Mecánica Cuántica. Tarea 8[*†]

José Emmanuel Flores Calderón

Fecha: 28/05/2021.

1. Como probamos en clase, el teorema de proyección es un caso especial del teorema de Wigner- Eckart para cuando los estados inicial y final tienen el mismo momento angular. El teorema dice:

   (a) Dar una interpretación geométrica de este teorema en términos de una imagen vectorial (es decir, con flechitas).

   (b) Prueba el teorema usando un método complementario al usado en clase con los siguientes pasos:

      i. Muestra que $\langle\alpha'; jm'|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha; jm\rangle = \langle\alpha'; j||J||\alpha'; j\rangle\langle\alpha'; j||V||\alpha'; j\rangle$ independientemente de m.

      ii. Muestre que $|\langle\alpha'; j||J||\alpha; j\rangle|^2 = \hbar^2 j\,(j+1)$ independientemente de α.

      iii. Muestra que $\langle jm'|1qjm\rangle = \frac{\langle jm'|J_q|jm\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}$.

Solución.

(a) El teorema de proyección nos dice que todos los elementos de matriz deun operador vectorial $\overrightarrow{V}$ restringidos a un subespacio con valor propio j son proporcionales a los elementos de la matriz $\overrightarrow{J}$. Ahora bien, de manera geometrica, pensando a $\overrightarrow{J}$ como un vector en el sentido usual, tenemos que el teorema de proyección nos dice que

$$\left(\overrightarrow{V}\cdot\overrightarrow{x}_j\right)\overrightarrow{x}_j, \quad \overrightarrow{x}_j = \frac{\overrightarrow{j}}{|\overrightarrow{j}|},$$

de manera que

$$\left(\overrightarrow{V}\cdot\overrightarrow{x}_j\right)\overrightarrow{x}_j = \left(\frac{\overrightarrow{V}\cdot\overrightarrow{J}}{|\overrightarrow{j}|^2}\right)\overrightarrow{j}.$$

(b) Sabemos que

$$\langle\alpha'; jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha; jm\rangle = \sum_q (-1)^q \langle\alpha'; jm|J_qV_q|\alpha; jm\rangle,$$

$$\implies \sum_q (-1)^q \langle\alpha'; jm|J_q\mathbb{I}V_q|\alpha; jm\rangle = \sum_q (-1)^q \langle\alpha'; jm|J_q\sum_{m'}|\alpha'; jm'\rangle\langle\alpha'; jm|V_q|\alpha; jm\rangle,$$

$$\implies \langle\alpha'; jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha; jm\rangle = \sum_q\sum_{m'} (-1)^q \langle\alpha'; jm|J_q|\alpha'; jm'\rangle\langle\alpha'; jm|V_q|\alpha; jm\rangle.$$

Si ahora usamos el teorema de Wigner-Eckart, tenemos que

$$\langle\alpha'; jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha; jm\rangle = \sum_q\sum_{m'} (-1)^q \langle jm|1qjm'\rangle\langle jm'|1-qjm\rangle\langle\alpha' j\big|\big|J\big|\big|\alpha' j\rangle\langle\alpha' j\big|\big|V\big|\big|\alpha' j\rangle,$$

pero

$$\langle jm'|1-qjm\rangle = (-1)^q \langle 1qjm'|jm\rangle,$$

[*]Grupo C011 | Trimestre 21-1
[†]Profesor: Miguel Angel Bastarrachea Magnani | Ayudante: Yoshua Chávez Bolaños

de manera que

$$\langle\alpha';jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha;jm\rangle=\sum_{q}\sum_{m'}(-1)^{2q}\langle jm|1qjm'\rangle\langle 1qjm'|jm\rangle\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle\langle\alpha'j\big|\big|V\big|\big|\alpha'j\rangle,$$

$$\implies\langle\alpha';jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha;jm\rangle=\sum_{q}\sum_{m'}\langle jm|1qjm'\rangle\langle 1qjm'|jm\rangle\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle\langle\alpha'j\big|\big|V\big|\big|\alpha'j\rangle,$$

por otra parte, observemos que

$$\sum_{q}\sum_{m'}\langle jm|1qjm'\rangle\langle 1qjm'|jm\rangle=1,$$

con lo cual, tenemos que

$$\langle\alpha';jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}|\alpha;jm\rangle=\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle\langle\alpha'j\big|\big|V\big|\big|\alpha'j\rangle.$$

