

Física Teórica 2

Primer Cuatrimestre 2021

Guía 9: Teoría de Perturbaciones

I. Perturbaciones Independientes del Tiempo

P1 Considere una molécula diatómica dipolar tal que los estados vibracionales pueden ser descritos adecuadamente por un potencial armónico unidimensional. Estudie en tal caso qué ocurre cuando se enciende un campo eléctrico constante de modo que la energía se ve modificada en

$$V = F_0 x,$$

donde F_0 es una constante real que depende del momento dipolar de la molécula y del campo externo.

- Calcule las energías perturbadas al menor orden no nulo y los autoestados perturbados a primer orden de la perturbación.
Ayuda: use los resultados ya calculados anteriormente en la guía de oscilador armónico; por ejemplo que los elementos de matriz de posición son: $\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/(2m\omega)} (\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$.
- ¿Qué condición se debe satisfacer sobre los parámetros del Hamiltoniano y la perturbación para que el tratamiento perturbativo sea consistente? ¿Qué sucede con la expansión perturbativa de los estados para n grande?
- Resuelva este problema de forma exacta y compare con el resultado hallado en (a). (Observación: la resolución exacta de este problema se puede encontrar en la guía de oscilador armónico).

P2 La molécula de amoníaco NH_3 posee una geometría piramidal, donde los tres hidrógenos conforman la base de la pirámide y el átomo de nitrógeno está en la cúspide. En presencia de un campo eléctrico externo, el átomo de nitrógeno puede tomar dos posiciones distintas respecto del plano de los hidrógenos, de forma tal que la pirámide está alineada o anti-alineada con el campo externo (estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$), cada una con una energía diferente. Por otro lado, el nitrógeno tiene cierta, pequeña, probabilidad de “atravesar” el plano de los hidrógenos, invirtiendo esta orientación. De esta forma, la dinámica de la orientación de la molécula puede ser descrita por un sistema de dos niveles, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, con el siguiente Hamiltoniano

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & F \\ F & E_1 \end{pmatrix}.$$

Claramente, los autovectores del Hamiltoniano del problema sin posibilidad de “tunneling” del nitrógeno ($F = 0$) son $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

- Resuelva este problema exactamente: encuentre los autovectores y autovalores de la energía.
- Asumiendo que la probabilidad de “tunneling” del nitrógeno es pequeña, resuelva el mismo problema usando la teoría de perturbaciones. Halle los autovectores a primer orden y los niveles de energía a segundo orden en F . ¿Qué condición debe satisfacer F para que el desarrollo perturbativo sea consistente? Compare los resultados con los obtenidos en (a).
- Suponga ahora que el campo eléctrico externo es muy débil, de forma tal que los niveles de energía no perturbados están casi degenerados, $E_1 \approx E_2$. Compare los resultados obtenidos en (a) en esta aproximación con lo que obtendría de aplicar la teoría de perturbaciones para el caso degenerado ($E_1 = E_2$, es decir en ausencia total de campo externo).

P3 Un pozo cuántico es un pozo de potencial que confina a partículas a moverse en dos dimensiones. Tales pozos pueden construirse con multicapas de semiconductores. El confinamiento en las dos direcciones restantes puede diseñarse con bastante libertad para conseguir distintas estructuras de niveles energéticos. Este tipo de técnicas se utiliza para hacer LEDs y diodos láser de distintos colores. Consideremos el caso que el potencial en la dos direcciones restantes es de la forma

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{para } -L/2 \leq x \leq L/2, -L/2 \leq y \leq L/2 \\ \infty & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

- (a) Resuelva el problema de autofunciones y energías de este Hamiltoniano de forma exacta. En particular, recuerde que las autofunciones se pueden escribir como producto de una función en x y una en y , y que los niveles de energía están dados por

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2), \quad \text{con } n_x, n_y \in \mathbb{N},$$

¿Qué energía tienen el estado fundamental y el primer excitado? ¿Hay degeneración?

