# Clase 20 - Martes 09/11/2021

La clase pasada vimos:

- Operador paridad
- Funciones de onda y paridad
- Paridad de autoestados de H, reglas de selección

**En esta clase veremos:**

- **Perturbaciones independientes del tiempo: Planteo del problema**
- **Perturbación de un nivel no degenerado**
- **Perturbación de un nivel degenerado**

REPASO

## Operador paridad

$$\Pi |\vec{x}\rangle = |-\vec{x}\rangle$$

$$\{\vec{x}, \Pi\} = 0$$

↪ anticonmutador

$$\{\Pi, \vec{p}\} = 0$$

$$[\Pi, \vec{L}] = 0 \Rightarrow \vec{L} \text{ es "par"}$$

$$\langle\vec{x}|\Pi|\psi\rangle = \langle-\vec{x}|\psi\rangle = \psi(-\vec{x})$$

REPASO

## Operador paridad

# Teoria de perturbaciones independientes del tiempo:

## Planteo del problema

# Perturbaciones independientes del tiempo (TIPT)

Hay pocos ejemplos de Hamiltonianos cuyos autovalores y autovectores se puedan calcular exactamente.
Se usan **métodos aproximados** (se intenta que la aproximación sea controlada).

TIPT: Rayleigh - Schrödinger pert. theory

Supongamos que podemos escribir el H como:

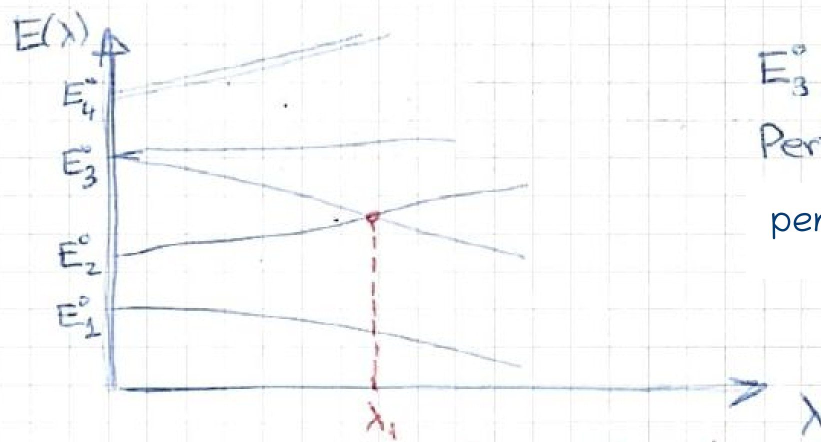
$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V$$

donde la perturbación V tiene una magnitud comparable a $H_0$

$\lambda \in \mathbb{R}$, nos interesa el límite $\lambda << 1$
(3 ó 4 órdenes de magnitud típicamente)

## Objetivo:

Resolver $H(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle$ aprox.//




cruce de niveles (no evitado)

$E_3^0$, $E_4^0$ son degen.

Perturbación rompe dep. de $E_3^0$

pero no rompe la degeneración de $E_4^0$

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$$

Suponemos conocido:

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \qquad \begin{cases} \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \\ \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \end{cases}$$

(suponemos espectro discreto)

Ej: $H_0 \leftarrow$ átomo de hidrógeno

$\lambda V \rightarrow e\,\vec{r}\cdot\vec{E} = \underbrace{e\,x\,E_0}_{\text{parámetro } \lambda} \quad (\vec{E} = E_0\hat{x})$ efecto Stark

$\lambda V \rightarrow \dfrac{e}{2m_e c}\vec{B}\cdot(\vec{L} + g_e\vec{S})$ efecto Zeeman

$H(\lambda) = H_0 + \lambda V$

# Solución aproximada a primer orden en $\lambda$

Expandimos:

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\,\varepsilon_1 + \dots + \lambda^q\,\varepsilon_q + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda\,|1\rangle + \dots + \lambda^q\,|q\rangle + \dots$$

$$\Rightarrow \quad (H_0 + \lambda V)\left(\sum_q \lambda^q |q\rangle\right) = \left(\sum_q \lambda^q \varepsilon_q\right)\left(\sum_q \lambda^q |q\rangle\right)$$