Ahora bien, la cantidad $\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{V}$ es un escalar, por lo tanto, su valor esperado no depende de m, esto es la regla de selección nos dice que los coeficientes de Clebsch-Gordan son independientes de m. Ahora demostremos que

$$\left|\langle\alpha';j\big|\big|J\big|\big|\alpha;j\rangle\right|^2=\hbar^2 j\left(j+1\right),\quad\forall\alpha.$$

Usemos el resultado anterior pero con las siguientes sustituciones $\overrightarrow{V}=\overrightarrow{J}$ y $\alpha'=\alpha$, de manera que

$$\langle\alpha';jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{J}|\alpha;jm\rangle=\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle,$$

pero

$$\langle\alpha';jm|\overrightarrow{J}\cdot\overrightarrow{J}|\alpha;jm\rangle=\langle\alpha';jm|\overrightarrow{J}^2|\alpha;jm\rangle=j\left(j+1\right),$$

y

$$\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle=\left|\langle\alpha'j\big|\big|J\big|\big|\alpha'j\rangle\right|^2,$$

de manera que

$$\left|\langle\alpha';j\big|\big|J\big|\big|\alpha;j\rangle\right|^2=\hbar^2 j\left(j+1\right),\quad\forall\alpha,$$

es decir, la cantidad anterior es independiente de α. Ahora demostremos que

$$\langle jm'|1qjm\rangle=\frac{\langle jm'|J_q|1qjm\rangle}{\hbar\sqrt{j\left(j+1\right)}}.$$

Por el teorema de Wigner-Eckart, tenemos que

$$\langle jm'|J_q|jm\rangle=\langle j\big|\big|J_q\big|\big|j\rangle\langle jm'|1qjm\rangle,$$

de manera que

$$\langle jm'|1qjm\rangle=\frac{\langle jm'|J_q|jm\rangle}{\langle j||J_q||j\rangle},$$

pero recordemos que

$$\langle j\big|\big|J_q\big|\big|j\rangle=\sqrt{j\left(j+1\right)},$$

entonces

$$\langle jm'|1qjm\rangle=\frac{\langle jm'|J_q|jm\rangle}{\sqrt{j\left(j+1\right)}}.$$

Si ahora reunimos todos los lemas anteriores, tenemos que

$$\langle\alpha'jm'|V_q|\alpha jm\rangle=\langle\alpha'j\big|\big|V\big|\big|\alpha j\rangle\langle jm'|1qjm\rangle,$$

$$\langle \alpha' j \big\| V \big\| \alpha j \rangle = \frac{\langle \alpha' j | \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{V} | \alpha j \rangle}{\langle j \| J \| j \rangle},$$

$$\langle jm' | 1qjm \rangle = \frac{\langle \alpha' jm' | J_q | \alpha jm \rangle}{\langle j \| J \| j \rangle},$$

por lo tanto

$$\langle \alpha' jm' | V_q | \alpha jm \rangle = \frac{\langle \alpha' j | \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{V} | \alpha j \rangle}{\langle j \| J \| j \rangle} \frac{\langle \alpha' jm' | J_q | \alpha jm \rangle}{\langle j \| J \| j \rangle} = \frac{\langle \alpha' j | \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{V} | \alpha j \rangle}{j\,(j+1)} \langle \alpha' jm' | J_q | \alpha jm \rangle,$$

$$\implies \langle \alpha' jm' | V_q | \alpha jm \rangle = \frac{\langle \alpha' j | \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{V} | \alpha j \rangle}{j\,(j+1)} \langle \alpha' jm' | J_q | \alpha jm \rangle, \quad \forall q,$$

por lo tanto

$$\langle \alpha' jm' | \overrightarrow{V} | \alpha jm \rangle = \frac{\langle \alpha' j | \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{V} | \alpha j \rangle}{j\,(j+1)} \langle \alpha' jm' | \overrightarrow{J} | \alpha jm \rangle,$$

justo como se queria demostrar.

2. Considera el problema de dos estados

   (a) Aplicar la teoría de perturbaciones independiente del tiempo para el caso no degenerado para mostrar que la corrección a la energía a segundo orden coincide con el resultado obtenido de aproximar la solución exacta al orden más bajo que consideremos en clase.
   (b) Aplicar la teoría de perturbaciones a primer orden para encontrar los eigenestados del problema perturbado. Encontrar también los eigenestados del problema exacto y comparar los resultados.

