Física Teórica 2

Guía 9: Teoría de Perturbaciones.

Perturbaciones Independientes del Tiempo. Caso no degenerado

Problema 8

Mateo Koifman

24 de junio de 2021

Problema 8

P8 Suponga que el Hamiltoniano de un rotor rígido en un campo magnético es de la forma

$$A\boldsymbol{L}^2 + B\cos(\theta_0)L_z + B\sin(\theta_0)L_y,$$

si se desprecian los términos cuadráticos en los campos. Asumiendo que $\theta_0 << 1$, use la teoría de perturbaciones para obtener los autovalores de la energía al orden mas bajo no nulo. Compare para el caso $L = 1$ con la expansión de la solución exacta del problema en potencias de θ_0 al orden correspondiente.

El Hamiltoniano del problema es[1]

$$H = AL^2 + \hbar B \cos\theta_0 L_z + \hbar B \sin\theta_0 L_y$$

Vamos a hacer teoría de perturbaciones con

$$H = H_0 + V$$

$$\begin{aligned} H_0 &= AL^2 + \hbar B \cos\theta_0 L_z \\ V = \hbar B \sin\theta_0 L_y &= \hbar B \sin\theta_0 \frac{L_+ - L_-}{2i} \end{aligned}$$

Notemos que cuando $\theta_0 << 1$, tenemos $V \sim \theta_0 + \mathcal{O}(\theta_0^3)$

[1] Agregamos un $\hbar$ para que las constantes A y B tengan las mismas unidades. Es decir, $B_{guia} = \hbar B_{clase}$

Podemos ver rápidamente los autoestados y autoenergías de H_0

$$H_0 |l, m\rangle = \left(AL^2 + \hbar B \cos\theta_0 L_z\right) |l, m\rangle = \hbar^2 \left(Al(l+1) + B \cos\theta_0 m\right) |l, m\rangle$$

Es decir, la energía del Hamiltoniano no perturbado es

$$E_{l,m}^{(0)} = \hbar^2 \left(Al(l+1) + B \cos\theta_0 m\right)$$

Buscamos escribir la energía del Hamiltoniano completo

$$E_{l,m} = E_{l,m}^{(0)} + E_{l,m}^{(1)} + E_{l,m}^{(2)} + \ldots$$

$$E_{l,m}^{(1)} = \langle l, m | V | l, m \rangle$$

$$E_{l,m}^{(2)} = \sum_{l',m' \neq l,m} \frac{\left|\langle l', m' | V | l, m \rangle\right|^2}{E_{l,m}^{(0)} - E_{l',m'}^{(0)}}$$

Notemos que $V = \frac{\hbar B}{2i}\sin\theta_0(L_+ - L_-)$ conecta estados con $l' = l$ y $m' = m \pm 1$. Por lo tanto

$$
\begin{aligned}
E^{(1)}_{l,m} &= \langle l, m|V|l, m\rangle \\
E^{(1)}_{l,m} &= 0
\end{aligned}
$$

La correción de la energía a primer orden es nula. Por otro lado

$$
\begin{aligned}
E^{(2)}_{l,m} &= \sum_{l',m' \neq l,m} \frac{|\langle l', m'|V|l, m\rangle|^2}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l',m'}} \\
E^{(2)}_{l,m} &= \frac{|\langle l, m+1|V|l, m\rangle|^2}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m+1}} + \frac{|\langle l, m-1|V|l, m\rangle|^2}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m-1}}
\end{aligned}
$$

Además

$$
E^{(0)}_{l,m} = \hbar^2\big(Al(l+1) + B\cos\theta_0 m\big) \quad \Rightarrow \quad E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m\pm1} = \mp\hbar^2 B\cos\theta_0
$$

Por lo tanto

$$
\begin{aligned}
E^{(2)}_{l,m} &= \frac{\hbar^2 B^2}{4}\sin^2\theta_0\left[\frac{|\langle l, m+1|L_+|l, m\rangle|^2}{-\hbar^2 B\cos\theta_0} + \frac{|\langle l, m-1|-L_-|l, m\rangle|^2}{\hbar^2 B\cos\theta_0}\right] \\
E^{(2)}_{l,m} &= \frac{B\sin^2\theta_0}{4\cos\theta_0}\Big[-|\langle l, m+1|L_+|l, m\rangle|^2 + |\langle l, m-1|L_-|l, m\rangle|^2\Big] \\
E^{(2)}_{l,m} &= \frac{\hbar^2 B\sin^2\theta_0}{4\cos\theta_0}\Big[-\Big(l(l+1) - m(m+1)\Big) + \Big(l(l+1) - m(m-1)\Big)\Big] = \frac{\hbar^2 B\sin^2\theta_0}{2\cos\theta_0}m
\end{aligned}
$$

En resumen, la corrección de la energía al orden más bajo no nulo en θ_0

$$E_{l,m} = E^{(0)}_{l,m} + E^{(1)}_{l,m} + E^{(2)}_{l,m} + \ldots$$

$$E_{l,m} = \hbar^2 \left(Al(l+1) + B\cos\theta_0 m + \frac{B\sin^2\theta_0}{2\cos\theta_0} m \right) + \mathcal{O}(\theta_0^3)$$