Orden $q = 0$ en $\lambda$ :

$$H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$$

Orden $\lambda^1$ :

$$H_0\,\lambda\,|1\rangle + \lambda V\,|0\rangle = \varepsilon_0\,\lambda\,|1\rangle + \lambda\,\varepsilon_1|0\rangle$$

$$\Longrightarrow \quad (H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

Orden $\lambda^2$ :

$$(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0$$

Orden $\lambda^q$ :

$$(H_0 - \varepsilon_0)|q\rangle + (V - \varepsilon_1)|q-1\rangle - \varepsilon_2|q-2\rangle \ldots - \varepsilon_q|0\rangle = 0$$

# Perturbación de un nivel no degenerado

## Perturbación de un nivel no-degenerado

A orden cero: $H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle$

$\varepsilon_0$ corresponde a alguno de los autovalores de $H_0$

Sup. $\varepsilon_0 = E_n^0$

$$|0\rangle = |\varphi_n\rangle$$

A orden 1: $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$

PROYECTAMOS SOBRE $|\varphi_n\rangle$:

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - \varepsilon_0 | 1 \rangle}_{=0} + \langle \varphi_n | V - \varepsilon_1 | 0 \rangle = 0$$

A orden 1 : $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$

PROYECTAMOS SOBRE $|\varphi_n\rangle$ :

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - \varepsilon_0 | 1 \rangle}_{=0} + \langle \varphi_n | V - \varepsilon_1 | 0 \rangle = 0$$

como $|\varphi_n\rangle = |0\rangle \Rightarrow \varepsilon_1 = \langle \varphi_n | V | 0 \rangle = \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle$

Hasta acá tenemos :

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

CORRECCIÓN DEL AUTOVALOR A PRIMER ORDEN

## CORRECCIÓN DEL AUTOVECTOR A 1$^{er}$ ORDEN

$$|\psi(\lambda)\rangle \simeq |0\rangle + \lambda |1\rangle$$

A 1$^{er}$ orden vale :

$$\left(H_0 - \varepsilon_0\right)|1\rangle = -\left(V - \varepsilon_1\right)|0\rangle$$

o

$$\left(H_0 - E_n^0\right)|1\rangle = -\left(V - E_n^1\right)|\varphi_n\rangle$$

$$(H_0 - E_n^0)|1\rangle = -(V - E_n^1)|\varphi_n\rangle$$

$|1\rangle$ debe satisfacer esta ecuación. El RHS es algo conocido. Buscamos solución de la forma:

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} |\varphi_p\rangle\langle\varphi_p|1\rangle$$

Se podría agregar $|\varphi_n\rangle$ pero no cambia el hecho de que $|1\rangle$ sea solución, porque $(H_0 - E_n^0)|\varphi_n\rangle = 0$

Proyectamos con $\langle \varphi_p |$ :

$$\langle \varphi_p | H_0 - E_n^0 | 1 \rangle = - \langle \varphi_p | V - E_n^1 | | \varphi_n \rangle$$

$$= - \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle$$

$$(E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_p | 1 \rangle = - \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle \varphi_p | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

Entonces :

$$\boxed{| 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} | \varphi_p \rangle}$$

## Energías a segundo orden

Teníamos :

$$\left(H_0 - E_n^0\right)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle = 0$$

Ya conocemos :

$$|0\rangle = |\varphi_n\rangle$$

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p\rangle$$

Proyectamos con $\langle \varphi_n |$

Proyectamos con $\langle \varphi_n |$.

El primer término se va: $\langle \varphi_n | H_0 - E_n^0 | 2 \rangle = \overbrace{(E_n^0 - E_n^0)}^{\langle \varphi_n |} | 2 \rangle$

$$\langle \varphi_n | V - \varepsilon_1 | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 0 \text{, pero } | \varphi_n \rangle \perp | 1 \rangle$$

$$\Rightarrow \varepsilon_2 = \langle \varphi_n | V | 1 \rangle$$

$$= \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | V | \varphi_p \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

$$= \sum_{p \neq n} \frac{| \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle |^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

