Física Teórica II, Primer cuatrimestre 2013. Segundo Parcial, tercer ejercicio

3) Considere un péndulo gravitatorio cuántico cuyo Hamiltoniano viene dado por

$$\hat{H} = \frac{p_\varphi^2}{2ml^2} - \lambda \cos\varphi$$

donde $\lambda = mgl$ es una constante con unidades de energía, φ es un ángulo $\varphi \in [0, 2\pi)$ y p_φ puede escribirse en el espacio de las coordenadas como $p_\varphi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

a) Para $\lambda = 0$ calcule todas las autofunciones (normalizadas) $\psi_n(\varphi)$ y autovalores E_n de este hamiltoniano teniendo en cuenta que las autofunciones deben ser 2π–periodicas. Esto es, $\hat{H}\psi_n(\varphi) = E_n\psi_n(\varphi)$ y $\psi(2\pi) = \psi(0)$

b) Usando teoría de perturbaciones en λ, calcule la primer corrección perturbativa no trivial a todos los niveles de energía de este problema.

$$\text{Integrales útiles:} \quad \forall q \in \mathbb{Z} \quad \int_0^{2\pi} e^{iq\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{q,0} \qquad \int_0^{2\pi} e^{iq\varphi}\cos(\varphi) d\varphi = \pi(\delta_{q,-1} + \delta_{q,1}) \tag{1}$$

Como les comenté a algunos durante el parcial, solo unas cinco o seis personas a eso de las 9 de la noche se dieron cuenta que el problema tenía degeneración y que por ende la resolución del mismo tenía la sutileza de que uno debe considerar la teoría de perturbaciones degenerada. Sin embargo, como les voy a mostrar acá, la diferencia entre aplicar teoría de perturbaciones degenerada y no degenerada, a este orden (segundo orden), solo produce una diferencia en la corrección de energía del primer excitado y el resto de las energías se corrigen de igual manera.

Teniendo en cuenta que muy posiblemente la gran mayoría no se dio cuenta del detalle de la degeneración, y visto que la diferencia entre hacerlo degenerado o no degenerado es pequeña, voy a considerar ambas resoluciones como correctas aunque estrictamente hablando solo una de ellas lo sea.

Parte a)

La manera más sencilla de encontrar las autofunciones del hamiltoniano no perturbado, que llamaremos H_0, es análoga a cuando uno considera las autofunciones del momento (ondas planas) para resolver el hamiltoniano de partícula libre. Es decir, primero observemos que el hamiltoniano H_0 conmuta con el operador p_φ

$$[H_0, p_\varphi] = 0 \tag{2}$$

De aquí que el hamiltoniano no perturbado y el momento p_φ tienen una base común de autoestados; busquemos entonces los autoestados de p_φ. Para esto necesitamos resolver

$$-i\hbar\frac{\partial\psi_n}{\partial\varphi} = p_\varphi\psi_n \tag{3}$$

de donde obtenemos las autofunciones normalizadas de p_φ

$$\psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\frac{p_\varphi}{\hbar}\varphi} \tag{4}$$

Imponiendo la condición de periodicidad

$$e^{i\frac{p_\varphi}{\hbar}2\pi} = 1 \tag{5}$$

obtenemos la cuantización del momento

$$p_\varphi = n\hbar \tag{6}$$

quedando así completamente definidas nuestras autofunciones:

$$\psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \tag{7}$$

Denominaremos al ket $|n\rangle$ a aquel que en el espacio de las coordenadas es la autofunción ψ_n; esto es $\langle\varphi|n\rangle = \psi_n(\varphi)$. Tenemos entonces que el ket $|n\rangle$ es autoestado del operador de momento

$$\hat{p}_\varphi|n\rangle = n\hbar\,|n\rangle \tag{8}$$

Claramente el ket $|n\rangle$ es autoestado de H_0

$$H_0|n\rangle = \frac{\hat{p}_\varphi^2}{2ml^2}|n\rangle = \frac{\hbar^2 n^2}{2ml^2}|n\rangle \tag{9}$$

Y de aquí que los niveles de energía asociados a los kets $|n\rangle$ son

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 n^2}{2ml^2} \tag{10}$$

donde el supraindice (0) refiere a que esta es la autoenergía no perturbada. Vemos a su vez que la base de kets son ortogonales

$$\langle m|n\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(n-m)\varphi} = \delta_{n,m} \tag{11}$$

Observemos a su vez que la energía está degenerada para todos los niveles excepto para el fundamental. El fundamental, $|0\rangle$, es el único estado con la minima energía $E_0^{(0)} = 0$. Sin embargo, los excitados $|n\rangle$, con $n \neq 0$, tienen la misma energía que los estados $|-n\rangle$. Por esto último, a la hora de aplicar teoría de perturbaciones, deberíamos considerar la teoría de perturbaciones degenerada.