   Solución.

3. Un oscilador armónico unidimensional está sujeto a una perturbación

$$\lambda H_1 = bx,$$

   donde b es una constante real.

   (a) Calcula el corrimiento de energía del estado base al orden más bajo que sea distinto de cero.
   (b) Resuelve el problema exactamente y compara con tu resultado obtenido en (a).

   Solución.

   (a) La teoría de perturbaciones trata con hamiltonianos de la forma

$$H = H_0 + H_1,$$

   donde H_0 es el Hamiltoniano de un problema conocido y que se puede resolver de manera exacta, mientras que H_1 es un término extra. Es importante decir que no se puede resolver de manera exacta el problema

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

   razon por la cual suponemos que podemos «modular» el tamaño del Hamiltoniano H_1, de la forma

$$H_1 = \lambda V, \quad \lambda \in [0,1].$$

   En este caso, el Hamiltoniano sin perturar esta dado por

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2,$$

cuyas soluciones son conocidas. Mientras que la perturbación esta dada por

$$H_1 = \lambda V = bx,$$

donde consideramos a $\lambda = b$ y $V = x$. Por otra parte, la teoría de perturbaciones nos dice que el corrimiento de energía esta dado por

$$\Delta E_n = bV_{nn} + b^2 \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots,$$

donde $V_{nk} = \langle n^{(0)}|V|k^{(0)}\rangle$.En nuestro caso queremos saber el corrimiento de energía del estado base, de manera que se tiene

$$\Delta E_0 = bV_{00} + b^2 \sum_{k \neq 0} \frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots.$$

A primer orden tenemos que el corrimiento esta dado por

$$\Delta E_0 = \lambda V_{00}, \text{ donde } V_{00} = \langle 0^{(0)}|x|0^{(0)}\rangle,$$

pero en general, se cumple que

$$\langle 0|x|x'\rangle = 0, \quad \forall x'.$$

De manera que el corrimiento de energía a primer orden es cero. Ahora consideremos el corrimiento de energía a segundo orden en λ, el cual esta dado por

$$\Delta E_0^{(2)} = b^2 \sum_{k \neq 0} \frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = b^2 \sum_{k \neq 0} \frac{\left|\langle 0^{(0)}|x|k^{(0)}\rangle\right|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

Pero sabemos que para este problema, de manera general, se cumple que

$$\langle n^{(0)}|x|k^{(0)}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{k}\delta_{n,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{n,k+1}\right).$$

Por lo tanto, tenemos que

$$\langle 0^{(0)}|x|k^{(0)}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{k}\delta_{0,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{0,k+1}\right),$$

pero $k \in \mathbb{N}$, de manera que $\delta_{0,k+1} = 0$. Por lo tanto, tenemos que

$$\langle 0^{(0)}|x|k^{(0)}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{k}\delta_{0,k-1},$$

con lo cual, el efecto de la δ es hacer que $k = 1$, entonces

$$\Delta E_0^{(2)} = b^2 \sum_{k \neq 0} \frac{\left|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{k}\delta_{0,k-1}\right|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = b^2 \frac{\left|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}},$$

$$\implies \Delta 0 = b^2 \frac{\frac{\hbar}{2m\omega}}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

Recordemos que las eigenenergias del problema sin perturbar están dadas por

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

de manera que

$$E_0^{(0)} - E_k^{(0)} = \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = -\hbar\omega,$$

por lo tanto

$$\Delta E_0^{(2)} = b^2 \frac{\frac{\hbar}{2m\omega}}{-\hbar\omega} = \frac{-b^2}{2m\omega^2}.$$

Por lo tanto, el corrimiento de energía a segundo orden esta dado por

$$E = E_0^{(0)} + \Delta E_0^{(2)} = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{-b^2}{2m\omega^2}$$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{-b^2}{2m\omega^2}$$

(b) Por otra parte, si intentamos resolver el problema exactamente, tenemos que

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + bx = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + \frac{2b}{m\omega^2}x\right),$$

pero

$$\left(x^2 + \frac{2b}{m\omega^2}x\right) = \left(x + \frac{b}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{b^2}{m^2\omega^4}.$$

Si ahora definimos

$$\bar{x} = x + \frac{b}{m\omega^2},$$

tenemos que el Hamiltoniano se transforma de la forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\bar{x}^2 + \alpha$$

donde

$$\alpha = -\frac{b^2}{m^2\omega^4}.$$

De manera que tenemos el Hamiltoniano original trasladado en α unidades de energía, justo como en el caso anterior.

