$\boxed{P8}$ "rotor rígido", en un campo magnético externo : $\vec{B}$

p. ej. : modelo de molécula diatómica

$$\hat{H} = \overbrace{A\hat{L}^2 + \hbar B \cos\theta_0 \hat{L}_z}^{H_0} + \overbrace{\hbar B \operatorname{Sen}\theta_0 \hat{L}_y}^{V \text{ (perturbación con } \theta_0 \ll 1)}$$

despreciando términos cuadráticos en A, B

con esta elección A y B tienen las mismas unidades!

Trabajamos en teoría de perturbaciones : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

asumiendo $\theta_0 \ll 1$ buscamos los autoval. de energía al orden más bajo no-nulo.

(I) Conocemos los autoestados y las autoenergías de $\hat{H}_0$:

$$\hat{H}_0 \underbrace{|l, m\rangle}_{\text{base de autoestados de } \{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}} = (A\hat{L}^2 + \hbar B \cos\theta_0 \hat{L}_z)|l, m\rangle = \dots$$

$$\dots = \hbar^2 [A l(l+1) + B \cos\theta_0 . m] |l, m\rangle$$

sino debería ser

$= \hbar^2 A l(l+1) + B\hbar \cos\theta_0 m$

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ \hat{L}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow E^{(0)}_{l,m} = \hbar^2 [A l(l+1) + B \cos\theta_0 \cdot m]$$

Energías del Hamiltoneano sin perturbar

(II) Notar que para $\theta_0 \ll 1$: $\begin{cases} \operatorname{Sen}\theta_0 \simeq \theta_0 + \dots \\ \cos\theta_0 \simeq 1 + \dots \end{cases}$

$$\Rightarrow \hat{H} \simeq \underbrace{A\hat{L}^2 + \hbar B \hat{L}_z}_{\text{Orden } 1} + \underbrace{\theta_0 B \hbar \hat{L}_y}_{\text{orden} \sim \theta_0 \ll 1} + \mathcal{O}(\theta_0^2)$$

ie es consistente nuestra elección de H_0

Queremos $E_{\ell,m} = E_{\ell,m}^{(0)} + E_{\ell,m}^{(1)} + E_{\ell,m}^{(2)} + \cdots$

truncando en la 1ª corrección no-nula

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

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

$\vdots$

$E_{\ell,m}^{(n)}$

(III) Notemos que $V = \operatorname{sen}\theta_0 \hbar B \hat{L}_y = \frac{\hbar \operatorname{sen}\theta_0 B}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$

• Veamos que a 1er O. la corrección es nula:

$$E_{\ell,m}^{(1)} = \underbrace{\langle \ell,m | (\hat{L}_+ - \hat{L}_-) | \ell,m \rangle}_{\underbrace{\langle \ell,m | \hat{L}_+ | \ell,m \rangle}_{\text{Si } m<\ell \text{ (sino, es cero)}: \ \underbrace{\langle \ell,m | \ell,m+1 \rangle}_{=0}} - \underbrace{\langle \ell,m | \hat{L}_- | \ell,m \rangle}_{\text{Si } m>-\ell: \ \underbrace{\langle \ell,m | \ell,m-1 \rangle}_{=0}}} \cdot \left(\frac{\hbar \operatorname{sen}\theta_0 B}{2i} \right)$$

$\therefore$ $\boxed{E_{\ell,m}^{(1)} = 0}$

• Busquemos la corrección a 2^{do} O.:

Notar que los términos con $l' \neq l$ son todos cero, sólo sumamos sobre m'

$$E^{(2)}_{l,m} = \frac{|\langle l, m+1 | V | l, m\rangle|^2}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m+1}} + \frac{|\langle l, m-1 | V | l, m\rangle|^2}{E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m-1}}$$

donde
$$\begin{cases} E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m+1} = [\cancel{m} - (\cancel{m}+1)]\hbar^2 B\cos\theta_0 = -\hbar^2 B\cos\theta_0 \\ E^{(0)}_{l,m} - E^{(0)}_{l,m-1} = [\cancel{m} - (\cancel{m}-1)]\hbar^2 B\cos\theta_0 = \hbar^2 B\cos\theta_0 \end{cases}$$

$$E^{(2)}_{l,m} = \frac{\hbar^2 B^2 \operatorname{sen}^2\theta_0}{(2i)^2 \hbar^2 B\cos\theta_0}\left\{-|\langle l, m+1 | \hat{L}_+ | l, m\rangle|^2 + |\langle l, m-1 | \hat{L}_- | l, m\rangle|^2\right\}$$