Elementos de matriz de la perturbación

Para uso posterior, nos será muy útil calcular los elementos de matriz de la perturbación $V = -\lambda\cos(\varphi)$ bracketeada en la base $|n\rangle$. Para esto hacemos la cuenta

$$\langle n|V|m\rangle = -\frac{\lambda}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i(m-n)\varphi}\cos(\varphi) = -\frac{\lambda}{2}(\delta_{n,m+1} + \delta_{m,n+1}) \tag{12}$$

De aquí vemos que los elementos de matriz de la perturbación son nulos a menos que la diferencia entre el número en el ket y el número en el bra sea de ± 1. En otras palabras, los únicos elementos de matriz no nulos son

$$\langle n+1|V|n\rangle = -\frac{\lambda}{2}, \qquad \langle n|V|n+1\rangle = -\frac{\lambda}{2} \tag{13}$$

De aquí en más, para hacer la notación más liviana, llamaremos $V_{n,m} = \langle n|V|m\rangle$.

Parte b) mal resuelta (pero 'casi' bien)

Vamos a suponer que no tengo en cuenta la degeneración y por ende aplico teoría de perturbaciones no degenerada al problema. Si considero una expansión en la energía de la forma[1]

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + ... \tag{14}$$

aplico entonces la formula para la correción de la energía

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle = V_{n,n} = 0 \tag{15}$$

Como vimos antes, la perturbación conecta kets y bras que difieren en ± 1 y por ende la primera corrección a la energía es cero. La segunda corrección a la energía es menos trivial. Tenemos que

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{V_{n,k}V_{k,n}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{V_{n,n+1}V_{n+1,n}}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{V_{n,n-1}V_{n-1,n}}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} \tag{16}$$

[1] Noten que dejo el parámetro de la perturbación dentro de la definción de la corrección de la energía

donde otra vez, en la segunda igualdad, usamos el que la perturbación solo conecta kets contiguos. Desarrollando la cuenta obtenemos que

$$E_n^{(2)} = \lambda^2 \frac{ml^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2 - (n+1)^2} + \frac{1}{n^2 - (n-1)^2} \right) = \lambda^2 \frac{ml^2}{\hbar^2} \frac{1}{4n^2 - 1} \tag{17}$$

Resumiendo:

La teoría de perturbaciones no degenerada nos provee de las correcciones de la energía asociadas al ket no perturbado $|n\rangle$

$$|n\rangle \quad \to \quad E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2ml^2} + \frac{ml^2}{\hbar^2} \frac{1}{4n^2 - 1} \lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3) \tag{18}$$

Obviamente el ket $|n\rangle$ recibe correcciones pero excede lo pedido por el enunciado del problema.

Parte b) bien resuelta

Como ya dijimos, nuestro problema tiene degeneración en todos los niveles excepto en el fundamental $|0\rangle$. Definimos los subespacios D_n

$$D_0 = \text{gen}\{|0\rangle\}, \qquad D_n = \text{gen}\{|n\rangle, |-n\rangle\} \quad n > 0 \tag{19}$$

Como el fundamental no está degenerado, podemos calcular sus correcciones a la energía con las formulas de teoría de perturbaciones no degenerada y obtenemos sin mayor problema

$$E_0^{(1)} = \langle 0|V|0\rangle = 0, \qquad E_0^{(2)} = \sum_{k \neq 0} \frac{V_{0,k} V_{k,0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = -\frac{ml^2}{\hbar^2} \lambda^2 \tag{20}$$

Por otro lado, para calcular las correcciones de primer orden de los excitados, necesitamos escribir la matriz de la perturbación restringida al subespacio de degeneración V_{D_n}. Esto es

$$V_{D_n} = \begin{pmatrix} V_{n,n} & V_{n,-n} \\ V_{-n,n} & V_{-n,-n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle n|V|n\rangle & \langle n|V|-n\rangle \\ \langle -n|V|n\rangle & \langle -n|V|-n\rangle \end{pmatrix} \tag{21}$$

Pero es facil ver que esos elementos de matriz son todos nulos. Por lo tanto tenemos que la matriz de la perturbacion reducida al subespacio D_n es cero para cualquier valor de n y esto implica que las correcciones de la energía a primer orden es cero y la degeneración entre los estados $|n\rangle$ y $|-n\rangle$ no se levantó.

Como vimos en el ejercicio 7 de la guía 8 que Belén levanto en la web resuelto, cuando la degeneración no se levanta a primer orden tenemos que construir otra matriz que necesitamos diagonalizar que tiene la forma

$$M_{n,n'} = \sum_{k \notin D_n} \frac{V_{n,k} V_{k,n'}}{E_{n,k}} \tag{22}$$

donde los subindices n y n' pertenecen al subespacio degenerado y definimos $E_{n,k} = E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$. La matriz será entonces una matriz cuadrada de la dimensión del subespacio degenerado. En nuestro caso particular, la matriz M asociada al subespacio degenerado D_n con $n > 0$ tiene dimensión 2 y es de la forma

$$M_{D_n} = \begin{pmatrix} \sum\limits_{k \notin D_n} \frac{V_{n,k} V_{k,n}}{E_{n,k}} & \sum\limits_{k \notin D_n} \frac{V_{n,k} V_{k,-n}}{E_{n,k}} \\ \sum\limits_{k \notin D_n} \frac{V_{-n,k} V_{k,n}}{E_{n,k}} & \sum\limits_{k \notin D_n} \frac{V_{-n,k} V_{k,-n}}{E_{n,k}} \end{pmatrix} \tag{23}$$

