula el miembro izquierdo de la ecuación, resultando:

$$0 = \langle p^0| V |q^1\rangle - \Delta^{(2)} \langle p^0| q^0\rangle \tag{8}$$

Usamos entonces la expresión para $|q^1\rangle$ dada por (6), y tenemos:

$$\sum_{k \notin D_1} \frac{\langle p^0| V |k^0\rangle \langle k^0| V |q^0\rangle}{E^0 - E_k} = \Delta^{(2)} \langle p^0| q^0\rangle \tag{9}$$

Ahora metemos una identidad más, de la forma $1 = \sum_n |n^0\rangle\langle n^0|$:

$$\sum_n \sum_{k \notin D_1} \frac{\langle p^0| V |k^0\rangle \langle k^0| V |n^0\rangle}{E^0 - E_k} \langle n^0 |q^0\rangle = \Delta^{(2)} \langle p^0| q^0\rangle \tag{10}$$

Notemos que

$$1 = \sum_n |n^0\rangle\langle n^0| = \sum_{n \in D_1} |n^0\rangle\langle n^0| + \sum_{n \notin D_1} |n^0\rangle\langle n^0| \tag{11}$$

Ahora bien, como $|q^0\rangle$ está dentro de D_1, el producto $\langle n^0 |q^0\rangle$ será nulo a menos que $\langle n^0|$ pertenezca a D_1. De esta manera, la suma sobre n se reduce a una suma sólo para $n \in D_1$:

$$\sum_{n \in D_1} \sum_{k \notin D_1} \frac{\langle p^0| V |k^0\rangle \langle k^0| V |n^0\rangle}{E^0 - E_k} \langle n^0 |q^0\rangle = \Delta^{(2)} \langle p^0| q^0\rangle \tag{12}$$

Esto es una ecuación de autovalores de la forma $\sum_{n \in D_1} M_{pn} x_n = \Delta^{(2)} x_p$, con:

$$M_{pn} = \sum_{k \notin D_1} \frac{\langle p^0| V |k^0\rangle \langle k^0| V |n^0\rangle}{E^0 - E_k}$$
$$x_p = \langle p^0| q^0\rangle$$

Ahora, los índices p y n hacen referencia a los estados del subespacio degenerado que llamamos D_1 y que es generado por $\{ |1\rangle, |2\rangle \}$, de modo que podemos evaluar fácilmente los elementos de matriz de M:

$$M_{11} = \frac{|a|^2}{E_1 - E_2} \qquad M_{12} = \frac{ab^*}{E_1 - E_2}$$
$$M_{21} = \frac{|a^* b}{E_1 - E_2} \qquad M_{22} = \frac{|b|^2}{E_1 - E_2}$$

Y entonces podemos sin mayor problema resolver el problema de autovalores, considerando $\lambda = \Delta^{(2)}(E_1 - E_2)$:

$$\det \begin{pmatrix} |a|^2 - \lambda & ab^* \\ a^* b & |b|^2 - \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - (|a|^2 + |b|^2)\lambda = 0 \tag{13}$$

Esto resulta en que:

$$\Delta_1^{(2)} = 0$$
$$\Delta_2^{(2)} = \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1 - E_2}$$

Y vemos que obtenemos los resultados correctos para el subespacio degenerado (el resultado correcto para el subespacio no degenerado fue obtenido en el ítem anterior).