$$= \frac{\hbar^2 B}{4}\frac{\operatorname{sen}^2\theta_0}{\cos\theta_0}\left\{-\left(l(l+1) - m(m+1)\right) + \left(l(l+1) - m(m-1)\right)\right\}$$

$$+m(m+1) - m(m-1) = \cancel{m^2} + m - \cancel{m^2} + m = 2m$$

$$\Rightarrow E^{(2)}_{l,m} = \frac{\hbar^2 B}{2}\frac{\operatorname{sen}^2\theta_0}{\cos\theta_0}\, m$$

$$\therefore\ E_{l,m} = \hbar^2\left\{A\,l(l+1) + B\cos\theta_0\, m\left[1 + \frac{1}{2}\underbrace{tg^2\theta_0}_{\approx\,\theta_0^2}\right]\right\} + O(\theta_0^3)$$

Comparación con la Sol. exacta para $l=1$:

Usamos la Rep. matricial para los operadores sobre estados de $l=1$:

$$\hat{L}^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ & & 1\end{pmatrix}; \quad \hat{L}_z = \hbar\begin{pmatrix}1 & & \\ & 0 & \\ & & -1\end{pmatrix}; \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = 2A\hbar^2\hat{\mathbb{1}} + B\hbar^2\left[\begin{pmatrix}c\theta_0 & & \\ & 0 & \\ & & -c\theta_0\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -is\theta_0 & 0 \\ is\theta_0 & 0 & -is\theta_0 \\ 0 & is\theta_0 & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$\hat{H} = \hbar^2\left\{2A\hat{\mathbb{1}} + B\underbrace{\begin{pmatrix}c\theta_0 & -\frac{is\theta_0}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{is\theta_0}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{is\theta_0}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{is\theta_0}{\sqrt{2}} & -c\theta_0\end{pmatrix}}_{\frac{1}{\hbar}\hat{L}\cdot\hat{n}}\right\}$$

con $\hat{n} = (0, \operatorname{Sen}\theta_0, \operatorname{Cos}\theta_0)$

Escaneado con CamScanner

$(\hat{\vec{L}} \cdot \hat{n})$ tiene autovalores $-\hbar$, 0, $+\hbar$

Con autoestados: (expresados en la base $\{|l=1, m\rangle\}$)

$$\left(-i\frac{1}{2}(1-\cos\theta_0),\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\,\text{sen}\,\theta_0,\ \frac{i}{2}(1+\cos\theta_0)\right) = |\vec{L}\cdot\hat{n}_0 = -\hbar\rangle$$

$$\left(+\frac{i}{\sqrt{2}}\,\text{sen}\,\theta_0,\ -\cos\theta_0,\ \frac{i}{\sqrt{2}}\,\text{sen}\,\theta\right) = |\vec{L}\cdot\hat{n}_0 = 0\rangle$$

$$\left(-\frac{i}{2}(1+\cos\theta),\ \frac{1}{\sqrt{2}}\,\text{sen}\,\theta,\ \frac{i}{2}(1-\cos\theta)\right) = |\vec{L}\cdot\hat{n}_0 = +\hbar\rangle$$

$\therefore$ la energías exactas son:

$$\begin{cases} E_{-1} = 2\hbar^2 A - \hbar^2 B = \hbar^2\{2A - B\} \\ E_0 = 2\hbar^2 A \\ E_1 = 2\hbar^2 A + \hbar^2 B \end{cases}$$

Comparemos con el resultado perturbativo:

$$\left[E_{l,m} = E^{(0)}_{l,m} + E^{(2)}_{l,m} \underset{\uparrow}{=} 2A\hbar^2 + mB\hbar^2 + O(\theta_0^2)\right]$$

$l=1$, $\theta_0 \ll 1 \Rightarrow \begin{cases} \cos\theta_0 \approx 1 \\ \text{tg}\,\theta_0 \approx \theta_0 \end{cases}$

$\therefore$ [Vimos que la sol. exacta coincide con la sol. perturbativa hasta orden lineal en θ_0]

Más aún ...

Escaneado con CamScanner

$\cos\theta_0$ a 2^{do} $\mathcal{O}$. en θ_0 $\quad$ $tg^2\theta_0$ a $\mathcal{O}(\theta_0^2)$

$\ell = 1$

$$E_{\ell,m} \simeq \hbar^2 \left\{ 2A + B\left[\left(1 - \frac{\theta_0^2}{2} \right) m + \frac{1}{2}\frac{\theta_0^2}{2} m \right] \right\}$$

$$E_{1,m} = \hbar^2 \left\{ 2A + Bm \right\} + \mathcal{O}(\theta_0^3)$$

la sol. sigue coincidiendo a $\mathcal{O}(\theta_0^2)$.

Escaneado con CamScanner