Aquí debemos separar los casos entre D_1 y D_n con $n > 1$. Consideremos primero $n > 1$. Los elementos de la matriz M_{D_n} son

$$\begin{aligned}
\sum_{k\neq n}\frac{V_{n,k}V_{k,n}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} &= \frac{V_{n,n+1}V_{n+1,n}}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}}+\frac{V_{n,n-1}V_{n-1,n}}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}}=\lambda^2\frac{ml^2}{\hbar^2}\frac{1}{4n^2-1}\\
\sum_{k\neq n}\frac{V_{-n,k}V_{k,-n}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} &= \frac{V_{-n,-n+1}V_{-n+1,-n}}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}}+\frac{V_{-n,-n-1}V_{-n-1,-n}}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}}=\lambda^2\frac{ml^2}{\hbar^2}\frac{1}{4n^2-1}\\
\sum_{k\neq n}\frac{V_{-n,k}V_{k,n}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} &= \sum_{k\neq n}\frac{V_{n,k}V_{k,-n}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}=0 \qquad n>1
\end{aligned} \tag{24}$$

De aquí que la matriz M_{D_n} se escribe como

$$M_{D_n}=\lambda^2\frac{ml^2}{\hbar^2}\frac{1}{4n^2-1}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\qquad n>1 \tag{25}$$

Para $n>1$ vemos pués que la matriz es automáticamente diagonal y está degenerada. Su único autovalor será la corrección a segundo orden de la energía asociada a los kets no perturbados $|n\rangle$ y $|{-n}\rangle$

$$\{|n\rangle,|{-n}\rangle\}\quad\rightarrow\quad E_n^{(2)}=\lambda^2\frac{ml^2}{\hbar^2}\frac{1}{4n^2-1}\qquad n>1 \tag{26}$$

Para $n=1$ la situación es distinta pues los elementos fuera de la diagonal de M_{D_1} no son nulos ya que existe la posibilidad de conectar $|1\rangle$ y $|-1\rangle$ debido a que comparten un elemento contiguo (nos referimos al ket $|0\rangle$ que aparece en $V_{1,0}V_{0,-1}$). Haciendo rápidamente la cuenta obtenemos la matriz M_{D_1}

$$M_{D_1}=\lambda^2\frac{ml^2}{\hbar^2}\begin{pmatrix}1/3&1/2\\1/2&1/3\end{pmatrix} \tag{27}$$

Los autovalores de esta matriz son

$$-\frac{1}{6}\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2\qquad \text{y}\qquad \frac{5}{6}\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2 \tag{28}$$

y sus autovectores correspondientes son

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\qquad \text{y}\qquad \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \tag{29}$$

De esto podemos decir que se levanta la degeneración para el subespacio D_1 gracias a que obtuvimos dos correcciones distintas de la energía para vectores no perturbados que seran combinaciones lineales de los vectores $|1\rangle$ y $|-1\rangle$. Esto es, obtuvimos las correcciones de segundo orden

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle-|-1\rangle)\qquad&\rightarrow\qquad E_{1^-}^{(2)}=-\frac{1}{6}\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2\\
\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle+|-1\rangle)\qquad&\rightarrow\qquad E_{1^+}^{(2)}=\frac{5}{6}\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2
\end{aligned} \tag{30}$$

Resumiendo:

Usando teoría de perturbaciones degenerada obtuvimos a segundo orden distintas correcciones de la energía según si mirabamos el subespacio D_0, D_1 y $D_{n>1}$. Explícitamente

$$\begin{aligned}
|0\rangle\qquad&\rightarrow\qquad E_0=-\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2+\mathcal{O}(\lambda^3)\\
\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle-|-1\rangle)\qquad&\rightarrow\qquad E_{1^-}=\frac{\hbar^2}{2ml^2}-\frac{1}{6}\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2+\mathcal{O}(\lambda^3)\\
\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle+|-1\rangle)\qquad&\rightarrow\qquad E_{1^+}=\frac{\hbar^2}{2ml^2}+\frac{5}{6}\frac{ml^2}{\hbar^2}\lambda^2+\mathcal{O}(\lambda^3)\\
\{|n\rangle,|{-n}\rangle\}\qquad&\rightarrow\qquad E_n=\frac{\hbar^2n^2}{2ml^2}+\frac{ml^2}{\hbar^2}\frac{1}{4n^2-1}\lambda^2+\mathcal{O}(\lambda^3)\quad n>1
\end{aligned} \tag{31}$$

Vemos entonces que los resultados, a este orden, coinciden con aquellos de la teoría de perturbaciones no degenerada excepto para el subespacio D_1.