4. Considera el problema de un oscilador armónico con una perturbación cúbica λx^3. Encuentra explícitamente la corrección a la energía a segundo orden y la corrección a la función de onda del estado n, en teoría de perturbaciones. .

Solución.

Para este problema, tenemos que

$$H = H_0 + H_1,$$

donde

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \& \quad H_1 = \lambda x^3$$

Siguiendo el espiritu del problema anterior, tenemos que la corrrección de energía a segundo orden esta dado por

$$\Delta E_n^{(2)} = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{n\neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

donde, en este caso

$$V_{nn} = \langle n^{(0)}|x^3|n^{(0)}\rangle \quad \& \quad V_{nk} = \langle n^{(0)}|x^3|k^{(0)}\rangle.$$

Ahora bien, recordemos que podemos escribir al operador de posición en términos de los operaciones de aniquilación y de creación de la siguiente manera

$$x=\beta\left(a+a^{\dagger}\right);\quad \beta=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

donde a y $a^{\dagger}$ cumplen con

$$a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle\quad \&\quad a^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

de manera que

$$\left(\frac{x}{\beta}\right)^{3}=\left(a+a^{\dagger}\right)^{3}=a^{3}+a^{2}a^{\dagger}+aa^{\dagger}a+a\left(a^{\dagger}\right)^{2}+a^{\dagger}a^{2}+a^{\dagger}aa^{\dagger}+\left(a^{\dagger}\right)^{2}a+\left(a^{\dagger}\right)^{3}. \tag{0.1}$$

De la ecuación anterior, se sigue que

$$V_{nn}=0,$$

ya que al ser el operador x elevado a una potencia impar no hay ningun termino en la ecuación (0.1) que cancele el efecto de los operadores de aniquilación y de creación, esto es, que el resultado sea el mismo ket $|n\rangle$ salvo una constante. El argumento anterior junto con las relaciones de ortogonalidad de los kets $|n\rangle$ completa el esbozo de la demostración. Por otra parte, para el termino

$$V_{nk}=\langle n^{(0)}|x^{3}|k^{(0)}\rangle,$$

tenemos que efectuar el comportamiento de la ecuación (0.1) sobre el ket $|k^{(0)}\rangle$. De manera que tenemos las siguientes relaciones

$$a^{3}|k^{(0)}\rangle=\sqrt{k\,(k-1)\,(k-2)}|k-3^{(0)}\rangle,$$

$$a^{2}a^{\dagger}|k^{(0)}\rangle=\sqrt{(k+1)\,(k+1)\,k}|k-1^{(0)}\rangle,$$

$$aa^{\dagger}a|k^{(0)}\rangle=\sqrt{k^{3}}|k-1^{(0)}\rangle,$$

$$a\left(a^{\dagger}\right)^{2}|k^{(0)}\rangle=\sqrt{(k+1)\,(k+2)^{2}}|k+1^{(0)}\rangle,$$

$$a^{\dagger}a^{2}|k^{(0)}\rangle=\sqrt{k\,(k-2)^{2}}|k-1^{(0)}\rangle,$$

$$a^{\dagger}aa^{\dagger}|k^{(0)}\rangle=\sqrt{(k+1)^{3}}|k+1^{(0)}\rangle,$$

$$\left(a^{\dagger}\right)^{2}a|k^{(0)}\rangle=\sqrt{k^{2}\,(k+1)}|k+1^{(0)}\rangle,$$

$$\left(a^{\dagger}\right)^{3}|k^{(0)}\rangle=\sqrt{(k+1)\,(k+2)\,(k+3)}|k+3^{(0)}\rangle.$$

De manera que

$$\left(\frac{x}{\beta}\right)^{3}=\sqrt{k\,(k-1)\,(k-2)}|k-3^{(0)}\rangle+\left(\sqrt{(k+1)\,(k+1)\,k}+\sqrt{k^{3}}+\sqrt{k\,(k-2)^{2}}\right)|k-1^{(0)}\rangle$$
$$+\left(\sqrt{(k+1)\,(k+2)^{2}}+\sqrt{(k+1)^{3}}+\sqrt{k^{2}\,(k+1)}\right)|k+1^{(0)}\rangle+\sqrt{(k+1)\,(k+2)\,(k+3)}|k+3^{(0)}\rangle.$$

