Física Teórica 2 - Guía 9: Teoría de Perturbaciones

Federico Petrovich

22 de junio de 2021

Problema 5

El hamiltoniano se puede escribir como

$$H = H_0 + \epsilon W, \tag{1}$$

donde

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \tag{2}$$

con $E_4 = E_3 = E_2$ y a fin de cuentas se tomará $\epsilon = 1$. Como la probabilidad de hopping es pequeña, $|a| \ll 1$ y por ende W es una perturbación.

a) En el ítem a, la energía del estado fundamental de H_0 es E_1 y no está degenerada, teniendo como autoestado a $|1\rangle$. Como el parametro perturbativo es ϵ, la energía del fundamental a segundo orden se escribe como

$$E = E^{(0)} + \epsilon E^{(1)} + \epsilon^2 E^{(2)}, \tag{3}$$

mientras que el autoestado es

$$|\psi\rangle = \left|\psi^{(0)}\right\rangle + \epsilon \left|\psi^{(1)}\right\rangle + \epsilon^2 \left|\psi^{(2)}\right\rangle. \tag{4}$$

De acuerdo a lo visto en las clases teóricas se tiene que

$$E^{(0)} = E_1, \tag{5}$$

$$\left|\psi^{(0)}\right\rangle = |1\rangle, \tag{6}$$

$$E^{(1)} = \langle 1| W |1\rangle = 0, \tag{7}$$

$$\left|\psi^{(1)}\right\rangle = \sum_{m \neq 1} \frac{\langle m| W |1\rangle}{(E_1 - E_m)} |m\rangle = \frac{\langle 2| W |1\rangle}{(E_1 - E_2)} |2\rangle + \frac{\langle 3| W |1\rangle}{(E_1 - E_2)} |3\rangle + \frac{\langle 4| W |1\rangle}{(E_1 - E_2)} |4\rangle = \frac{a}{(E_1 - E_2)} |2\rangle + \frac{a}{(E_1 - E_2)} |4\rangle = \frac{a}{E_1 - E_2} (|2\rangle + |4\rangle) \tag{8}$$

$$E^{(2)} = \langle 1| W \left|\psi^{(1)}\right\rangle = \frac{\langle 1| W |2\rangle + \langle 1| W |4\rangle}{E_1 - E_2} = \frac{2a}{E_1 - E_2}. \tag{9}$$

Tomando $\epsilon = 1$, la energía a segundo orden (que es el más bajo para el cual la energía cambia) queda entonces

$$E = E_1 + \frac{2a^2}{E_1 - E_2} \tag{10}$$

mientras que el estado a primer orden es

$$|\psi\rangle = |1\rangle + \frac{a}{E_1 - E_2} (|2\rangle + |4\rangle). \tag{11}$$

Para que el desarrollo perturbativo sea consistente, el estado perturbado debe ser similar al original (esto en particular para que tenga norma similar a 1) y por lo tanto hay que pedir

$$|a| \ll E_1 - E_2. \tag{12}$$

b) En el ítem b, hay que perturbar el problema alrededor de la energía excitada E_2 que está degenerada. Para eso, hay que hallar los autovalores y autovectores del operador W restringido al subespacio generado por la base $\{|2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$. Este operador se escribe en forma matricial como

$$W_2 \equiv a \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Sus autovalores están dados por $\lambda = 0$ con autoestado $\frac{1}{\sqrt{3}}\left(|2\rangle + |3\rangle + |4\rangle\right)$ y por $\lambda = 3a$ con autoestados $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle - |3\rangle\right)$ y $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle - |4\rangle\right)$. Por lo tanto, la energía E_2 se ramifica en

$$(E_2)\begin{smallmatrix}\nearrow E_2 \Rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|2\rangle + |3\rangle + |4\rangle\right) \\ \searrow E_2 + 3a \Rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle - |3\rangle\right),\ |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2\rangle - |4\rangle\right)\end{smallmatrix}. \tag{14}$$

La degeneración se rompe parcialmente para el estado $\frac{1}{\sqrt{3}}\left(|2\rangle + |3\rangle + |4\rangle\right)$, el cual sigue teniendo la misma energía.