Suponga ahora que agregamos una perturbación independiente del tiempo de la forma

$$V_1(x, y) = \begin{cases} \lambda xy & \text{para } -L/2 \leq x \leq L/2, -L/2 \leq y \leq L/2 \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

- (b) Escriba la expresión de la energía del estado fundamental a segundo orden y la correspondiente autofunción a primer orden en λ . Simplifique lo más posible las expresiones utilizando argumentos de simetría (pero no calcule explícitamente las integrales ni las sumatorias).
- (c) Calcule la energía del primer excitado a primer orden y la correspondiente autofunción a orden cero en λ (puede usar que $\langle 12|V_1|21 \rangle = \lambda(16L/9\pi^2)^2$).

P4 Considere un oscilador armónico isótropo en dos dimensiones, de forma tal que el Hamiltoniano está dado por

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{mw^2}{2}(x^2 + y^2).$$

Este tipo de Hamiltoniano puede usarse para describir aproximadamente varios sistemas físicos como, por ejemplo, para iones en una trampa electromagnética que es muy confinante en una dirección (z en este caso), mientras que en las otras direcciones el potencial efectivo es el de un oscilador armónico.

- (a) ¿Cuáles son las energías de los tres estados de menor energía? ¿Hay degeneración?
- (b) Suponga ahora que se aplica la perturbación $V = \delta mw^2 xy$, donde δ es un número real adimensional mucho menor que uno. Encuentre el autoestado de energía a orden cero y la correspondiente energía a primer orden (es decir, la energía no perturbada de (a) más el corrimiento de energía a primer orden) para cada uno de los tres estados de menor energía.
- (c) Resuelva $H_0 + V$ exactamente y compare con los resultados perturbativos hallados en (b).

P5 Considere la molécula de amoníaco NH_3 , donde un electrón puede saltar de un átomo a otro de la molécula. Si el electrón está localizado en el átomo de nitrógeno (correspondiente al estado $|1\rangle$) tiene una energía E_1 , mientras que si está localizado en cada átomo de hidrógeno (estados $\{|2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$) tiene una energía E_2 . Consideremos ahora el efecto de *hopping* entre átomos, dado por una perturbación W tal que

$$\begin{aligned} W|1\rangle &= a(|2\rangle + |4\rangle), & W|2\rangle &= a(|1\rangle + 2|2\rangle - |3\rangle - |4\rangle), \\ W|3\rangle &= a(-|2\rangle + 2|3\rangle - |4\rangle), & W|4\rangle &= a(|1\rangle - |2\rangle - |3\rangle + 2|4\rangle). \end{aligned}$$

- (a) Considerando la probabilidad de “hopping” es pequeña, hallar cómo es la energía del estado fundamental hasta segundo orden, y el correspondiente autoestado hasta primer orden en a . ¿Qué condición debe satisfacer a para que el desarrollo perturbativo sea consistente?
- (b) Determine si se rompe la degeneración del estado excitado a primer orden en $|a|$, y en los casos afirmativos encuentre la energía a primer orden y el correspondiente autoestado a orden cero.

P6 **Efecto Stark en el átomo de Hidrógeno.** Considere un átomo de hidrógeno en presencia de un campo electrostático uniforme $\mathbf{E} = E_0 \hat{z}$, con E_0 constante y lo suficientemente intenso para como para despreciar los efectos de estructura fina, pero lo suficientemente débil respecto del Hamiltoniano del átomo de hidrógeno como para ser tratado perturbativamente. De esta forma, consideramos un potencial perturbativo

