

Problemas

Teoría de Perturbaciones I. Casos no-degenerados [§]

1. Un sistema descrito por el Hamiltoniano \hat{H} tiene sólo 2 estados, y se encuentra en el estado

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 \quad c_1, c_2 \in \mathcal{R}$$

- (a) Encontrar la energía exacta de los niveles en términos de los elementos matriz de \hat{H}
- (b) Suponer que $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$, donde $\hat{H}^{(0)}\phi_n = E_n^{(0)}\phi_n$. Encontrar la energía de los niveles en primera aproximación y comparar con el resultado exacto. ¿Qué condiciones se deben cumplir para que ambos resultados coincidan?

2. **Perturbaciones de pozo de potencial infinito** Para los siguientes problemas consideramos un pozo de potencial infinito de ancho a . Recordamos que la solución de este problema es

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{a^2}$$

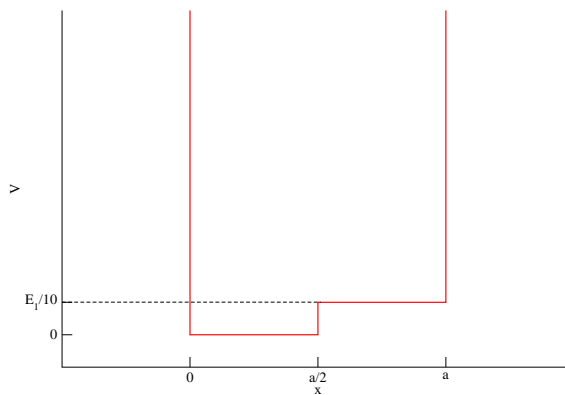
$$\varphi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)$$

- (a) A un electrón en el pozo se le aplica un campo eléctrico ϵ en la dirección \hat{x}
- i. ¿Qué condición debe cumplir el campo eléctrico para poder utilizar teoría de perturbaciones?
 - ii. Calcular la energía mínima que puede tener el electrón
 - iii. Calcular el primer término en la corrección de la función de onda del nivel fundamental, dada por el primer orden de perturbación

La solución de este problema se puede encontrar en

- T.C. Dymski, Am. J. Phys. **36**, 54 (1968)
- J.N. Churchill and I.O. Arntz, Am. J. Phys. **37**, 693 (1969)

- (b) Al potencial del pozo infinito se le aplica la siguiente perturbación



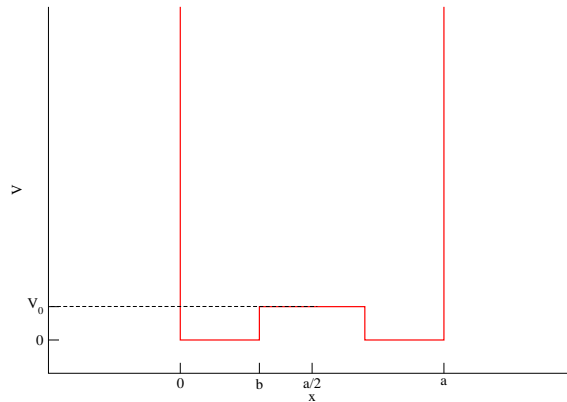
[§]<http://www.df.uba.ar/users/dmitnik/teoricaII/perturbacionesI>

- i. Usar primer orden de teoría de perturbaciones para encontrar la corrección que habría que agregarle al potencial de pozo infinito de manera de obtener aproximadamente las energías del problema
- ii. ¿Cómo cambia el espectro de energías de transiciones con la perturbación?
- iii. Escribir los primeros 3 términos (no nulos) en la expansión del estado fundamental en términos de las funciones no perturbadas
- iv. Calcular la corrección de energía en segundo orden

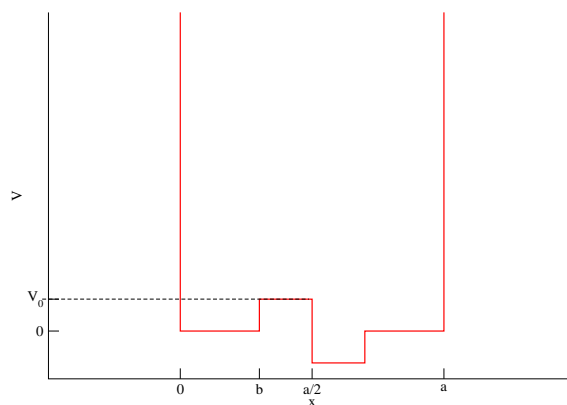
La solución exacta de este problema se encuentra en

- L. Melander, J. Chem. Ed. **49**, 686 (1972)

- (c) Al potencial del pozo infinito se le aplica la siguiente perturbación



- i. ¿Qué condiciones se deben cumplir para poder utilizar teoría de perturbación en primer orden?
 - ii. Calcular las energías en primer orden
 - iii. Comparar la corrección de las energías de los niveles pares con la de los niveles impares. Explicar las diferencias
- (d) Repetir la pregunta anterior, pero con el potencial



- (e) Calcular la corrección en primer orden en las energías de los niveles pares, cuando se introduce una perturbación

$$V' = \alpha \delta(x - \frac{a}{2})$$

3. Mostrar que los elementos de matriz de la perturbación cumplen con

$$\sum_m |H'_{nm}|^2 = (H'^2)_{nn}$$

4. Perturbaciones del átomo de hidrógeno

- (a) Calcular en primer orden la corrección a la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno, si se le aplica un campo eléctrico ϵ en \hat{z}
- (b) Calcular para qué estados la corrección a segundo orden no es nula
- (c) El coeficiente de “polarizabilidad estática” α , se define como el coeficiente por el cual la energía del estado fundamental decrece en $\frac{\alpha \epsilon^2}{2}$. Demostrar que

$$\alpha < \frac{16}{3} a_0^3$$

(un valor mas correcto es $\alpha_{max} = \frac{9}{2} a_0^3$)

5. Perturbaciones del oscilador armónico

- (a) Se somete un oscilador armónico unidimensional a una perturbación cuártica ($V' = ax^4$). Encontrar la corrección a primer orden de las energías y encontrar el primer término (no nulo) a la corrección de las funciones onda.
- (b) Encontrar las energías en primer y segundo orden para una perturbación cúbica ($V' = ax^3$)
- (c) Calcular la corrección en segundo orden de las energías del oscilador armónico, si se le aplica un campo eléctrico ϵ . Comparar los resultados con los valores exactos.

6. Dada la matriz

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & c & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2c \end{pmatrix}$$

construida usando una base ortonormal $\{\phi_i\}$

- (a) Calcular las energías hasta el 1^{er} orden de perturbación
- (b) Calcular la corrección de las energías dadas por el 2^{do} orden en teoría de perturbación
- (c) Calcular la corrección de las funciones de onda en 1^{er} orden
- (d) Calcular la corrección de las funciones de onda en 2^{do} orden
- (e) Calcular las energías exactas y comparar con los resultados perturbativos.

7. Corrección relativista al átomo de hidrógeno

Calcular el primer orden de la corrección relativista de la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno. Expresar el resultado en términos relativos (o sea, comparar la corrección con la energía no relativista).

Ayuda: La ecuación relativista para la energía es $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. Se expande el Hamiltoniano suponiendo que $p \ll m_0c$, y luego se aplica primer orden de perturbación.

8. Calcular la corrección relativista en primer orden, para la energía del estado fundamental del oscilador armónico. Con este resultado, mostrar que la corrección relativista al espectro vibracional de la molécula H_2 es del orden de 10^{-8} .