La corrección a primer orden de los autoestados está dada por

$$|\Psi\rangle = |l, m\rangle + |l, m\rangle^{(1)} + \mathcal{O}(\theta_0^2)$$

$$|l, m\rangle^{(1)} = \sum_{l', m' \neq l, m} \frac{\langle l', m'|V|l, m\rangle}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l',m'}} \left|l', m'\right\rangle$$

$$\begin{aligned}
|l, m\rangle^{(1)} &= \frac{\langle l, m+1|V|l, m\rangle}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m+1}} |l, m+1\rangle + \frac{\langle l, m-1|V|l, m\rangle}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m-1}} |l, m-1\rangle \\
&= \frac{\tan\theta_0}{2i\hbar} \Big[-\langle l, m+1|L_+|l, m\rangle |l, m+1\rangle + \langle l, m-1|L_-|l, m\rangle |l, m-1\rangle \Big] \\
&= \frac{i\tan\theta_0}{2} \left[\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, |l, m+1\rangle - \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, |l, m-1\rangle \right]
\end{aligned}$$

Solución exacta para $l = 1$

Si $l = 1$ tenemos

$$L^2 = 2\hbar^2 \qquad L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

por lo que el Hamiltoniano completo $H = AL^2 + \hbar B \cos\theta_0 L_z + \hbar B \sin\theta_0 L_y$ es

$$H = \hbar^2 \left\{ 2A\mathbb{1} + B \begin{pmatrix} \cos\theta_0 & \frac{-i\sin\theta_0}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i\sin\theta_0}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-i\sin\theta_0}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i\sin\theta_0}{\sqrt{2}} & -\cos\theta_0 \end{pmatrix} \right\}$$

Dado que el segundo término es proporcional al momento angular en el eje $\hat{n} = (0, \sin\theta_0, \cos\theta_0)$, con autovalores $\{1, 0 - 1\}$, podemos encontrar rápidamente las autoenergías

$$E_+ = \hbar^2 2A + B$$
$$E_0 = \hbar^2 2A$$
$$E_- = \hbar^2 2A - B$$

Calculando a mano o con ayuda del Mathematica, encontramos los autoestados del Hamiltoniano completo

$$E_+ = \hbar^2(2A+B) \quad \rightarrow \quad \left(\frac{1+\cos\theta_0}{2} \, , \, i\frac{\sqrt{2}}{2}\sin\theta_0 \, , \, \frac{1-\cos\theta_0}{2} \right)$$

$$E_0 = \hbar^2 2A \quad \rightarrow \quad \left(i\frac{\sin\theta_0}{\sqrt{2}} \, , \, \cos\theta_0 \, , \, i\frac{\sin\theta_0}{\sqrt{2}} \right)$$

$$E_- = \hbar^2(2A-B) \quad \rightarrow \quad \left(\frac{\cos\theta_0 - 1}{2} \, , \, i\frac{\sqrt{2}}{2}\sin\theta_0 \, , \, \frac{1+\cos\theta_0}{2} \right)$$

Mediante perturbaciones, habíamos obtenido la energía

$$E_{l,m} = \hbar^2 \left(Al(l+1) + B\cos\theta_0 m + \frac{B\sin^2\theta_0}{2\cos\theta_0} m \right) + \mathcal{O}(\theta_0^3)$$

Si lo reescribimos estrictamente a orden 2 en θ_0, usando $\cos\theta_0 = 1 - \frac{\theta_0^2}{2}$ y con $l = 1$

$$E_{l,m} = \hbar^2 \left(2A + Bm - \frac{\theta_0^2 Bm}{2} + \theta_0^2 \frac{B}{2} m \right) + \mathcal{O}(\theta_0^3) = \hbar^2 \left(2A + Bm \right) + \mathcal{O}(\theta_0^3)$$

que coincide con la energía exacta

Por otro lado los autoestados perturbados son

$$|l, m\rangle^{(1)} = \frac{i \tan\theta_0}{2} \left[\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, |l, m+1\rangle - \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, |l, m-1\rangle \right]$$

$$\begin{aligned} E_+ = \hbar^2(2A + B) + \mathcal{O}(\theta_0^3) \quad &\rightarrow \quad \left(1\,,\, i\frac{\theta_0}{\sqrt{2}}\,,\, 0\right) + \mathcal{O}(\theta_0^2) \\ E_0 = \hbar^2 2A + \mathcal{O}(\theta_0^3) \quad &\rightarrow \quad \left(i\frac{\theta_0}{\sqrt{2}}\,,\, 1\,,\, i\frac{\theta_0}{\sqrt{2}}\right) + \mathcal{O}(\theta_0^2) \\ E_- = \hbar^2(2A - B) + \mathcal{O}(\theta_0^3) \quad &\rightarrow \quad \left(0\,,\, i\frac{\theta_0}{\sqrt{2}}\,,\, 1\right) + \mathcal{O}(\theta_0^2) \end{aligned}$$

que también coinciden a primer orden con los autoestados exactos