# Ejemplo

**Complement $A_{XI}$**

**A ONE-DIMENSIONAL HARMONIC OSCILLATOR SUBJECTED TO A PERTURBING POTENTIAL IN $x$, $\cancel{x^2, \ x^3}$**

## Complement $A_{XI}$

## A ONE-DIMENSIONAL HARMONIC OSCILLATOR SUBJECTED TO A PERTURBING POTENTIAL IN $x$, $x^2$, $x^3$

1. Perturbation by a linear potential
   a. *The exact solution*
   b. *The perturbation expansion*

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

$$E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad | \varphi_n \rangle$$

Agregamos la perturbación: $W = \lambda\hbar\omega \hat{X}$

$$\Rightarrow \quad H = H_0 + W$$

Este problema se puede resolver en forma exacta:

$$W = -q\mathscr{E}X = -q\mathscr{E}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{X}$$

**Complement $F_V$**

**A CHARGED HARMONIC OSCILLATOR IN A UNIFORM ELECTRIC FIELD**

$$\lambda\hbar\omega \longleftrightarrow -q\mathscr{E}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\lambda^2}{2}\hbar\omega$$

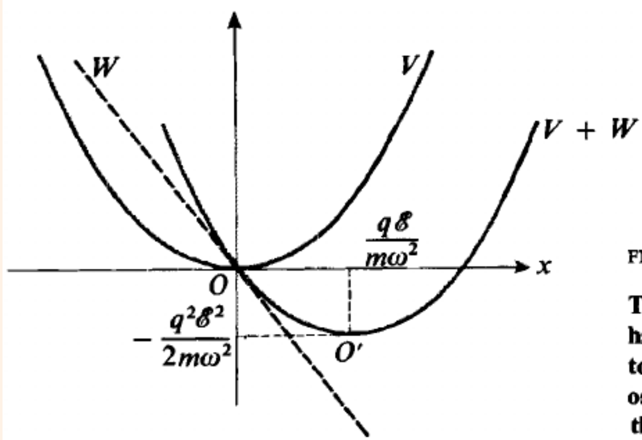



FIGURE 1

The presence of a uniform electric field has the effect of adding a linear term $W$ to the potential energy $V$ of the harmonic oscillator; the total potential $V + W$ is then represented by a displaced parabola.

Similarly, we see from (40) of $F_V$ (after having replaced $P$ by its expression in terms of the creation and annihilation operators $a^\dagger$ and $a$):

$$| \psi_n \rangle = e^{-\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)} | \varphi_n \rangle \tag{8}$$

The limited expansion of the exponential then yields:

$$\begin{aligned} | \psi_n \rangle &= \left[ 1 - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) + \dots \right] | \varphi_n \rangle \\ &= | \varphi_n \rangle - \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} | \varphi_{n+1} \rangle + \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} | \varphi_{n-1} \rangle + \dots \end{aligned} \tag{9}$$

Usando teoría de perturbaciones:

$$W = \lambda \hbar\omega \hat{X} \quad \Rightarrow \quad W = \lambda \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$$

$W$ then mixes the state $| \varphi_n \rangle$ only with the two states $| \varphi_{n+1} \rangle$ and $| \varphi_{n-1} \rangle$. The only non-zero matrix elements of $W$ are, consequently:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n+1} | W | \varphi_n \rangle &= \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, \hbar\omega \\ \langle \varphi_{n-1} | W | \varphi_n \rangle &= \lambda \sqrt{\frac{n}{2}}\, \hbar\omega \end{aligned} \tag{11}$$

Tenemos que aplicar la fórmula:

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} + \ldots$$

Tenemos que aplicar la fórmula:

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} + \dots$$

replacing $E_n^0 - E_{n'}^0$ by $(n - n')\hbar\omega$,

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + 0 - \frac{\lambda^2(n+1)}{2}\hbar\omega + \frac{\lambda^2 n}{2}\hbar\omega + \dots \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\lambda^2}{2}\hbar\omega + \dots \end{aligned}$$

A segundo orden ya coincide con el exacto

Y para el exacto:

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_{n'}^0} |\varphi_{n'}\rangle + \dots$$

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle - \lambda\sqrt{\frac{n+1}{2}}|\varphi_{n+1}\rangle + \lambda\sqrt{\frac{n}{2}}|\varphi_{n-1}\rangle + \dots$$

