

Trabajo Computacional Teoría de Perturbaciones

Parte A: Soluciones no-perturbativas de los problemas perturbativos dados en la práctica

1. Resolver numéricamente los problemas dados en la práctica de pozos infinitos con perturbaciones.
2. Resolver numéricamente el oscilador armónico unidimensional con una perturbación cúbica ($V' = ax^3$).
3. Resolver numéricamente el oscilador armónico unidimensional con una perturbación cuártica ($V' = ax^4$).

Parte B: Integrales para el cálculo del Helio

Se definen los términos de interacción interelectrónica como

$$J_{\alpha,\beta} = \int |\varphi_{\alpha}(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{r_{12}} |\varphi_{\beta}(\vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$K_{\alpha,\beta} = \int \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \varphi_{\beta}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \varphi_{\alpha}(\vec{r}_2) \varphi_{\beta}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

1. Calcular la integral $J_{1s,1s}$, y por medio de ella, calcular la energía del estado fundamental del Helio, utilizando como base un producto de funciones hidrogénicas.
Ayuda: Esta integral está resuelta en el libro de Griffiths (entre otros varios).
2. Calcular las integrales $J_{1s,2s}$, $J_{1s,2p}$, $K_{1s,2s}$ y $K_{1s,2p}$. Calcular las energías de los niveles $1s2s$ y $1s2p$, asumiendo una base de producto de estados hidrogénicos.
Ayuda: Estas integrales están resueltas en el libro de Bransden y Joachain (entre otros).

Parte C: Polarizabilidad del Estado Fundamental del H

El objetivo de esta parte de la práctica es calcular la polarizabilidad dipolar del estado $1s$ del Hidrógeno. La polarizabilidad es la magnitud del momento dipolar \mathbf{D} . Este dipolo, en presencia de un campo eléctrico \mathbf{E} , experimenta una energía $\Delta = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}$. El plan entonces es perturbar el Hamiltoniano atómico con un campo eléctrico (con lo cual la interacción es $H' = eEz$). Una vez calculado el cambio en la energía del estado (Δ) debido a la perturbación, calculamos el dipolo haciendo

$$\mathbf{D} = -\frac{\partial \Delta}{\partial \mathbf{E}}. \quad (1)$$

El procedimiento sugerido es el siguiente:

1. Comprobar que a primer orden la perturbación no produce ningún cambio energético en el estado fundamental.
2. Estimar un límite máximo del cambio de energía haciendo segundo orden de teoría de perturbaciones.

3. Calcular los elementos de matriz y las energías correspondientes para poder evaluar la corrección del segundo orden. Si está todo bien, los resultados deberían converger a un valor cercano al límite obtenido en el paso anterior. Si se obtiene convergencia a un valor diferente, es probable que exista un error numérico, pero también es posible que el error sea conceptual.
4. Una vez que se obtiene la corrección de energía Δ , se obtiene la polarizabilidad dipolar \mathbf{D} . Tener en cuenta que esta es proporcional al campo eléctrico, por lo que se trata de un momento dipolar *inducido*.
5. El cálculo detallado fue realizado por A. Dalgarno, y se encuentra detallado en los libros de Schiff y de Merzbacher.