

Física Teórica II

Práctica 8: 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

$$V = bx$$

donde b 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: En una guía anterior calcularon el elemento de matriz:

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

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

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

- a) ¿Cuáles son las autofunciones de la energía para el estado fundamental y el primer excitado?
 b) Si agregamos una perturbación independiente del tiempo de la forma

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

¿Cómo son las autofunciones de la energía a orden cero, y los desplazamientos de energía a primer orden para el estado fundamental y el primer excitado?

3. Considere un oscilador armónico isótropo en dos dimensiones. El hamiltoniano está dado por

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

Este tipo de Hamiltoniano puede usarse para describir aproximadamente varios sistemas físicos, por ejemplo: 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 δ es un número real adimensional mucho menor que uno. Encuentre el autoestado de energía a orden cero 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). Estudie que pasa si δ es grande (tanto negativo como positivo).
4. 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:

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

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 ($E_1^0 = E_2^0$).

NOTA: Vean el tomo 3 del libro de las Lecturas de Feynman para leer mucho más sobre la molécula de amoníaco como un sistema de dos niveles.

5. Considere nuevamente 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 $|i\rangle$ 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.
6. Calcule el efecto Stark para los niveles $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$ del átomo de 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.

7. El fullereno es una molécula esférica átomos de carbono. La más común, de 60 átomos, tiene forma de pelota de fútbol. Modelaremos su momento de inercia I considerándolo isotropo. Además agregaremos un campo magnético externo principalmente en la dirección z pero con una pequeña componente en y . En tal caso, deprecando términos de órdenes superiores en los campos podemos describir las propiedades rotacionales de este sistema con el Hamiltoniano:

$$\frac{\mathbf{L}^2}{2I} + BL_z + CL_y$$

Asumiendo que $B \gg C$, use la teoría de perturbaciones para obtener los autovalores de la energía al orden mas bajo no nulo.

Nota: Este problema puede resolverse exactamente.

8. Calcule el efecto Zeeman cuadrático para el estado fundamental del átomo de hidrógeno $[\langle \mathbf{x}|\varphi_0 \rangle = (1/\sqrt{\pi a_0^3}) e^{-r/a_0}]$, debido al término $e^2 \mathbf{A}^2 / 2m_e c^2$, a primer orden. Escriba el corrimiento de energía como

$$\Delta = -\frac{1}{2}\chi \mathbf{B}^2$$

y obtenga la expresión para la susceptibilidad diamagnética, χ . Ayuda:

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^n dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

Anexo: Principio Variacional

9. 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 β . Tenga en cuenta la integral

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

10. Estime el autovalor λ 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

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

como función de prueba de parámetro variacional α . 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

11. Consideren un átomo alcalino, es decir, que puede ser aproximadamente descrito por una función de onda hidrogenoide con un electrón (con espín, claro): $|n, m, m_l, m_s\rangle$. Si se enciende un campo eléctrico cuadrupolar que transiciones son posibles? Consideren en particular los campos cuadrupolares $\alpha_1(3z^2 - r^2)$ y α_2xy . Estas posibles transiciones suele llamarse reglas de selección.
12. Considere el oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω_0 , que a $t < 0$ está en el estado fundamental. A $t = 0$ se enciende una perturbación

$$V(t) = F_0x \cos \omega t$$

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 mas bajo no nulo. ¿Es válido este procedimiento para $\omega \approx \omega_0$?

13. 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 especialmente uniforme en la dirección x dada por

$$F(t) = F_0e^{-t/\tau}$$

- 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?
14. 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 λ 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 $E_1^0 - E_2^0 \approx \pm\hbar\omega$?

15. 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?

16. 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 γ es real. A $t = 0$ se sabe que sólo 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 γ . Trate por separado los siguientes casos:

i) ω muy diferente de ω_{12} , y

ii) $\omega \approx \omega_{12}$.

17. 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 θ y ϕ medidos respecto del eje z . Discuta la relación de este problema con un modelo más 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 .