

Física Teórica 2

Primer cuatrimestre de 2019

Guía 11: Teoría de Perturbaciones

I. Perturbaciones Independientes del Tiempo

P1 Considere una molécula diatómica dipolar tal que los estados vibracionales pueden ser descriptos 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

$$V = Fx,$$

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

- Calcule el desplazamiento de energía del estado fundamental al menor orden no nulo. (Ayuda: use los resultados ya calculados anteriormente en la guía de oscilador armónico; por ejemplo que los elementos de matriz de posición son: $\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$).
- 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 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. De esta forma, la dinámica de la orientación de la molécula puede ser descripta por un sistema de dos niveles, $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, con el siguiente Hamiltoniano

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

Claramente los autovectores del Hamiltoniano del problema sin posibilidad de cambiar de orientación ($\lambda = 0$) son $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

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

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

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

- Resuelva el problema de autofunciones y energías de este Hamiltoniano de forma exacta. En particular, muestre 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

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

- 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).
- 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

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

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.

- ¿Cuáles son las energías de los tres estados de menor energía? ¿Hay degeneración?
- Suponga ahora que se aplica la perturbación $V = \delta m\omega^2 xy$, 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.
- 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

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

- Considerando $|a| \ll E_{1,2}$, hallar cómo es la energía del estado fundamental hasta segundo orden, y el correspondiente autoestado hasta primer orden en $|a|$.
- Considerando $|a| \ll E_{1,2}$, 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

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

- 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*).
- 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 $\mathbf{p} \doteq q(\mathbf{r}_q - \mathbf{r}_{-q})$). Muestre que el mismo resultado se obtiene derivando la energía encontrada en ítem (a) respecto de las componentes del campo.
- 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 $\langle 2s|r|2p \rangle = 3\sqrt{3}a_0$).

II. Perturbaciones Dependientes del Tiempo

P7 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 $t > 0$.
- (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:

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

P8 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 $|n\rangle$ 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:

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

P9 Considere un sistema de dos niveles, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, cuyo Hamiltoniano está dado por

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

con $\sigma_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$. A $t = 0$ el sistema es perturbado por el potencial

$$V(t) = \lambda \sin(\omega t) \sigma_x, \quad \lambda \in \mathbb{R}.$$

- (a) A $t = 0$ el sistema está en el estado $|0\rangle$. 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 $t > 0$.
- (b) ¿Qué sucede en el caso de resonancia (es decir $\omega_0 = \omega$)?

P10 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

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

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

- (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?

P11 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?