

# Física Teórica 2

Primer cuatrimestre de 2018

## Guía 11: Teoría de perturbaciones

### Parte I: Perturbaciones independientes del tiempo.

1. Si los estados vibracionales de una molécula diatómica dipolar pueden ser descritos adecuadamente por un potencial armónico unidimensional, estudie qué ocurre cuando se enciende un campo eléctrico constante de modo que la energía se ve modificada en

$$V = Fx,$$

donde  $F$  es una constante real que depende de la molécula y el campo externo.

- a) Calcule el desplazamiento de energía del estado fundamental al menor orden no nulo.
- b) Resuelva este problema en forma exacta y compare con el resultado hallado en (a).

Ayuda: puede usar los elementos de matriz calculados en la guía de oscilador armónico:

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} (\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$$

2. 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

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

Calcule las autofunciones de la energía para el estado fundamental y el primer excitado.

Si agregamos una perturbación independiente del tiempo de la forma

$$V_1 = \begin{cases} \lambda xy & \text{para } 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

calcule las autofunciones de la energía a orden cero, y los desplazamientos de energía a primer orden en  $\lambda$  para el estado fundamental y el primer excitado.

3. Considere un oscilador armónico isótropo en dos dimensiones. 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, por ejemplo: para iones en una trampa electromagnética que es muy confinante en una dirección ( $z$  en este caso), 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) Ahora se aplica la perturbación  $V = \delta m \omega^2 xy$ , donde  $\delta$  es un número real adimensional mucho menor que uno. Encuentre el autoestado de energía a cero orden y la correspondiente autoenergía 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 exactamente  $H_0 + V$ . Compare con los resultados perturbativos hallados en (b).
4. 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  $\omega_L$  (término paramagnético) y uno cuadrático en  $\omega_L$  (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  $\omega_L/\omega$  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  $\omega_L$ . 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.
5. Un átomo de un electrón cuyo estado fundamental es no degenerado está ubicado en una región en donde hay un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  uniforme en la dirección  $\hat{z}$ . Obtenga una expresión aproximada del momento dipolar inducido en el estado fundamental considerando el valor medio del operador  $ez$  respecto del vector de estado corregido a primer orden por la teoría de perturbaciones. Muestre que la misma expresión puede obtenerse del corrimiento  $\Delta = -\alpha|\mathbf{E}|^2/2$  del estado fundamental corregido a segundo orden ( $\alpha$  es la polarizabilidad). Ignore el espín.
6. Las moléculas de amoníaco en presencia de un campo eléctrico pueden orientarse en dos direcciones, cada una con diferente energía. Esta orientación, también puede invertirse con cierta, pequeña, probabilidad. Su orientación, en estas circunstancias, puede ser descrita por un sistema de dos niveles con el siguiente Hamiltoniano

$$H = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^0 \end{pmatrix}.$$

Claramente los autovectores de la energía del problema no perturbado ( $\lambda = 0$ ) son

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- a) Resuelva este problema exactamente, encuentre los autovectores y autovalores de la energía.
- b) Asumiendo que  $\lambda|\Delta| \ll |E_1^0 - E_2^0|$ , resuelva el mismo problema usando la teoría de perturbaciones. Halle la corrección de primer orden en los autovectores y de segundo orden en los niveles de energía. Compare los resultados con los obtenidos en (a).

- c) Suponga ahora que los niveles de energía no perturbados están casi degenerados ( $|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda|\Delta|$ ). Muestre que los resultados obtenidos en (a) se parecen mucho a los que obtendría al aplicar la teoría de perturbaciones para el caso degenerado ( $E_1^0 = E_2^0$ ).

7. Un sistema de tres niveles tiene una matriz Hamiltoniana perturbada

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix},$$

donde  $E_2 > E_1$ , y las cantidades  $a$  y  $b$  son los elementos de matriz de la perturbación (su orden de magnitud es pequeño respecto de  $E_2 - E_1$ ). Use la teoría de perturbaciones del caso no degenerado para calcular los autovalores a segundo orden. ¿Es este procedimiento correcto? Luego diagonalice la matriz y encuentre los autovalores en forma exacta. Finalmente, use la teoría de perturbaciones a segundo orden para el caso degenerado. Compare los tres resultados obtenidos.

