

En la deducción que vamos a seguir del Hamiltoniano de la estructura fina, en cierto punto vamos a utilizar un poco de teoría de la perturbación y ese es el tema de esta hoja. También la utilizaremos para el cómputo de las correcciones relativistas de los niveles de energía. Me dijiste que no conocías nada al respecto por tanto esta hoja tiene una parte importante que consiste en leer. La fuente que he seleccionado para varios ejercicios es [3] porque, a mi juicio, es muy clara.

1) Considera la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & -3 \end{pmatrix}$$

y halla sus autovalores y autovectores. Para unificar el resultado, elige los autovectores normalizados y con primera coordenada positiva

La idea es que, en la mayor parte de las situaciones, si modificamos poco los elementos de una matriz entonces los autovalores y autovectores también cambiarán poco. La teoría de la perturbación nos dice cómo aproximar este cambio. En análisis matemático el análogo son los polinomios de Taylor. Dada una función f con cierta regularidad en un entorno de cero, sabemos que $f(\epsilon)$ se parece mucho a $f(0) + f'(0)\epsilon$ y más todavía a $f(0) + f'(0)\epsilon + \frac{1}{2}f''(0)\epsilon^2$.

2) Considera la siguiente perturbación de la matriz anterior:

$$\begin{pmatrix} 3 - \epsilon & 4 + 2\epsilon \\ 4 + 2\epsilon & -3 + \epsilon \end{pmatrix}$$

con ϵ pequeño. Halla el polinomio de Taylor de orden 2 de los autovalores de manera que para $\epsilon = 0$ se obtenga el resultado del ejercicio anterior. Para $\epsilon = 1/10$, comprueba cuál es el error al aproximar los autovalores verdadero por su desarrollo de orden 2.

Piensa que si en el ejercicio anterior te hubiera pedido algo similar con los autovectores, aunque fuera hasta orden 1, las cuentas serían bastante feas.

La teoría de la perturbación esencialmente reproduce la aproximación de Taylor, y daría lo mismo que has obtenido incluso añadiendo estimaciones de los autovectores. En su aplicación a la mecánica cuántica se trabaja con Hamiltonianos que son típicamente operadores entre espacios de funciones de dimensión infinita, por ello el formalismo de matrices no es adecuado en general ni tampoco pensar en desarrollos de Taylor de objetos que obtenemos con sistemas y determinantes. Por otro lado, los operadores de la mecánica cuántica son autoadjuntos (o más propiamente simétricos) y eso da mucha ventaja para desarrollar la teoría por la ortogonalidad de los autoestados. En el contexto cuántico no tendría sentido que en el ejemplo anterior hubiéramos perturbado el a_{12} con un $+2\epsilon$ y el a_{21} con un $+3\epsilon$, aunque eso sea indiferente a la hora de hacer Taylor.

3) Lee el capítulo 1 de [3] hasta la página 9 incluida.

Supongo que la notación *bra-ket* te es familiar. Si no es así, pregunta o busca una referencia. Desde el punto de vista del álgebra lineal, $|\vec{v}\rangle$ es \vec{v} , $\langle\vec{v}|\vec{w}\rangle$ es el producto escalar de \vec{v} y \vec{w} , y $\langle\vec{v}|A|\vec{w}\rangle$ el de \vec{v} y $A\vec{w}$.

4) Aplica la segunda de las fórmulas de (1.1.37) para obtener la misma aproximación de orden 2 que conseguiste con Taylor para los autovalores de la matriz perturbada. Nota que

$$H^{(0)} = A, \quad \delta H = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad y \quad \lambda = \epsilon.$$

Asegúrate de que entiendes de dónde sale esto.

5) Con la primera fórmula de (1.1.37) obtén una aproximación de orden 1 de los autovectores de la matriz perturbada. Utiliza algún programa que los calcule numéricamente, por ejemplo `matlab`¹ y comprueba el error en la aproximación para $\epsilon = 1/100$.

Ahora vamos a ver una aplicación física a una perturbación del oscilador armónico cuántico. Supongo que tienes algún contacto previo con este. En otro caso se te puede hacer difícil el siguiente ejercicio. El oscilador armónico corresponde al Hamiltoniano $H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ donde m y ω son constantes (la masa y la frecuencia angular). Te recuerdo aquí las definiciones y propiedades de los *ladder operators* (*operadores escalera* en español, según la Wikipedia) que se usan para resolver el caso cuántico. Los operadores de *destrucción* y *creación*

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right) \quad y \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right)$$

cumplen

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

donde $|n\rangle$ con $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ son los autoestados (las autofunciones de H). En (1.1.53) están sus energías y cómo se obtienen a partir del estado fundamental $|0\rangle$ que, por cierto, viene dado por $\psi(x) = (C/\pi)^{1/4} e^{-Cx^2/2}$ con $C = m\omega/\hbar$, aunque esto es indiferente para lo que tienes que hacer. Nota que $|0\rangle$ está bastante concentrado en $|x| < C^{-1/2}$, por eso $d = C^{-1/2}$ es una escala de longitud natural.