$$V = -eE_0 z = |e| E_0 z.$$

- (a) Mostrar que al orden más bajo no nulo, la energía del estado fundamental disminuye de forma proporcional a E_0^2 (este efecto se conoce como el *efecto Stark cuadrático*).
- (b) Utilizando el estado fundamental perturbado a primer orden, muestre que se induce un momento dipolar cuyo valor medio es proporcional a E_0 (el momento dipolar \mathbf{p} entre dos cargas q y $-q$ se define como $\mathbf{p} := q(\mathbf{r}_q - \mathbf{r}_{-q})$). Muestre que el mismo resultado se obtiene derivando la energía encontrada en ítem (a) respecto de las componentes del campo.
- (c) Considere ahora el primer excitado, es decir el subespacio $2s$ y $2p$. Determine si a primer orden se rompe la degeneración y en los casos afirmativos, muestre que la corrección en energía es proporcional a E_0 (este efecto se conoce como el *efecto Stark lineal*) y calcule los correspondientes autoestados a orden cero (puede tomar como conocida la integral radial $\langle 2s|r|2p \rangle = 3\sqrt{3}a_0$).

P7 Considere un oscilador armónico tridimensional $V(r) = m\omega^2 r^2/2$, colocado en un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Defina $\omega_L = -qB/(2m)$ y elija el *gauge* $\mathbf{A} = -\mathbf{r} \times \mathbf{B}/2$.

- (a) Muestre que al Hamiltoniano se le suma un operador lineal en ω_L (término paramagnético) y uno cuadrático en ω_L (término diamagnético). Halle los nuevos estados estacionarios con su degeneración.
- (b) Muestre que para campos pequeños ($\omega_L \ll \omega$), el efecto del término diamagnético es despreciable respecto del paramagnético.
- (c) Considere el primer estado excitado del oscilador, o sea aquel cuya energía tiende a $5\hbar\omega/2$ cuando $\omega_L \rightarrow 0$. Estudie a primer orden en ω_L/ω como se desdobra por la presencia de \mathbf{B} (efecto Zeeman). Repita el cálculo para el segundo estado excitado.
- (d) Evalúe el efecto diamagnético para el estado fundamental, es decir, como varía su energía con ω_L . En presencia del campo \mathbf{B} , ¿sigue siendo autoestado de L^2 ? ¿Y de L_z ? Muestre que el efecto de \mathbf{B} consiste en comprimir la función de onda en \hat{z} en un cociente $1 + (\omega_L/\omega)^2$ y en inducir una corriente.

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

$$AL^2 + B \cos(\theta_0)L_z + B \sin(\theta_0)L_y,$$

si se desprecian los términos cuadráticos en los campos. Asumiendo que $\theta_0 \ll 1$, use la teoría de perturbaciones para obtener los autovalores de la energía al orden más 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.

II. Perturbaciones Dependientes del Tiempo

P9 Considere un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω_0 , que para $t < 0$ se encuentra en el estado fundamental. A $t = 0$ se enciende una perturbación

$$V(t) = F_0 x \sin(\omega t),$$

donde F_0 es una constante, que puede corresponder, por ejemplo, a un campo eléctrico externo que oscila armónicamente en el tiempo.

- (a) Usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, obtenga a primer orden la probabilidad de encontrar el oscilador en el estado $|n\rangle$ a tiempo $t > 0$. ¿Qué transiciones son posibles? ¿Qué condición debe satisfacer F_0 para que el desarrollo perturbativo sea consistente?
- (b) Obtenga una expresión para el valor de expectación $\langle x \rangle$ como función del tiempo usando la teoría de perturbaciones al orden más bajo no nulo.
- (c) ¿Qué sucede en el caso de resonancia (es decir que $\omega = \omega_0$)?

Ayuda:

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t dt' e^{i\tilde{\omega}t'} \sin(\omega t') \right|^2 &= \left| \frac{\sin[(\tilde{\omega} - \omega)t/2]}{(\tilde{\omega} - \omega)} e^{i(\tilde{\omega} - \omega)t/2} - \frac{\sin[(\tilde{\omega} + \omega)t/2]}{(\tilde{\omega} + \omega)} e^{i(\tilde{\omega} + \omega)t/2} \right|^2 \\ &= \frac{\sin^2[(\tilde{\omega} - \omega)t/2]}{(\tilde{\omega} - \omega)^2} + \frac{\sin^2[(\tilde{\omega} + \omega)t/2]}{(\tilde{\omega} + \omega)^2} - \frac{2 \sin[(\tilde{\omega} - \omega)t/2] \sin[(\tilde{\omega} + \omega)t/2] \cos[\omega t]}{(\tilde{\omega} - \omega)(\tilde{\omega} + \omega)} \end{aligned}$$

