Teoría de perturbaciones: estacionaria y para estados no degenerados.

adimensional

"tamaño" de la perturbación

$$\underset{\text{conocido}}{H = H_0} + \underset{\text{Perturbación}}{W} = H_0 + \lambda \hat{W}$$

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

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \cdots = \sum_q \varepsilon_q \lambda^q$$
$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi_0\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \lambda^2|\psi_2\rangle + \cdots = \sum_q \lambda^q |\psi_q\rangle$$

degeneración

Los e-vectores de H_0 son $|\varphi_p^i\rangle$

Nos vamos a fijar en un e-estado no degenerado de H_0 y veremos cómo la perturbación lo afecta y a su e-valor.

$|\varphi_n\rangle$ e-vector no degenerado de H_0
E_n^0 e-valor de H_0 asociado a $|\varphi_n\rangle$

$$|\psi_0\rangle = |\varphi_n\rangle \quad ; \quad \varepsilon_0 = E_n^0$$

$\varepsilon_1 = \langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle$ valor esperado de $\hat{W}$ en el estado $|\varphi_n\rangle$.

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda\langle\varphi_n|\hat{W}|\varphi_n\rangle$$

Para obtener esto usamos:

$$(H_0 + \lambda\hat{W})\left[\sum_q \lambda^q |\psi_q\rangle\right] = \left[\sum_q \lambda^q \varepsilon_q\right]\left[\sum_q \lambda^q |\psi_q\rangle\right]$$

$$(H_0 + \lambda\hat{W})\left[|\psi_0\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \cdots\right] = (\varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \cdots)\left[|\psi_0\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \cdots\right]$$

Agrupando los coeficientes de λ con la misma potencia

$$\lambda^0 : \quad H_0|\psi_0\rangle = \varepsilon_0|\psi_0\rangle$$

los términos de orden cero son los e-valores y e-vectores de H_0.

$$\lambda^1 : \quad H_0|\psi_1\rangle + \hat{W}|\psi_0\rangle = \varepsilon_0|\psi_1\rangle + \varepsilon_1|\psi_0\rangle$$

$$\lambda^2 : \quad H_0|\psi_2\rangle + \hat{W}|\psi_1\rangle = \varepsilon_0|\psi_2\rangle + \varepsilon_1|\psi_1\rangle + \varepsilon_2|\psi_0\rangle$$

Usando : $(H_0 - \varepsilon_0)|\psi_1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|\psi_0\rangle = 0$

Multiplicando por $\langle\psi_0| = \langle\varphi_n|$

$$\cancelto{0}{\langle\psi_0|\underbrace{H_0}_{\varepsilon_0} - \varepsilon_0|\psi_1\rangle} + \langle\psi_0|\hat{W} - \varepsilon_1|\psi_0\rangle = 0$$

$$\varepsilon_1 = \langle\psi_0|\hat{W}|\psi_0\rangle$$

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \dots = \sum_q \varepsilon_q \lambda^q$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi_0\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \lambda^2|\psi_2\rangle + \dots = \sum_q \lambda^q|\psi_q\rangle$$

¿cómo obtener $|\psi_1\rangle$?

Hay más información en $(H_0 - \varepsilon_0)|\psi_1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|\psi_0\rangle = 0$ si la proyectamos a otras direcciones que no sean $|\varphi_n\rangle$ $(p \neq n)$

$$\langle\varphi_p^i|\underbrace{H_0}_{E_p^0} - \underbrace{\varepsilon_0}_{E_n^0}|\psi_1\rangle + \langle\varphi_p^i|\hat{W} - \varepsilon_1|\underbrace{\psi_0}_{|\varphi_n\rangle}\rangle = 0$$

$$(E_p^0 - E_n^0)\langle\varphi_p^i|\psi_1\rangle + \langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle - \varepsilon_1\cancelto{p\neq n}{\langle\varphi_p^i|\varphi_n\rangle} = 0$$

$$\underbrace{\langle\varphi_p^i|\psi_1\rangle}_{\text{componentes de } |\psi_1\rangle \text{ en la base } \{|\varphi_p^i\rangle\}} = \frac{\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle}{E_n^0 - E_p^0} \quad (p \neq n)$$

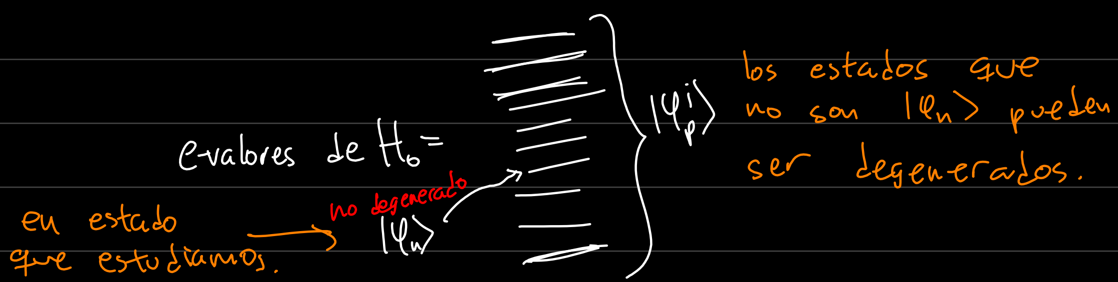
Nos falta la componente $\langle\varphi_n|\psi_1\rangle = \langle\psi_0|\psi_1\rangle$

Creamos por ahora que $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$ y luego lo probaremos

$$|\psi_1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_{i} \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle$$