Las perturbaciones más plausibles físicamente del oscilador armónico consisten en cambiar x^2 por una función par que se le parezca, por eso, pensando en la aproximación de Taylor, añadir un pequeño término cuártico es bastante representativo de estas situaciones plausibles.

6) Lee §1.1.2 de [3] hasta (1.1.56) justificando de dónde sale (1.1.55) a partir de las propiedades anteriores de a y a^\dagger .

¹Recuerda que con `[b,1a] = eig(A)` en `matlab` obtenemos una matriz `b` cuyas columnas son los autovectores normalizados de `A`. Cámbialos de signo si no cumplieran nuestra hipótesis de primera coordenada positiva.

El resto de §1.1.2 es el estudio para segundo orden. Si quieres dale un vistazo pero no te recomiendo que lo reflejes en tu trabajo.

Fíjate que desde el punto de vista matemático, las líneas que has leído permiten estimar el menor E tal que la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\left(1 + 2\epsilon\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)\psi - E\psi = 0$$

tiene solución no trivial $\psi = \psi(x)$ que tiende a cero suficientemente rápido cuando $x \rightarrow \pm\infty$ donde m , ω y \hbar son constantes y ϵ es un número real pequeño. Un problema así haría temblar a la mayor parte de los matemáticos.

7) Explica de dónde sale esta traducción. Céntrate en la ecuación diferencial, no en la condición $\psi(\infty) = 0$.

Vamos a ver ahora un bello ejemplo mostrando cómo se modifica la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno debido a que el protón no es puntual. Con algunos cambios, esto tiene un reflejo en los experimentos² salvo un pequeño desacuerdo que constituye un misterio de la física y parece que se entiende mejor recientemente. Es el tipo de aplicaciones con el que muchos matemáticos se rasgarían las vestiduras: la perturbación (supuestamente pequeña) involucra una función que en el origen vale infinito. Aparte de que sea un ejemplo bonito, es simple y tiene la esencia de lo que haremos más adelante en nuestra aplicación de la teoría de la perturbación al deducir el Hamiltoniano de la estructura fina.

En primer lugar, debes recordar que el estado fundamental del átomo de hidrógeno corresponde a la solución $\psi(r) = (\pi r_0^3)^{-1/2} e^{-r/r_0}$ de la ecuación (2) de la primera hoja donde, aproximadamente, $r_0 = 5,29 \cdot 10^{-11} m$ (el llamado *radio de Bohr*) y $E = -2,18 \cdot 10^{-18} J$. El siguiente ejercicio es pura rutina, solo para que te sitúes, realmente ya lo tienes hecho.

8) Comprueba que ψ está normalizada, esto es, $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 = 1$.

El protón tiene, en algún sentido, un pequeñísimo radio R . Desde el punto de vista clásico esto da igual porque el electrón orbita alrededor pero desde el punto de vista cuántico, el electrón está “en todas partes” con lo cual a veces estará dentro del protón donde el campo eléctrico no responde a la ley de Coulomb en la forma $-Ke^2/r$. Utilizando, la ley de Gauss, se deduce (si no sabes cómo se hace, dalo por supuesto) que la energía potencial debida a una esfera sólida homogénea de radio R con carga e , sobre otra carga e , es:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{1}{2}Ke^2(3R^2 - r^2)/R^3 & \text{si } r \leq R, \\ -Ke^2/r & \text{si } r \geq R. \end{cases}$$

²Si tienes curiosidad, en los experimentos se cambia el electrón por un muon, que es un electrón más “gordo”, con masa unas 200 veces mayor. Para el misterio del desacuerdo teoría y experimento, mira, si quieres, [2].

Nota que solo cambia dentro del protón.

Reemplazar $-Ke^2/r$ por $V(r)$ parece peligroso matemáticamente porque cerca del origen la primera función vale infinito y la segunda no pero físicamente parece claro que un cambio en una región muy pequeña no puede tener grandes efectos porque la probabilidad de que el electrón sea detectado allí es muy pequeña. Así que seguimos adelante confiando en que estamos dentro del rango de aplicación de la teoría de la perturbación.

9) Aplica la teoría de la perturbación, de orden uno, para estudiar cómo cambia E cuando $-Ke^2/r$ se sustituye por $V(r)$. Deja el resultado indicado como una integral de una variable.

