

Teoría de Perturbaciones

- Se aplica cuando tenemos un hamiltoniano de la forma

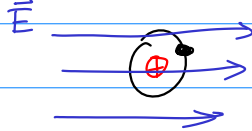
$$H = H_0 + W$$

conocemos sus e-valorés y e-vectores
perturbación "pequeña"

Ejemplo:

Átomo de hidrógeno en campo eléctrico

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{H_0} - \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{H_0} - \underbrace{e X A}_{W}$$

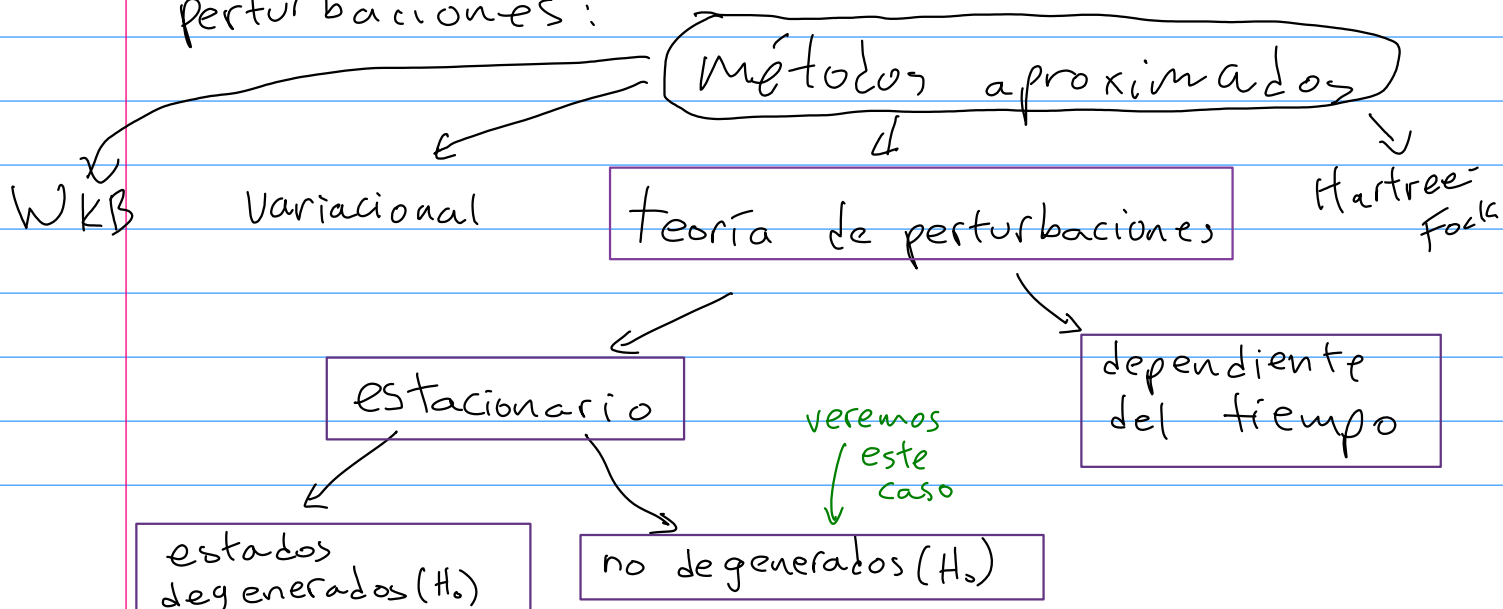


Fin de ejemplo:

Escribiremos $H = H_0 + \lambda \hat{W}$, λ adimensional y $\lambda \ll 1$

La teoría de perturbaciones consiste en escribir los e-valorés y e-vectores de H como serie de potencias de λ y quedarnos con unos cuantos términos.

- Hay varias variantes de la teoría de perturbaciones:



Teoría de perturbaciones

- Se aplica cuando

$$H = H_0 + W$$

Diagrama: H_0 y W están subrayados con líneas onduladas rojas. Una flecha azul apunta desde H_0 hacia el texto "conocido (e.v. y e.V.)". Otra flecha azul apunta desde W hacia el texto "perturbación pequeña".

$$W = \lambda \hat{W} \quad \lambda \text{ adimensional, } \lambda \ll 1$$

$$(\hat{W} \sim H_0)$$

TPE consiste en escribir e.v. y e.V. de H como serie de potencias de λ y quedarnos con unos cuantos términos.

- e.v. de H_0 conocidos (discretos) E_p^0

- e.V. de H_0 conocidos $|\varphi_p\rangle$

$$H_0 |\varphi_p\rangle = E_p^0 |\varphi_p\rangle \quad \left(\begin{array}{l} \text{Suponemos} \\ \text{no-degenerados} \end{array} \right)$$

Los $|\varphi_p\rangle$ forman una base ortonormal:

$$\langle \varphi_p | \varphi_{p'} \rangle = \delta_{pp'} \quad ; \quad \sum_p |\varphi_p\rangle \langle \varphi_p| = \mathbb{1}$$

Considerando

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

Buscamos e. V. $|\psi(\lambda)\rangle$ y e.v. $E(\lambda)$ para $H(\lambda)$.

$$H(\lambda) |\psi_p(\lambda)\rangle = E_p(\lambda) |\psi_p(\lambda)\rangle \quad (*)$$