# Perturbaciones independientes del tiempo: Caso de un nivel degenerado

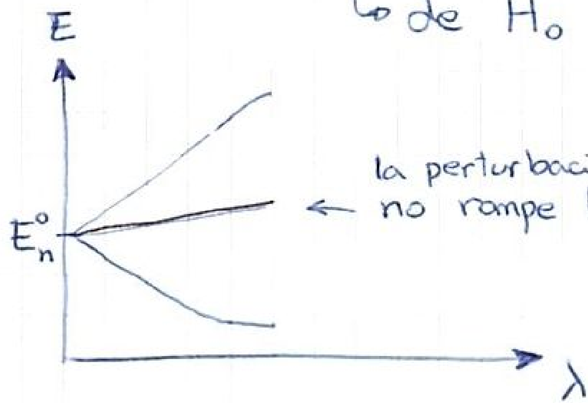
# Perturbación de un nivel degenerado

## Perturbación de un nivel degenerado

Nivel $E_n^0$, degeneración $g_n$. $\left(H_0 |\varphi_n^i\rangle = E_n^0 |\varphi_n^i\rangle\right)$

Autosubespacio asociado $\mathcal{E}_n^0$.
de $H_0$

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V$$




← la perturbación no rompe la degeneración

$$E(\lambda) \simeq \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1$$

# Perturbación de un nivel degenerado

Buscamos correcciones a primer orden en $\lambda$.

$$(H_0 - \varepsilon_0)\,|1\rangle + (V - \varepsilon_1)\,|0\rangle = 0$$

Proyectamos sobre $|\varphi_n^i\rangle$ $\quad \left( H_0 |\varphi_n^i\rangle = E_n^0 |\varphi_n^i\rangle \right)$

$$\underbrace{\langle \varphi_n^i | H_0}_{\langle \varphi_n^i | \varepsilon_0} - \varepsilon_0 | 1 \rangle + \langle \varphi_n^i | V - \varepsilon_1 | 0 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_n^i | V | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \qquad i, j = 1, \dots, g_n$$

Insertar: $\sum_{m,j} |\varphi_m^j\rangle\langle\varphi_m^j| = \mathbb{1}$

$$\varepsilon_1 \langle\varphi_n^i|0\rangle = \langle\varphi_n^i|V|0\rangle = \langle\varphi_n^i|V\left(\sum_{m,j}|\varphi_m^j\rangle\langle\varphi_m^j|\right)|0\rangle$$

$$= \sum_{m\,j} \langle\varphi_n^i|V|\varphi_m^j\rangle\langle\varphi_m^j|0\rangle$$

Como $\{|0\rangle\} \in \mathcal{E}_n$, será $\langle\varphi_m^j|0\rangle = \delta_{mn}$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{g_n} \langle\varphi_n^i|V|\varphi_n^j\rangle\langle\varphi_n^j|0\rangle = \varepsilon_1 \langle\varphi_n^i|0\rangle$$

# Perturbación de un nivel degenerado

Tomemos la matriz $\langle \varphi_n^i | V | \varphi_n^j \rangle$

Dimensión : $g_n \times g_n$

$$(V)_n = \begin{pmatrix} \langle \varphi_n^1 | V | \varphi_n^1 \rangle & \langle \varphi_n^1 | V | \varphi_n^2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n^1 | V | \varphi_n^{g_n} \rangle \\ \langle \varphi_n^2 | V | \varphi_n^1 \rangle & \cdots & & \\ \vdots & & & \\ \langle \varphi_n^{g_n} | V | \varphi_n^1 \rangle & \cdots & & \langle \varphi_n^{g_n} | V | \varphi_n^{g_n} \rangle \end{pmatrix}$$

Tenemos un problema de autovalores de dim $g_n \times g_n$

que nos dará $\begin{cases} \text{autovalores : } \varepsilon_1^k \text{ a } 1^{er} \text{ orden en } \lambda & k = 1, \dots, g_n \\ \text{autoestados : } |0^k\rangle \text{ a } 0^{th} \text{ '' en } \lambda & k = 1, \dots, g_n \end{cases}$

Puede ocurrir que alguna $\varepsilon_1^k$ sea degenerada;

o sea, no necesariamente hay $g_n$ valores distintos.

Entonces, a primer orden:

$$E_{n j_k}(\lambda) = E_n^0 + \lambda\, \varepsilon_1^k \qquad k = 1, \dots, f_n \leq g_n$$

Si $f_n = g_n$, es porque se rompe completamente

la degeneración a primer orden.

# Resumen de la Clase 20

En esta clase vimos:

- Perturbaciones independientes del tiempo: Planteo del problema
- Perturbación de un nivel no degenerado
- Perturbación de un nivel degenerado