Ahora bien, el producto $\langle n^{(0)}|x^{3}|k^{(0)}\rangle$ involucra que calculemos el producto interno de $\langle n^{(0)}|$ con $|k-3^{(0)}\rangle$, $|k-1^{(0)}\rangle$, $|k+1^{(0)}\rangle$ y $|k+3^{(0)}\rangle$. Pero para esos productos, al usar las relaciones de ortonalidad de los kets sin perturbar tenemos

$$\langle n^{(0)}|k-3^{(0)}\rangle=\delta_{n,k-3}\;,\;\langle n^{(0)}|k+3^{(0)}\rangle=\delta_{n,k+3},$$

$$\langle n^{(0)}|k-1^{(0)}\rangle=\delta_{n,k-1}\;,\;\langle n^{(0)}|k+1^{(0)}\rangle=\delta_{n,k+1}.$$

Por lo tanto

$$V_{nk}=\beta\left(\gamma_{k+3}\delta_{n,k+3}+\gamma_{k+1}\delta_{n,k+1}+\gamma_{k-1}\delta_{n,k-1}+\gamma_{k-3}\delta_{n,k-3}\right),$$

donde

$$\gamma_{k+3} = \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}, \tag{0.2}$$

$$\gamma_{k+1} = \sqrt{(k+1)(k+2)^2} + \sqrt{(k+1)^3} + \sqrt{k^2(k+1)}, \tag{0.3}$$

$$\gamma_{k-1} = \sqrt{(k+1)(k+1)k} + \sqrt{k^3} + \sqrt{k(k-2)^2}, \tag{0.4}$$

$$\gamma_{k-3} = \sqrt{k(k-1)(k-2)} \tag{0.5}$$

De manera que el corrimiento de energía a orden 2 esta dado por

$$\Delta E_n^{(2)} = +\lambda^2 \sum_{n\neq k} \frac{\beta^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(\gamma_{k+3}\delta_{n,k+3} + \gamma_{k+1}\delta_{n,k+1} + \gamma_{k-1}\delta_{n,k-1} + \gamma_{k-3}\delta_{n,k-3}\right)^2.$$

Ahora bien, para los kets, se tiene

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \lambda^2 \left(\sum_{k\neq n}\sum_{l\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kl}V_{nl}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)} - \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{nn}V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)^2} \right),$$

y nuevamente, por el uno de los argumentos anteriores, tenemos que $V_{nn} = 0$, de modo que

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \lambda^2 \sum_{k\neq n}\sum_{l\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kl}V_{nl}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)},$$

donde

$$V_{kn} = \beta\left(\gamma_{k+3}\delta_{n,k+3} + \gamma_{k+1}\delta_{n,k+1} + \gamma_{k-1}\delta_{n,k-1} + \gamma_{k-3}\delta_{n,k-3}\right),$$
$$V_{kl} = \beta\left(\gamma_{k+3}\delta_{l,k+3} + \gamma_{k+1}\delta_{l,k+1} + \gamma_{k-1}\delta_{l,k-1} + \gamma_{k-3}\delta_{l,k-3}\right),$$
$$V_{nl} = \beta\left(\gamma_{n+3}\delta_{l,n+3} + \gamma_{n+1}\delta_{l,n+1} + \gamma_{n-1}\delta_{l,n-1} + \gamma_{n-3}\delta_{l,n-3}\right).$$

En donde el subíndice k, n en los coeficientes γ denota la variable respecto a la cual toman valores las raíces dadas en (0.2), (0.3), (0.4) y (0.5).

5. Considera una partícula sin espín en un pozo cuadrado bidimensional infinito.

$$V = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a \\ \infty & \text{de otra manera} \end{cases}$$

   (a) ¿Cuál son las eigenenergías para los tres estados más bajos? Hay alguna degeneración?
   (b) Ahora añadimos el potencial

$$V_1 = \lambda xy, \;\; 0 \leq x \leq a \;\; \& \;\; 0 \leq y \leq a.$$

   (c) Tomando esto como una perturbación responde lo siguiente
      - ¿Es el corrimiento de energía debido a la perturbación linear o a la cuadrática en λ para cada uno de los tres estados?
      - Obtiene expresiones para los corrimientos de energa de los tres niveles de energa ms bajos precisamente a orden λ. (No tienes que evaluar las integrales que puedan aparecer).
      - Dibuja un diagrama de energía con y sin perturbación para los tres eigenestados de energía. Asegúrate de especificar cuáles eigenestados no perturbados están conectados con cuáles eigenestados perturbados.

