

Teoría de Perturbaciones

Se usa para conocido perturbación $\lambda \ll 1$

$$H = H_0 + W = H_0 + \lambda \hat{W}$$

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n^0 |\varphi_n\rangle$$

← e-vector de H_0 ← e-valor de H_0

Buscamos $H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$

$$E_p(\lambda) = E_0^{(p)} + \lambda E_1^{(p)} + \lambda^2 E_2^{(p)} + \dots$$

$$|\psi_p(\lambda)\rangle = |\alpha_0^{(p)}\rangle + \lambda |\alpha_1^{(p)}\rangle + \lambda^2 |\alpha_2^{(p)}\rangle + \dots$$

Orden cero:

$$E_p(\lambda) = E_0^{(p)} = E_p^0$$

$$|\psi_p(\lambda)\rangle = |\alpha_0^{(p)}\rangle = |\varphi_p\rangle$$

Primer orden

Energía $E_p(\lambda) = E_0^{(p)} + \lambda E_1^{(p)} = E_0^{(p)} + \lambda \langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_p \rangle$

Estado $|\psi_p(\lambda)\rangle = |\alpha_0^{(p)}\rangle + \lambda |\alpha_1^{(p)}\rangle$

$$= |\varphi_p\rangle + \lambda \sum_{n \neq p} \frac{\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p \rangle}{E_p^0 - E_n^0} |\varphi_n\rangle$$

Discusión: la complejidad de aplicar la teoría depende de la forma de $\hat{W}$.

$\hat{W} = \begin{pmatrix} \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \end{pmatrix}$ ← en la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ $\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_p \rangle = 0$

↑ si esto pasa es necesario ir a 2º orden.

$\hat{W} = \begin{pmatrix} \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \end{pmatrix}$ sólo $\langle \varphi_1 | \hat{W} | \varphi_0 \rangle \neq 0$

2º orden

$$\underbrace{(H_0 + \lambda \hat{W})}_{H(\lambda)} \underbrace{\left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |\alpha_q^{(n)}\rangle \right]}_{|\psi_n(\lambda)\rangle} = \underbrace{\left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q^{(p)} \right]}_{E(\lambda)} \underbrace{\left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |\alpha_q^{(n)}\rangle \right]}_{|\psi_n(\lambda)\rangle}$$

Agrupando por potencias de λ :

$$\lambda^0 : H_0 |\alpha_0^{(p)}\rangle = \varepsilon_0^{(p)} |\alpha_0^{(p)}\rangle \quad \checkmark$$

$$\lambda^1 : H_0 |\alpha_1^{(p)}\rangle + \hat{W} |\alpha_0^{(p)}\rangle = \varepsilon_1^{(p)} |\alpha_0^{(p)}\rangle + \varepsilon_0^{(p)} |\alpha_1^{(p)}\rangle \quad \checkmark$$

$$\lambda^2 : H_0 |\alpha_2^{(p)}\rangle + \hat{W} |\alpha_1^{(p)}\rangle = \varepsilon_2^{(p)} |\alpha_0^{(p)}\rangle + \varepsilon_1^{(p)} |\alpha_1^{(p)}\rangle + \varepsilon_0^{(p)} |\alpha_2^{(p)}\rangle$$

⋮

Reescribimos la de λ^2 como

$$\left[H_0 - \underbrace{\varepsilon_0^{(p)}}_{E_p^0} \right] |\alpha_2^{(p)}\rangle + \left[\hat{W} - \varepsilon_1^{(p)} \right] |\alpha_1^{(p)}\rangle - \underbrace{\varepsilon_2^{(p)} |\alpha_0^{(p)}\rangle}_{|\phi_p\rangle}$$

Multiplicando por $\langle \phi_p |$ el primer término se elimina pues

$$\langle \phi_p | H_0 - \varepsilon_0^{(p)} | \alpha_2^{(p)} \rangle = 0$$

$E_p^0 - E_p^0 = 0$

también $\langle \phi_p | \alpha_1^{(p)} \rangle = \langle \alpha_0^{(p)} | \alpha_1^{(p)} \rangle = 0$

fin de la clase pasada

$$\cancel{\langle \phi_p | H_0 - \varepsilon_0^{(p)} | \alpha_2^{(p)} \rangle} + \cancel{\langle \phi_p | \hat{W} | \alpha_1^{(p)} \rangle} + \varepsilon_1^{(p)} \cancel{\langle \phi_p | \alpha_1^{(p)} \rangle} - \varepsilon_2^{(p)} \cancel{\langle \phi_p | \alpha_0^{(p)} \rangle} = 0$$