8. Considere la molécula de amoníaco  $\text{NH}_3$ , 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  $|i\rangle$  con  $i = 2, 3, 4$ ) tiene una energía  $E_2$ . Consideremos ahora el efecto túnel entre átomos, dado por una perturbación  $W$  tal que

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

El Hamiltoniano total es entonces  $H = H_0 + W$ .

- a) Hallar la matriz de  $H$  en la base de localización  $|j\rangle$ .  
 b) Considerando  $|a| \ll E_{1,2}$ , hallar como se corrigen los niveles de energía hasta segundo orden, y los autoestados hasta primer orden de teoría de perturbaciones.
9. Calcule el efecto Stark para los niveles  $2s_{1/2}$  y  $2p_{1/2}$  del átomo Hidrógeno en un campo eléctrico suficientemente débil (es decir que  $e|\mathbf{E}|a_0$  es pequeño comparado con la constante de estructura fina, donde  $a_0$  es el radio de Bohr). Considere un potencial perturbativo de la forma

$$V = -ez|\mathbf{E}|,$$

y use consideraciones de paridad y el teorema de Wigner-Eckart para ver que elementos de matriz de  $V$  se anulan. Muestre que el corrimiento de energía es lineal en  $|\mathbf{E}|$ . La integral radial que necesita es

$$\langle 2s|r|2p\rangle = 3\sqrt{3}a_0.$$

Discuta brevemente las consecuencias (si las hay) de la inversión temporal en este problema.

10. a) Suponga que el Hamiltoniano de un rotor rígido en un campo magnético es de la forma

$$A\mathbf{L}^2 + BL_z + CL_y,$$

si se desprecian los términos cuadráticos en los campos. Asumiendo que  $B \gg C$ , use la teoría de perturbaciones para obtener los autovalores de la energía al orden mas bajo no nulo.

b) Considere los elementos de matriz

$$\langle n', l', m'_l, m'_s | (3z^2 - r^2) | n, m, m_l, m_s \rangle, \quad \langle n', l', m'_l, m'_s | xy | n, m, m_l, m_s \rangle,$$

de un átomo con un electrón (por ejemplo, alcalino). Escriba las reglas de selección para  $\Delta l$ ,  $\Delta m_l$ , y  $\Delta m_s$ . Justifique su respuesta.

**Anexo:** Principio variacional.

11. Estime la energía del nivel fundamental del oscilador armónico unidimensional usando

$$\langle x | \tilde{0} \rangle = e^{-\beta|x|},$$

como función de prueba de parámetro variable  $\beta$ .

Ayuda: tenga en cuenta la integral

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

12. Estime el autovalor  $\lambda$  mas bajo de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - |x|) \psi = 0, \quad \psi \rightarrow 0 \text{ para } |x| \rightarrow \infty,$$

usando el método variacional con

$$\psi = \begin{cases} c(\alpha - |x|) & \text{para } |x| < a \\ 0 & \text{para } |x| > a \end{cases}$$

como función de prueba de parámetro variacional  $\alpha$ . Tenga cuidado porque  $d\psi/dx$  es discontinua en  $x = 0$ . Puede probarse que el valor exacto del autovalor es 1,019.

**Parte II:** Perturbaciones dependientes del tiempo.

13. Considere el oscilador armónico unidimensional de frecuencia  $\omega_0$ , que a  $t < 0$  está en el estado fundamental. A  $t = 0$  se enciende una perturbación

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

donde  $F_0$  es una constante. 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. ¿Es válido este procedimiento para  $\omega \approx \omega_0$ ?

14. Un oscilador armónico unidimensional está en el estado fundamental para  $t < 0$ . A tiempos positivos se lo somete a una fuerza dependiente del tiempo pero espacialmente uniforme en la dirección  $x$  dada por

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau}.$$

a) Usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, obtenga la probabilidad de encontrar el oscilador en el primer estado excitado a primer orden. Muestre que en el límite  $t \rightarrow \infty$ , la expresión es independiente del tiempo. ¿Es esto razonable o sorprendente?

b) ¿Podemos encontrar al oscilador en estados excitados de mayor energía?