La integral anterior se puede calcular exactamente pero no merece la pena hacerlo al nivel de aproximación con el que trabajamos porque daría una fórmula innecesariamente complicada con la que no ganaríamos precisión. En su lugar, vamos a utilizar que como R es muchísimo menor que r_0 , se debe tener

$$\int_{B(0,R)} g|\psi|^2 \approx |\psi(0)|^2 \int_{B(0,R)} g.$$

10) Aproxima con esto tu resultado de manera que quede una fórmula sencilla. Recordando que $E = -Ke^2/(2r_0)$, muestra que, de acuerdo con la teoría de la perturbación, la energía del estado fundamental pasa de E a $E - \frac{4}{5}E(R/r_0)^2$.

En principio $(R/r_0)^2$ es tan sumamente pequeño que el incremento no es detectable directamente con experimentos sin cambiar el electrón por otra partícula que disminuya r_0 , como se indica en la nota a pie de página anterior.

Desafortunadamente, la teoría que has leído no funciona tal como está cuando hay autovalores múltiples, llamados degenerados, y esa es justo la situación que tenemos en el átomo de hidrógeno más allá del estado fundamental. Cada energía corresponde a un mismo n pero a varios valores de los otros números cuánticos l y m (y del espín, si se tiene en cuenta). Es necesario, entonces, desarrollar una *teoría de la perturbación degenerada*.

11) Lee el ejemplo “de juguete” de §1.2.1 en [3], asegurándote de que entiendes bien que hay un problema.

Esencialmente toda la teoría se resume en que hay que escoger una base del autoespacio que diagonalice al mismo tiempo el Hamiltoniano y su perturbación. Técnicamente aparecen complicaciones si la perturbación también tiene autovalores múltiples. Para lo que nosotros vamos a hacer yo creo que solo necesitaremos la parte más sencilla de la teoría. Por eso, solo te voy a pedir leer una pequeña porción. Si utilizásemos algo más, ya volveríamos sobre ello.

12) Lee la parte de §1.2.2 en [3] correspondiente a las correcciones de orden uno en la energía. Esto es, hasta (1.2.26) con los *remarks* de después.

Nos hemos saltado §1.1.1 donde se da cierta intuición, basada en un ejemplo de dimensión 2, acerca de hasta qué límites podemos confiar en la teoría de la perturbación. Lo que te propongo a continuación es que examines la situación numéricamente en un ejemplo de dimensión mayor. Si la hoja se ha hecho muy larga o excede lo que quieres poner en tu trabajo, sáltate este último ejercicio.

Sea la matriz tridiagonal $A \in \mathcal{M}_{N \times N}$ con $a_{ii} = 2$, $a_{ij} = 1$. Se conoce [1, Prop.2.1] que sus autovalores son

$$\lambda_k = 4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{k\pi}{2(N+1)} \right) \quad \text{con } k = 1, 2, \dots, N.$$

Considera la perturbación $A \mapsto A + \epsilon \mathbf{1}/N$ donde $\mathbf{1}$ es la matriz $N \times N$ con todos sus elementos iguales a 1.

13) Para $N = 50$, dibuja la gráfica de $\|\vec{w}_N - \vec{v}_N^\epsilon\|/\epsilon$ con $\epsilon \in [N^{-3}, N^{-2}]$ donde \vec{w}_N es el autovector del mayor autovalor de la matriz $A + \epsilon \mathbf{1}/N$ y \vec{v}_N^ϵ es su aproximación usando teoría de la perturbación sobre la matriz A .

La gráfica confirma en este ejemplo lo que sugiere §1.1.1 y es que cuando vamos más allá de la separación mínima entre autovalores, que este caso es del orden de N^{-2} , podemos entrar en problemas. En el extremo derecho ya hay un error relativo que se aproxima al 10 %.

Tarea a entregar. Escribe un documento que describa la teoría de la perturbación con lo que has aprendido a través los ejercicios anteriores. En gran medida deberás reflejar, con tus propias palabras, lo que has leído de [3] e ilustrarlo con los ejemplos que has trabajado. Por supuesto, no intentes escribir todos los detalles.

La extensión es libre pero intenta no superar las 6 páginas con el formato de esta hoja.

Referencias

- [1] D. Kulkarni, D. Schmidt, and S.-K. Tsui. Eigenvalues of tridiagonal pseudo-Toeplitz matrices. *Linear Algebra Appl.*, 297(1-3):63–80, 1999.
- [2] Wikipedia contributors. Proton radius puzzle — Wikipedia, the free encyclopedia. https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Proton_radius_puzzle&oldid=1044432150, 2021. [Online; accessed 20-September-2021].
- [3] B. Zwiebach. Quantum physics III. MIT OpenCourseWare, <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-06-quantum-physics-iii-spring-2018/>, 2018.