$$\varepsilon_2^{(p)} = \langle \phi_p | \hat{W} | \alpha_1^{(p)} \rangle$$

como $|\alpha_1^{(p)}\rangle = \sum_{n \neq p} \frac{\langle \phi_n | \hat{W} | \phi_p \rangle}{E_p^0 - E_n^0} |\phi_n\rangle$

$$\mathcal{E}_2^{(p)} = \sum_{n \neq p} \frac{\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p \rangle}{E_p^0 - E_n^0} \langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle = \sum_{n \neq p} \frac{|\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p \rangle|^2}{E_p^0 - E_n^0}$$

$$E_p(\lambda) = E_p^0 + \lambda \langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_p \rangle + \lambda^2 \sum_{n \neq p} \frac{|\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p \rangle|^2}{E_p^0 - E_n^0}$$

Ejemplo: Oscilador armónico cargado sometido a un campo eléctrico

$$H(\mathcal{E}) = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2}_{H_0} - \underbrace{q \mathcal{E} X}_W$$

potencial para un campo eléctrico homogéneo en la dirección X .

llamaremos $|\varphi_n\rangle$ a los e-vectores de H_0 .

¿Cómo cambia la energía del estado $|\varphi_n\rangle$ a primer orden en teoría de perturbaciones?

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle \quad \text{con } E_n^0 = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$$

$$W = -q \mathcal{E} \hat{X} \quad \text{escribimos } \hat{X} \text{ en términos de } a^+ \text{ y } a$$

$$= -q \mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+ + a)$$

$$\begin{cases} a^+ |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \\ a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \end{cases}$$

$$\Rightarrow E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) - q \mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \varphi_n | a^+ + a | \varphi_n \rangle \rightarrow 0$$

A primer orden no hay corrección.
Vamos a 2º orden.

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_m | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_n | W | \varphi_m \rangle &= -q \mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \varphi_n | a^\dagger + a | \varphi_m \rangle \\
 &= -q \mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\underbrace{\sqrt{m+1} \langle \varphi_n | \varphi_{m+1} \rangle}_{\delta_{n,m+1}} + \underbrace{\sqrt{m} \langle \varphi_n | \varphi_{m-1} \rangle}_{\delta_{n,m-1}} \right]
 \end{aligned}$$

$m+1=n \Rightarrow m=n-1$ $n=m-1$
 $m=n+1$

$$\begin{aligned}
 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | W | \varphi_m \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} &= +q^2 \mathcal{E}^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\frac{n}{\underbrace{E_n^0 - E_{n-1}^0}_{\hbar\omega(n-\frac{1}{2})}} + \frac{n+1}{\underbrace{E_n^0 - E_{n+1}^0}_{\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}} \right] \\
 &= q^2 \mathcal{E}^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\frac{n}{\hbar\omega} - \frac{n+1}{\hbar\omega} \right]
 \end{aligned}$$

$$= -q^2 \mathcal{E}^2 \frac{1}{2m\omega^2}$$

$$\therefore E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - q^2 \mathcal{E}^2 \frac{1}{2m\omega^2}$$

Este problema se puede resolver analíticamente obteniendo los e-valoros

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - q^2 \mathcal{E}^2 \frac{1}{2m\omega^2}$$

Pendientes:

- Teoría de perturbaciones { Caso degenerado
dependiente de t.

- Método variacional (método aproximado)

$$\mathcal{E}[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Se puede mostrar que $\hat{H}[\psi] \geq E_0$ estado de menor energía de H.

La igualdad ocurre cuando $|\psi\rangle$ es el estado base y mientras menor sea $\hat{H}[\psi]$, más se parece $|\psi\rangle$ al estado base.

① Proponer un conjunto de estados $\{|\psi\rangle\}$

② El $|\psi\rangle$ que minimice al funcional es el que más se parece al estado base.

función de prueba

$$\psi_\alpha(x) = A e^{-\alpha x^2}; \quad |\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\varphi_n\rangle$$

• Suma de momentos angulares

$$\begin{array}{ccc} \vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J} & & \\ \uparrow \quad \uparrow & \nearrow & \\ |j_1 m_1\rangle & |j_2 m_2\rangle & |j m\rangle \\ \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{desacoplada}} & & \underbrace{\hspace{5em}}_{\text{acoplada}} \end{array}$$

El problema de suma de momentos angulares se trata de traducir de la base desacoplada a la base acoplada