15. El Hamiltoniano de un sistema de dos niveles

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$$

es perturbado por el potencial

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda \cos \omega t \\ \lambda \cos \omega t & 0 \end{pmatrix},$$

donde  $\lambda$  es real.

a) A  $t = 0$  el sistema está en el estado

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo y asumiendo que  $E_1^0 - E_2^0$  no es cercano a  $\pm \hbar \omega$ , derive una expresión para la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

para tiempos positivos.

b) ¿Por qué este procedimiento no es válido cuando  $E_1^0 - E_2^0 \approx \pm \hbar \omega$ ?

16. Considere un sistema compuesto por dos objetos de espín 1/2. Para  $t < 0$  el Hamiltoniano no depende del espín y puede igualarse a cero corriendo la escala de energía. Para  $t > 0$  el Hamiltoniano está dado por

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

Suponga que 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 (b) da resultados correctos?

17. Considere un sistema de dos niveles con  $E_1 < E_2$  y un potencial dependiente del tiempo que conecta los dos niveles

$$V_{11} = V_{22} = 0, \quad V_{12} = V_{21}^* = \gamma e^{i\omega t},$$

donde  $\gamma$  es real. A  $t = 0$  se sabe que solo el nivel mas bajo está poblado, es decir que  $c_1(0) = 1$ , y  $c_2(0) = 0$ .

a) Encuentre  $|c_1(t)|^2$  y  $|c_2(t)|^2$  para  $t > 0$  en forma exacta resolviendo la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \sum_{n=1}^2 V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} c_n, \quad k = 1, 2.$$

- b) Resuelva el mismo problema usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo al orden mas bajo no nulo. Compare con el resultado hallado en (a) para pequeños valores de  $\gamma$ . Trate por separado los siguientes casos: (i)  $\omega$  muy diferente de  $\omega_{12}$ , y (ii)  $\omega \approx \omega_{12}$ .
18. Considere un átomo de hidrógeno con autoestados  $|n, l, m_l, s, m_s\rangle$ . En  $t = 0$  se encuentra en el estado fundamental  $|1, 0, 0, 1/2, +\rangle$  y es sometido a una perturbación que depende armónicamente del tiempo, es decir con un potencial de interacción

$$V(t) = -e(ax - br^2 Y_2^0) \cos(\omega t).$$

Diga cuáles son todos los estados posibles que pueden ser alcanzados a primer orden en teoría de perturbaciones (haga todas las consideraciones que sean necesarias) si:

- a)  $a \neq 0$  y  $b = 0$ ,  
 b)  $a = 0$  y  $b \neq 0$ ,  
 c)  $a \neq 0$  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?

19. Considere la emisión espontánea de un fotón por un átomo excitado. El proceso es conocido como una transición E1. Suponga que el número cuántico magnético del átomo decrece en una unidad. ¿Cuál es la distribución angular del fotón emitido? Discuta también la polarización del fotón teniendo en cuenta la conservación del momento angular de todo el sistema (átomo y fotón).
20. El estado fundamental de un átomo de hidrógeno

$$\psi_{n=1, l=0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{z}{a_0} \right)^{2/3} e^{-Zr/a_0},$$

es sujeto a la acción de un potencial dependiente del tiempo

$$V(\mathbf{x}, t) = V_0 \cos(kz - \omega t).$$

Usando la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, obtenga una expresión para la tasa de la transición en la cual el electrón es emitido con momento  $\mathbf{p}$ . En particular, muestre como calcular la distribución angular del electrón emitido en términos de los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  medidos respecto del eje  $z$ . Discuta la relación de este problema con un modelo mas realista del efecto fotoeléctrico. (Nota: Si encuentra un problema de normalización, tome a la función de onda final como

$$\psi_f(\mathbf{x}) = \left( \frac{1}{L^{2/3}} \right) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar},$$

con  $L$  suficientemente grande, aunque debería mostrar que los efectos observables son independientes de  $L$ .)