Correcciones a primer orden

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi_n(\lambda)\rangle &= |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{p \neq n} \sum_{i} \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle \\ E_n(\lambda) &= E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle \end{aligned}}$$



Relaciones útiles (cuentas)

Veamos cómo es $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle$, $\langle \psi_0 | \psi_2 \rangle$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \lambda^2 |\psi_2\rangle + \dots = \sum_q \lambda^q |\psi_q\rangle$$

Pidiendo que $|\psi(\lambda)\rangle$ esté normalizado y que la fase sea tal que $\langle \psi_0 | \psi(\lambda) \rangle \in \mathbb{R}$

a orden 0)

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1$$

a orden 1)

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = \left(\langle \psi_0 | + \lambda \langle \psi_1 | \right) \left(|\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle \right)$$

$$= \cancel{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}^{1} + \lambda \left(\langle \psi_1 | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \psi_1 \rangle \right) + O(\lambda^2)$$

Como queremos $\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1$

$$\langle \psi_1 | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$$

Además

$$\langle \psi_0|\psi(\lambda)\rangle = \langle\psi_0|\psi_0\rangle + \lambda\langle\psi_0|\psi_1\rangle \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow \langle\psi_0|\psi_1\rangle\in\mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad \langle\psi_0|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\psi_0\rangle$$

$$\Rightarrow \underline{\langle\psi_0|\psi_1\rangle = 0}$$

a orden 2)

$$1=\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = \left(\langle\psi_0|+\lambda\langle\psi_1|+\lambda^2\langle\psi_2|\right)\left(|\psi_0\rangle+\lambda|\psi_1\rangle+\lambda^2|\psi_2\rangle\right)$$

$$= \langle\psi_0|\psi_0\rangle + \lambda\left(\cancelto{0}{\langle\psi_0|\psi_1\rangle+\langle\psi_1|\psi_0\rangle}\right) + \langle\psi_0|\psi_2\rangle\lambda^2$$

$$+ \langle\psi_2|\psi_0\rangle\lambda^2 + \langle\psi_1|\psi_1\rangle\lambda^2 + O(\lambda^3)$$

$$\langle\psi_0|\psi_2\rangle + \langle\psi_2|\psi_0\rangle + \langle\psi_1|\psi_1\rangle = 0$$

Usando $\langle\psi_0|\psi(\lambda)\rangle\in\mathbb{R} \Rightarrow \langle\psi_0|\psi_2\rangle\in\mathbb{R}$

$$\underline{\langle\psi_0|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_0\rangle = -\frac{1}{2}\langle\psi_1|\psi_1\rangle}$$

Correccion a 2º orden

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \dots = \sum_q \varepsilon_q\lambda^q$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi_0\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \lambda^2|\psi_2\rangle + \dots = \sum_q \lambda^q|\psi_q\rangle$$

Buscamos ε_2

Usando:

$$H_0|\psi_2\rangle + \hat{W}|\psi_1\rangle = \varepsilon_0|\psi_2\rangle + \varepsilon_1|\psi_1\rangle + \varepsilon_2|\psi_0\rangle$$

Multiplicando por $\langle\varphi_n|$

$$\cancel{\langle\varphi_n|\underset{E_n^0}{H_0} - \overset{E_n^0}{\varepsilon_0}|\psi_2\rangle} + \underbrace{\langle\varphi_n|\hat{W}-\varepsilon_1|\psi_1\rangle}_{\langle\varphi_n|\hat{W}|\psi_1\rangle - \varepsilon_1\underbrace{\langle\varphi_n|\psi_1\rangle}_{\langle\psi_0|\psi_1\rangle=0}} - \varepsilon_2\cancelto{1}{\langle\varphi_n|\overset{\varphi_n}{\psi_0}\rangle} = 0$$

$$\langle\varphi_n|\hat{W}|\psi_1\rangle = \varepsilon_2$$

$$\mathcal{E}_2 = \langle \varphi_n | \hat{W} | \underbrace{\psi_1 \rangle} = \sum_{p\neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p^i \rangle$$

conjugados

$$|\psi_1\rangle = \sum_{p\neq n} \sum_i \underbrace{\frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0}}_{\text{escalar}} \underbrace{|\varphi_p^i\rangle}_{\text{vector}}$$

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

$$\boxed{\begin{aligned} E(\lambda) &= E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p\neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} \\ &= \underbrace{E_n^0}_{\text{orden } 0} + \underbrace{\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle}_{\text{orden } 1} + \underbrace{\sum_{p\neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}}_{\text{orden } 2} \end{aligned}}$$

Discusión

1) $$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

$$W = \lambda \sigma X = \lambda \tilde{\sigma} (a + a^+)$$

$$\mathcal{E}_1 = \sigma \langle \varphi_n | a + a^+ | \varphi_n \rangle = \sigma \sqrt{n} \cancel{\langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle}^{0} + \sigma \sqrt{n+1} \cancel{\langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle}^{0}$$
$$= 0$$

Es común encontrar casos en los que $\mathcal{E}_1 = 0$ y la aproximación de segundo orden es necesaria

2) $$W = \begin{pmatrix} W_{00} & W_{01} \\ W_{10} & W_{11} \end{pmatrix}$$ W escrito en la base $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle$ $E_0^0 \quad E_1^0$

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

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$$ extrae los elementos diagonales de W

$$E_0 = E_0^0 + W_{00} \quad ; \quad E_1 = E_1^0 + W_{11}$$

$\therefore$ Si W no tiene términos en la diagonal al escribirla en la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ entonces $\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle = 0$