Supongamos que podemos escribir

$$E_p(\lambda) = E_0 + \lambda E_1 + \dots + \lambda^q E_q + \dots = \sum_q E_q \lambda^q$$

$$|\psi_p(\lambda)\rangle = |\alpha_0^{(p)}\rangle + \lambda |\alpha_1^{(p)}\rangle + \dots = \sum_q \lambda^q |\alpha_q^{(p)}\rangle$$

Enchufando en (*)

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

Juntando potencias

$$0 \quad H_0 |\alpha_0^{(p)}\rangle = E_0^{(p)} |\alpha_0^{(p)}\rangle$$

$$1: \quad (H_0 - E_0^{(p)}) |\alpha_1^{(p)}\rangle + (W - E_1^{(p)}) |\alpha_0^{(p)}\rangle = 0$$

$$2: \quad (H_0 - E_0^{(p)}) |\alpha_2^{(p)}\rangle + (\hat{W} - E_1^{(p)}) |\alpha_1^{(p)}\rangle - E_2^{(p)} |\alpha_0^{(p)}\rangle = 0$$

$\vdots$

La aproximación de orden cero

$$E_0^{(p)} = E_p^0 \leftarrow \text{e-valor de } H_0$$

$\uparrow$

término de
orden cero

$$|\alpha_0^{(p)}\rangle = |\varphi_p\rangle \leftarrow \text{q-vector de } H_0$$

Primer orden:

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

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

Al tomar la eq:

$$\rightarrow (H_0 - E_0^{(p)})|\alpha_1^{(p)}\rangle + (\hat{W} - E_1^{(p)})|\alpha_0^{(p)}\rangle = 0 \quad (*)$$

$$\langle \alpha_0^{(p)} | = \langle \varphi_p | \quad \xrightarrow{E_0 - E_0} 0$$
$$\langle \alpha_0^{(p)} | H_0 - E_0 | \alpha_1^{(p)} \rangle + \langle \alpha_0^{(p)} | \hat{W} - E_1 | \alpha_0^{(p)} \rangle = 0$$
$$\langle \varphi_p | H_0 = \langle \varphi_p | E_0$$

$$E_1^{(p)} = \langle \alpha_0^{(p)} | \hat{W} | \alpha_0^{(p)} \rangle = \langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_p \rangle$$

$$\therefore E_p(\lambda) = E_p^0 + \lambda \langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_p \rangle$$
$$= E_p^0 + \langle \varphi_p | W | \varphi_p \rangle$$

La corrección a orden 1 es el valor esperado/promedio de W

Corrección a $e\bar{V}$.

En (*) proyectamos a $|\varphi_p\rangle$ pero hay más info.

podemos proyectar con otros e. $\bar{V}$ de H_0 $\{|\varphi_n\rangle\}$ (pueden ser degenerados).

$$\langle \varphi_n | (H_0 - E_0^{(p)}) | \alpha_1^{(p)} \rangle + \underbrace{\langle \varphi_n | (\hat{W} - E_1^{(p)}) | \alpha_0^{(p)} \rangle}_{(p \neq n)} = 0$$

$$(E_n^0 - E_p^0) \langle \varphi_n | \alpha_1^{(p)} \rangle + \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | \alpha_1^{(p)} \rangle = \frac{\langle \varphi_n | W | \varphi_p \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

Coeff. de $|\alpha_1^{(p)}\rangle$ en la base $\{|\varphi_n\rangle\}$

$$|\alpha_1^{(p)}\rangle = \sum_{n \neq p} \langle \varphi_n | \alpha_1^{(p)} \rangle |\varphi_n\rangle$$

para incluir $n=p$ en la suma investigamos

$$\langle \varphi_p | \alpha_1^{(p)} \rangle = \langle \alpha_0^{(p)} | \alpha_1^{(p)} \rangle$$

$$1 = \langle \Psi_p(x) | \Psi_p(x) \rangle = [\langle \alpha_0^{(p)} | + \lambda \langle \alpha_1^{(p)} |] [|\alpha_0^{(p)}\rangle + \lambda |\alpha_1^{(p)}\rangle]$$

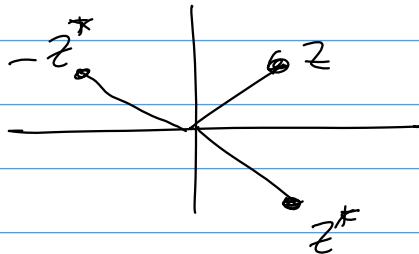
$$\approx \underbrace{\langle \alpha_0^{(p)} | \alpha_0^{(p)} \rangle}_{=1} + \lambda [\langle \alpha_0^{(p)} | \alpha_1^{(p)} \rangle + \langle \alpha_1^{(p)} | \alpha_0^{(p)} \rangle]$$

Para esto

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

$$\langle \alpha_0^{(p)} | \alpha_1^{(p)} \rangle = - \langle \alpha_1^{(p)} | \alpha_0^{(p)} \rangle$$

$$z = -z^*$$



puramente imaginario

Es ogeemos $\langle \psi_p | \psi_p(\lambda) \rangle$ real

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

$$\Rightarrow \langle \alpha_0^{(p)} | \alpha_1^{(p)} \rangle \in \mathbb{R}$$

$\Rightarrow$ Como es puramente imag:

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

$$|\alpha_1^{(p)}\rangle = \sum_n \langle \psi_n | \alpha_1^{(p)} \rangle |\psi_n\rangle$$

$$= \sum_n \frac{\langle \psi_n | W | \psi_p \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\psi_n\rangle$$