P10 Un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω_0 , que inicialmente a tiempo $t \rightarrow -\infty$ está en el estado fundamental, se somete a una perturbación dependiente del tiempo

$$V(t) = V_0 \left(a^2 + a^{\dagger 2} \right) e^{-t^2/\tau^2}, \quad V_0, \tau \in \mathbb{R}.$$

- (a) Usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, obtenga la probabilidad de encontrar el oscilador en el estado $|n\rangle$ ($n > 0$) a primer orden a tiempo $t \rightarrow +\infty$.
- (b) ¿Qué condición puede imponer sobre τ para garantizar la validez del desarrollo perturbativo del ítem anterior?

Ayuda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\tilde{\omega}t'} e^{-t'^2/\tau^2} = \sqrt{\pi} \tau e^{-\tau^2 \tilde{\omega}^2/4}.$$

P11 Considere un spin $1/2$ sometido a un campo magnético constante y uniforme en la dirección z , de forma tal que el Hamiltoniano está dado por

$$H_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z,$$

con $\sigma_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$ y $\omega_0 = |e| B_z/m$. A $t = 0$ se enciende un campo magnético adicional en la dirección x , uniforme y que oscila armónicamente en el tiempo a frecuencia ω (es decir $B_x(t) = B_x \sin(\omega t)$), de forma tal que el sistema es perturbado por el potencial

$$V(t) = \frac{\hbar\Omega}{2} \sin(\omega t) \sigma_x,$$

donde $\Omega = |e| B_x/m$. Suponga además que inicialmente el sistema se encuentra en el estado $|0\rangle$.

- (a) Usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo y asumiendo que ω_0 no es cercano a ω , derive una expresión para la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $|1\rangle$ a tiempo $t > 0$. ¿Qué se debe satisfacer para que el desarrollo perturbativo sea consistente?
- (b) ¿Qué sucede en el caso de resonancia (es decir $\omega = \omega_0$)?

P12 Considere un átomo de hidrógeno con autoestados $|n, l, m\rangle$. A $t = 0$ el átomo se encuentra en el estado fundamental $|1, 0, 0\rangle$ y es sometido a una perturbación que depende armónicamente del tiempo, dada por el potencial de interacción del átomo con un campo externo tal que

$$V(t) = -e (ax - b(3z^2 - r^2)) \sin(\omega t),$$

con $a, b \in \mathbb{R}$. Determine cuáles son todos los posibles estados $|n, l, m\rangle$ que pueden ser alcanzados a primer orden en teoría de perturbaciones si

- (i) $a \neq 0$ y $b = 0$,
- (ii) $a = 0$ y $b \neq 0$,
- (iii) $a \neq 0$ y $b \neq 0$.

Calcule dichas probabilidades, dejando expresadas las integrales radiales. ¿Qué parámetro del potencial de interacción modificaría si quisiese privilegiar una transición en particular?

P13 Considere un sistema compuesto por dos partículas de spin $1/2$. Para $t < 0$ el Hamiltoniano no depende del spin y puede igualarse a cero eligiendo apropiadamente el cero de energía. Para $t > 0$ el Hamiltoniano está dado por

$$H = \frac{4\Delta}{\hbar^2} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2),$$

con $\Delta > 0$ una constante con unidades de energía. Suponga que inicialmente el sistema está en el estado $|+-\rangle$ para $t < 0$. Encuentre la probabilidad de que a un tiempo t el sistema se halle en cada uno de los estados $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|--\rangle$, y $|+-\rangle$,

- (a) resolviendo el problema exactamente,
- (b) suponiendo que vale la teoría de perturbaciones a primer orden, siendo H la perturbación que se enciende a $t = 0$. ¿Bajo qué condiciones da esto resultados correctos?