Solución.

(a) Para este problema, sabemos que la ecuación de Schrödinger es separable y además se reduce al caso de una partícula en un pozo unidimensional para cada una de las coordenadas, en este caso x y y. Para ambos problemas unidimensionales, sabemos que las eigenfunciones están dadas por

$$\psi_x(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \quad \& \quad \psi_y(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right),$$

de modo que la solución al problema completo esta dada por

$$\psi_{n_x,n_y} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi x}{a}\right),$$

con las eigenenergías dadas por

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right),$$

y como se puede observar, las energías, en general están degeneradas. Ahora bien, para los tres estados más bajos, tenemos que

$$n_x = n_y = 1,$$
$$n_x = 1, n_y = 1, \quad \text{ó} \quad n_x = 2, n_y = 1,$$
$$n_x = n_y = 2,$$

y como podemos ver, para solamente para el segundo estado hay degeneración, la cual es doble. Ahora escribamos las funciones de onda correspondientes a cada uno de tales estados

$$\psi_{1,1} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right), \quad \& \quad E_{1,1} = 2\left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right),$$

$$\psi_{1,2} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right), \quad \& \quad E_{1,2} = 5\left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right),$$

$$\psi_{2,1} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right), \quad \& \quad E_{2,1} = 5\left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right),$$

$$\psi_{2,1} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right), \quad \& \quad E_{2,2} = 8\left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right).$$

Para los corrimientos de energía, tenemos que , para el primer y tercer nivel

$$\Delta_1^{(1)} = \lambda \left[\frac{2}{a} \int_0^{2a} du \sin^2\left(\frac{\pi u}{a}\right) u\right]^2,$$

$$\Delta_3^{(1)} = \lambda \left[\frac{2}{a} \int_0^{2a} du \sin^2\left(\frac{2\pi u}{a}\right) u\right]^2.$$

Vemos que ambas integrales tienen la misma forma, y si las resolvemos tenemos que

$$\left[\frac{2}{a} \int_0^{2a} du \sin^2\left(\frac{\pi u}{a}\right) u\right]^2 = \left[\frac{2}{a} \int_0^{2a} du \sin^2\left(\frac{2\pi u}{a}\right) u\right]^2 = \frac{1}{4} a^2,$$

de manera que

$$\Delta_1^{(1)} = 0.25 \lambda a^2 \quad \& \quad \Delta_3^{(1)} = 0.25 \lambda a^2.$$

Mientras que para el segundo nivel de energía como es 2-degenerado, tenemos que construir una matriz de 2×2 y diagonalizar. Los elementos de la diagonal están dados por

$$V_{aa} = \int_0^a dx dy \psi_{1a}^{(0)} V \psi_{1a}^{(0)},$$

mientras que los elementos fuera de la diagonal son

$$V_{ab} = V_{ba} = \int_0^a dxdy \psi_{1a}^{(0)} V \psi_{1b}^{(0)}.$$

Con lo cual tenemos que

$$V_{1,1} = \int_0^a dxdy \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \lambda xy \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) = \frac{4}{a^2}\lambda \int_0^a dxdy \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right) xy,$$

$$\implies V_{1,1} = V_{2,2} = \frac{4}{a^2}\lambda \left[\int_0^a \int_0^a dxdy \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right) xy\right] = \frac{1}{4}\lambda a^2,$$

junto con

$$V_{1,2} = V_{2,1} = \int_0^a \int_0^a dxdy \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \lambda xy \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right),$$

$$V_{1,2} = V_{2,1} = \frac{4}{a^2}\lambda \int_0^a \int_0^a dxdy \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) xy,$$

$$V_{1,2} = V_{2,1} = \frac{128}{81}\frac{\lambda a^2}{\pi^4}.$$

De manera que la matriz queda como

$$V = \frac{\lambda a^2}{4\pi^4}\begin{pmatrix} \pi^4 & \frac{1024}{81} \\ \frac{1024}{81} & \pi^4 \end{pmatrix}.$$

Si ahora diagonalizamos la matriz anterior, obtenemos que el corrimiento de energía para el seguno estado viene dado por

$$\Delta_2^{(1)} = \lambda a^2 \left(\frac{1}{4} \pm \frac{128}{81\pi^4}\right).$$